



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
Instituto de Física Gleb Wataghin

LUCAS DA SILVEIRA BUZO

CONDUTIVIDADE HALL TÉRMICA EM UMA FASE  
DE SÓLIDO DE SINGLETOS DE UM  
ANTIFERROMAGNETO FRUSTRADO

Campinas  
2023

LUCAS DA SILVEIRA BUZO

CONDUTIVIDADE HALL TÉRMICA EM UMA FASE  
DE SÓLIDO DE SINGLETOS DE UM  
ANTIFERROMAGNETO FRUSTRADO

Dissertação apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Física, na área de Física.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Luís Doretto

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO  
FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO  
ALUNO LUCAS DA SILVEIRA BUZO, E  
ORIENTADO PELO PROF. DR. RICARDO  
LUÍS DORETTO.

Campinas  
2023

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin  
Maria Graciele Trevisan - CRB 8/7450

B989c Buzo, Lucas da Silveira, 1997-  
Condutividade Hall térmica em uma fase de sólido de singletos de um antiferromagneto frustrado / Lucas da Silveira Buzo. – Campinas, SP : [s.n.], 2023.

Orientador: Ricardo Luís Doretto.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Sólido de singletos. I. Doretto, Ricardo Luís, 1976-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações Complementares

**Título em outro idioma:** Thermal Hall conductivity in a solid phase of singlets of a frustrated antiferromagnet

**Palavras-chave em inglês:**

Valence bond solid

**Área de concentração:** Física

**Titulação:** Mestre em Física

**Banca examinadora:**

Ricardo Luís Doretto [Orientador]

Eduardo Miranda

Eric de Castro e Andrade

**Data de defesa:** 05-07-2023

**Programa de Pós-Graduação:** Física

**Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)**

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-2785-1123>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/2461219987801239>



INSTITUTO DE FÍSICA  
GLEB WATAGHIN

MEMBROS DA COMISSÃO EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO LUCAS DA SILVEIRA BUZO - RA 265939, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 05/07/2023.

COMISSÃO JULGADORA:

- Prof. Dr. Ricardo Luís Doretto – Presidente e orientador (IFGW/UNICAMP)
- Prof. Dr. Eduardo Miranda (IFGW/UNICAMP)
- Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade (Instituto de Física de São Carlos/USP)

**OBS.:** Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS

2023

Dedico este trabalho aos meus pais, Claudinei e Irene, que sempre estiveram presentes em minha vida em tudo aquilo que me propus a fazer.

# Agradecimentos

Agradeço,

em especial ao Prof. Ricardo Luís Doretto, pela orientação, e por todos os momentos em que fui acolhido durante o desenvolvimento deste projeto;

à Unicamp e ao IFGW, pela ótima estrutura que oferecem aos estudantes e pesquisadores;

a todos os funcionários do IFGW, principalmente à CPG e à secretaria do DFMC pelo excelente suporte;

à CAPES, pela oportunidade dada por meio de minha bolsa de mestrado (Processo nº 88887.514501/2020-00);

aos amigos, que sempre estiveram presentes ajudando uns aos outros a não desistir e persistir com seus sonhos;

por fim, aos meus pais, por me darem a oportunidade de fazer tudo aquilo que eu quis na minha vida. Obrigado por isso.

## Resumo

Neste trabalho, calculamos a condutividade Hall térmica de um sistema antiferromagnético na rede quadrada que utiliza como estado fundamental o arranjo de sólido de singletos, conhecido como estado VBS (*Valence bond solid*), sendo que utilizamos o arranjo colunar para os cálculos. O VBS é então descrito por meio dos operadores de ligação, em que o hamiltoniano de spin original é descrito ou mapeado em um modelo efetivo de bósons interagentes que nada mais são do que as excitações elementares do nosso sistema, conhecidos como tríplons. Este hamiltoniano é então estudado na aproximação quadrática nos operadores de tripleto  $t$ , pois desconsideramos as interações entre as excitações. As dispersões são então calculadas e discutidas, o que nos leva à inserção no hamiltoniano da interação de Dzyaloshinskii-Moriya, que é relacionada à interação spin-órbita, a fim de quebrar a tripla degenerescência encontrada. Contudo, esta interação não é suficiente para quebrar a degenerescência das três bandas e, por isso, consideramos a adição de um campo magnético externo na direção  $z$ . Com as bandas completamente não degeneradas, podemos calcular as curvaturas de Berry e seus respectivos números de Chern, que nada mais é do que um indicador à respeito da natureza topológica das excitações. Verificamos que os números de Chern das bandas são nulos, o que nos leva a concluir que os tríplons não são topológicos. Por fim, com essa informação em mãos, calculamos a condutividade Hall térmica das excitações, verificando se questões ligadas à topologia poderiam interferir em aspectos de transporte do sistema. O que foi possível notar é que, mesmo com as bandas de energia dos tríplons sendo topologicamente triviais, o sistema apresenta uma condutividade Hall térmica finita.

**Palavras-chave:** Sólido de singletos, Número de Chern, Interação de Dzyaloshinskii-Moriya, Condutividade Hall térmica

## Abstract

In this work, we calculate the thermal Hall conductivity of an antiferromagnetic system in a square lattice, considering the valence bond solid (VBS) with colunar arrangement of the singlets as the ground state. The VBS is described via the bound operator formalism, where the original spin Hamiltonian is mapped into an effective model of interacting bosons, that are nothing more than the elementary excitations of our system, known as triplons. This Hamiltonian is then studied in the harmonic approximation, where only quadratic terms in the triplet operators  $t$  are considered. The dispersion relations of the triplons are then calculated and discussed, which leads us to include a Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the Hamiltonian, with the aim of breaking the degeneracy of the triplon bands previously found. However, this interaction is not enough to break the degeneracy of the three bands, and therefore, we also consider an external magnetic field in the  $z$  direction. With the bands completely nondegenerate, we calculate the Berry curvatures and the respective Chern numbers of the bands, which are nothing more than an indicator of the topological nature of the excitations. We verify that the Chern numbers of the triplon bands are zero, which leads us to conclude that the triplons are topologically trivial excitations. Finally, we calculate the thermal Hall conductivity associated with the triplons, in order to verify whether issues related to topology would interfere within transport aspects of the system. We find that, even with trivial topological bands, the system presents a finite thermal Hall conductivity.

**Keywords:** Valence bond solid, Chern number, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, Thermal Hall conductivity

# Lista de Figuras

2.1	Representação semiclássica de spins, sendo o arranjo em (a) ferromagnético, (b) antiferromagnético e (c) paramagnético. . . . .	17
2.2	Representação esquemática de possíveis estados fundamentais de um sistema antiferromagnético clássico na rede quadrada: (a) estado de Néel e (b) estado de listras, ambos colineares. . . . .	22
2.3	Sistema antiferromagnético clássico na rede triangular. Vemos em (a) um arranjo antiparalelo dos spins primeiros vizinhos, que ilustra o conceito de frustração magnética, e, em (b), o arranjo planar e não-colinear dos spins que minimiza a energia do sistema. . . . .	23
2.4	Solução da equação (2.47):(a) Para $JzM/T < 1$ o sistema admite apenas uma solução; (b) para $JzM/T > 1$ , há três possíveis soluções (pontos de intersecção entre as duas curvas). . . . .	26
3.1	(a) Representação esquemática do modelo $J_1$ - $J_2$ na rede quadrada. (b) Diagrama de fases do modelo $J_1$ - $J_2$ na rede quadrada dividida em três regiões: Néel, paramagnética (desordem), estado de listras (collinear). . . . .	36
3.2	Representações esquemáticas das fases de sólido de singletos (VBS) (a) colunar e (b) alternada na rede quadrada. As elipses azuis indicam que os spins $\mathbf{S}^1$ (círculos brancos) e $\mathbf{S}^2$ (círculos pretos) estão em um estado de singleto. (c) Representação esquemática da fase VBS no arranjo de plaquete na rede quadrada. O quadrado pontilhado azul indica que os spins $\mathbf{S}^1$ (círculo aberto), $\mathbf{S}^2$ (círculo preto), $\mathbf{S}^3$ (círculo vermelho), e $\mathbf{S}^4$ (círculo verde) formam um estado de singleto. . . . .	37
3.3	Representação dos vetores primitivos $\vec{\tau}_1$ e $\vec{\tau}_2$ da rede dimerizada colunar do estado VBS. . . . .	38
3.4	Primeira zona de Brillouin da rede quadrada dimerizada, onde $X = (\frac{\pi}{2}, 0)$ ; $M = (\frac{\pi}{2}, \pi)$ ; $Y = (0, \pi)$ e $\Gamma = (0, 0)$ . . . . .	42
3.5	(a) Parâmetro $N_0$ [Eq. (3.47)] como função de $J_2$ calculado numericamente para o estado VBS colunar na rede quadrada, e (b) parâmetro $\mu$ [Eq. (3.48)] como função de $J_2$ calculado numericamente para o estado VBS colunar na rede quadrada. . . . .	45
3.6	Dispersão dos triplons $\omega_{\vec{k}}$ [Eq. (3.44)] do estado VBS colunar da rede quadrada na aproximação harmônica restritos à primeira zona de Brillouin para os parâmetros (a) $J_2 = 0.48$ e (b) $J_2 = 0.52$ . . . . .	46

4.1	Representação esquemáticas de dois íons 1 e 2 utilizadas para expressar as cinco regras de Moriya. . . . .	48
4.2	Painel à esquerda: representação da rede cristalina do $\text{La}_2\text{CuO}_4$ na fase ortorrômbica a baixas temperaturas, indicando os íons $\text{La}^{3+}$ (azuis), $\text{O}^{2-}$ (verdes e vermelhos) e $\text{Cu}^{2+}$ (cinza); figura retirada da Ref. [58]. Painel à direita: representação dos vetores DM no plano de $\text{CuO}$ para a fase ortorrômbica do $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ; os círculos brancos indicam átomos de $\text{Cu}$ , que fornecem o spin $1/2$ . . . . .	49
4.3	Painel à esquerda: representação da rede cristalina do $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$ , indicando os planos de $\text{CuO}_2$ com $\text{Cu}$ (laranja) e $\text{O}$ (vermelhos), além dos átomos de $\text{Y}$ (azul escuro) e de $\text{Ba}$ (azul claro); figura retirada da Ref. [59]. Painel à direita: representação dos vetores de DM no plano de $\text{CuO}$ , os círculos brancos indicam átomos de $\text{Cu}$ , que fornecem o spin $1/2$ , sendo $\text{O}$ apenas o mediador da interação. . . . .	50
4.4	Região de estabilidade do VBS colunar (abaixo das curvas contínua e tracejada) para o modelo (4.20), considerando (linha contínua) e desprezando (linha tracejada) o termo linear (4.6). . . . .	56
4.5	Comportamento dos parâmetros (a) $N_0$ e (b) $\mu$ em termos do módulo $d$ dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca $J_2$ . Resultados determinados via solução numérica das Eqs. (4.35) e (4.36). . . . .	56
4.6	Dispersões $\Omega_k^\alpha$ dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para (a) $J_2 = 0.48$ e $d = 0.20$ e (b) $J_2 = 0.52$ e $d = 0.10$ na ausência (linhas contínuas) e presença (linhas tracejadas) do termo linear (4.6) associado à interação DM. . . . .	57
4.7	Dispersão $\Omega_k^\alpha$ dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para $J_2 = 0.48$ e $d = 0.30$ na ausência (linhas contínuas) e presença (linhas tracejadas) do termo linear (4.6) associado à interação DM. . . . .	57
4.8	Comportamento dos parâmetros (a) $\Delta$ e (b) $E'_0$ em termos do módulo $d$ dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca $J_2$ . Resultados determinados via a solução numérica da Eq. (4.28). . . . .	58
4.9	Região de estabilidade (abaixo das curvas contínua e tracejada) do VBS colunar para o modelo (4.38) na ausência (linha tracejada) e presença (linha contínua) de um campo magnético externo $B_z$ . . . . .	61
4.10	Comportamento dos parâmetros (a) $N_0$ e (b) $\mu$ em termos do módulo $d$ dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca $J_2$ para $B_z = 0.05$ . Resultados determinados via a solução numérica das Eqs. (4.46) e (4.47) (versão com campo magnético externo $B_z$ ). . . . .	61
4.11	Dispersões $\Omega_k^\alpha$ dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para o caso com adição do campo magnético externo $B_z$ ] para (a) $J_2 = 0.48$ e $d = 0.20$ e (b) $J_2 = 0.52$ e $d = 0.10$ com a presença do termo linear (4.6) associado à interação DM. . . . .	62

4.12	Comportamento dos parâmetros (a) $\Delta$ e (b) $E'_0$ em termos do módulo $d$ dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca $J_2$ . Resultados determinados via a solução numérica da Eq. (4.28) (versão com campo magnético externo $B_z$ ). . . . .	62
4.13	Dispersões $\Omega_k^\alpha$ dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5) para o caso com adição do campo magnético externo $B_z$ ] para (a) $J_2 = 0.48$ e $d = 0.00$ e (b) $J_2 = 0.52$ e $d = 0.00$ com a presença do termo linear (4.6) associado à interação DM. . . . .	63
5.1	Curvaturas de Berry das bandas de energia (a) $x$ , (b) $y$ e (c) $z$ dos triplons para o conjunto de parâmetros $J_2 = 0.48$ , $d = 0.10$ e $B_z = 0.05$ do modelo (4.38). . .	66
5.2	Curvaturas de Berry das bandas de energia (a) $x$ , (b) $y$ e (c) $z$ dos triplons para o conjunto de parâmetros $J_2 = 0.48$ , $d = 0.20$ e $B_z = 0.05$ do modelo (4.38). . .	67
5.3	Curvaturas de Berry das bandas de energia (a) $x$ , (b) $y$ e (c) $z$ dos triplons para o conjunto de parâmetros $J_2 = 0.52$ , $d = 0.10$ e $B_z = 0.05$ do modelo (4.38). . .	68
5.4	Representação esquemática do procedimento experimental utilizado para a medida de $\kappa_{xy}$ . Figura retirada da Ref. [64]. . . . .	71
5.5	Condutividade Hall térmica (5.11) para os triplons na fase VBS do AFM na rede quadrada (a) para $J_2 = 0.48$ (linhas tracejadas) e $J_2 = 0.52$ (linhas contínuas) e $d = 0.10$ e $0.20$ e (b) para $J_2 = 0.50$ e $d = 0.10$ e $0.20$ . Em todos os casos, o campo magnético externo $B_z = 0.05$ . . . . .	72
5.6	Função $c_2(x)$ [Eq. (5.13)] para $J_2 = 0.48$ , $d = 0.20$ , $B_z = 0.05$ , $x = \rho^B(\epsilon_{n\vec{k}})$ [Eq. (5.12)] e $T = 0.25$ com (a) $n = 1$ , (b) $n = 2$ e (c) $n = 3$ correspondendo as dispersões dos triplons $x, y$ e $z$ respectivamente. . . . .	73
5.7	Comportamento da função $c_2(x)\Omega_n(\vec{k})$ para $J_2 = 0.48$ , $d = 0.20$ , $B_z = 0.05$ , $x = \rho^B(\epsilon_{n\vec{k}})$ [Eq. (5.12)] e $T = 0.25$ com (a) $n = 1$ , (b) $n = 2$ e (c) $n = 3$ correspondendo as dispersões dos triplons $x, y$ e $z$ respectivamente. . . . .	74
5.8	Comportamento experimental de $\kappa_{xy}$ dividido em três regiões (figura retirada da Ref. [65]). . . . .	75
5.9	Condutividade Hall térmica (5.11) para os spinons em uma fase de líquido de spin para um AFM na rede quadrada. O gráfico da esquerda mostra a condutividade Hall térmica para spinons topologicamente não triviais encontrados sem a interação de DM; o gráfico da direita mostra a condutividade Hall térmica para spinons topologicamente triviais encontrados na presença da interação DM e considerando os vetores DM do composto $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$ (retirado da Ref. [11]). . .	75

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentos teóricos</b>	<b>17</b>
2.1	Magnetismo	17
2.1.1	O modelo de Heisenberg	18
2.1.2	Fases magnéticas clássicas	21
2.1.3	Magnetização espontânea e quebra de simetria	24
2.2	Topologia no estado sólido	27
2.3	Efeito Hall térmico de mágnons	32
<b>3</b>	<b>Sistema antiferromagnético na rede quadrada</b>	<b>36</b>
3.1	Introdução	36
3.2	A fase de sólido de singletos (VBS)	37
3.3	O modelo de Heisenberg para a fase VBS	38
3.4	Formalismo dos operadores de ligação	39
3.5	Diagonalização do hamiltoniano	42
3.6	O problema da degenerescência	47
<b>4</b>	<b>A interação de Dzyaloshinskii-Moriya</b>	<b>48</b>
4.1	Origem da interação	48
4.2	A interação DM e os operadores de ligação	49
4.3	O modelo $J_1 - J_2$ e a interação DM	53
4.4	A adição de um campo magnético externo	59
<b>5</b>	<b>Propriedades topológicas do sistema</b>	<b>64</b>
5.1	Introdução	64
5.2	Curvatura de Berry	64
5.3	O número de Chern bosônico	68
5.4	Condutividade Hall térmica	71
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>76</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>78</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>83</b>

<b>A</b>	<b>Funções auxiliares do modelo <math>H_{12}</math></b>	<b>84</b>
<b>B</b>	<b>Termos do hamiltoniano de Dzyaloshinskii-Moriya</b>	<b>85</b>
<b>C</b>	<b>Detalhes da diagonalização do hamiltoniano bosônico</b>	<b>87</b>
<b>D</b>	<b>Tratamento do termo bosônico linear</b>	<b>89</b>
<b>E</b>	<b>Matriz do hamiltoniano de Dzyaloshinskii-Moriya com adição do campo magnético externo <math>\vec{B}</math></b>	<b>93</b>
	E.0.1 Coeficientes de Bogoliubov . . . . .	93

# Introdução

Trabalhos recentes têm sido dedicados ao estudo de sistemas magnéticos bidimensionais, constituídos por spins  $\mathbf{S} = 1/2$  localizados em sítios de redes cristalinas e acoplados antiferromagneticamente [1, 2]. Em particular, sistemas magnéticos frustrados [2] são bastante interessantes, pois, além de fases com ordem magnética de longo alcance, fases paramagnéticas quânticas, como o sólido de singletos, também podem ser observadas [1, 3, 4]. Por sistemas magnéticos frustrados, estamos querendo nos referir àqueles sistemas que possuem a incapacidade ou inabilidade de minimizar simultaneamente a energia de todos os pares de spins acoplados. Recentemente, verificou-se que os sólidos de singletos também podem apresentar excitações elementares (bosônicas) topologicamente não-triviais [5]. Questões ligadas à topologia das excitações serão tratadas posteriormente. Contudo, podemos dizer, neste momento, que há uma quantidade (invariante topológico) que diz respeito à natureza topológica das excitações. Essa quantidade é o número de Chern [6, 7, 8, 9].

O número de Chern somente pode ser definido caso exista um *gap* entre as bandas de energia das excitações. Caso o número de Chern de uma banda indique que as excitações são topologicamente não-triviais, então basicamente temos excitações que possuem as mesmas propriedades até que, por ventura, ocorra o fechamento do *gap* entre as bandas. Isso faria com que houvesse uma possível transição do estado topológico anterior para um possível novo estado topologicamente trivial. Detalhamentos sobre as propriedades topológicas e o número de Chern de um sistema serão apontados devidamente adiante no trabalho. No momento, basta dizer que uma das questões que queremos responder é se as excitações encontradas em nosso sistema são topologicamente triviais ou não-triviais.

Por fim, pode-se calcular a condutividade Hall térmica [10, 11] para as excitações encontradas e verificar se questões ligadas à topologia das bandas de energia das quasipartículas influenciam diretamente no valor da condutividade Hall térmica. No presente trabalho, nos concentramos no estudo de um sistema antiferromagnético frustrado na rede quadrada descrito pelo modelo de Heisenberg  $J_1 - J_2$  acrescido de um termo de interação do tipo Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [12, 13]. Alguns trabalhos que estudaram este sistema para  $T = 0$  e na ausência do termo de DM [14, 15] mostraram que seu diagrama de fases é dividido em três regiões: Néel, paramagnética (ou desordenada) e estado de listras (detalhes serão mostrados mais adiante). Várias propostas têm sido feitas para o estado fundamental da fase desordenada do modelo  $J_1 - J_2$  na rede quadrada, sendo que uma delas é o sólido de singletos [Valence Bond Solid (VBS)] com arranjos colunar, alternado ou até mesmo uma fase tetramerizada do tipo plaquete [14, 15]; o outro possível candidato

para o estado fundamental dessa fase paramagnética é o líquido de spin com gap nulo ou finito. Recentemente, um conjunto de cálculos numéricos [16, 17, 18, 19] indicou que o sistema pode apresentar a fase VBS ou o líquido de spin para certas regiões de  $J_1/J_2$ . Estudaremos a região em que o VBS predomina e, assim, iremos realizar uma série de cálculos para verificar se as excitações são topologicamente triviais ou não-triviais, além de calcular a condutividade Hall térmica associada a essas excitações, conhecidas como triplons. Essas excitações elementares podem ser descritas via o formalismo da segunda quantização. Neste tratamento, utilizamos o espaço de Fock [20] e os possíveis estados do sistema são caracterizados pelos números de ocupação de um determinado conjunto de estados de partícula única. Entretanto, este tratamento difere para bósons e férmions, pois o número de ocupação dos férmions em um determinado estado de partícula única pode ser apenas 0 ou 1 devido ao princípio de exclusão de Pauli, enquanto, para bósons, este número pode assumir qualquer valor inteiro. Aqui, o sistema é descrito em termos de operadores de criação e destruição de partículas, que criam ou destroem partículas em um determinado estado de partícula única. Utilizaremos frequentemente essa notação quando introduzirmos o conceito de operadores de ligação [21] para descrever os operadores de spin presentes no modelo de Heisenberg considerado no nosso trabalho.

Dividimos o presente trabalho da seguinte forma: No Capítulo 2, faremos uma breve discussão teórica sobre alguns conceitos e quantidades que estarão presentes em nosso trabalho, seguido do Capítulo 3, que contém as informações acerca do modelo tratado neste trabalho, da fase VBS, do formalismo dos operadores de ligação e o primeiro tratamento em campo médio do modelo de Heisenberg na rede quadrada. No Capítulo 4, é introduzido o termo de Dzyaloshinskii-Moriya no modelo considerado no capítulo anterior. Em seguida, no Capítulo 5, o número de Chern das bandas de energia dos triplons é calculado e a condutividade Hall térmica é determinada. Finalmente, as conclusões sobre nosso estudo são apresentadas no Capítulo 6. Detalhes de alguns cálculos apresentados no texto principal são mostrados nos cinco Apêndices presentes ao final deste trabalho.

# Fundamentos teóricos

## 2.1 Magnetismo

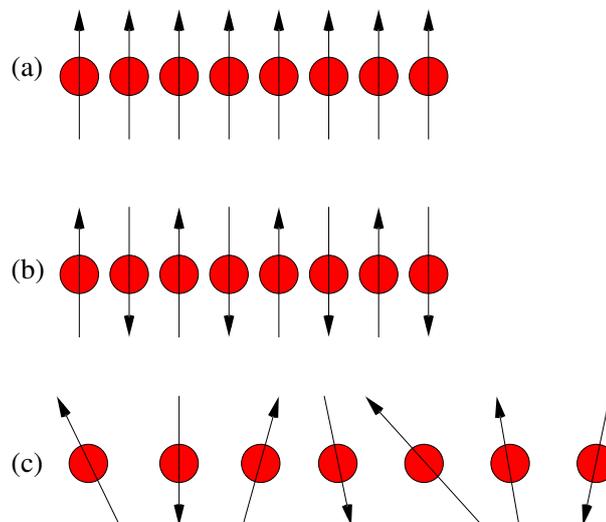
Nosso trabalho é dedicado ao estudo de propriedades magnéticas de um cristal, por isso, nada mais justo do que apresentar alguns fundamentos teóricos do magnetismo que estarão presentes ao longo do texto.

O magnetismo está relacionado com o spin (propriedade intrínseca) das partículas, sendo uma quantidade quantizada [22]. Como resultado, a depender da disposição das partículas no espaço, visualizamos efeitos macroscópicos desse fenômeno. O spin  $\mathbf{S}$  é quantizado, pois foi verificado que o momento angular das partículas atômicas, por exemplo, o elétron, não poderia assumir quaisquer valores. Em particular, para o elétron (partícula de spin  $\mathbf{S} = 1/2$ ), a componente  $z$  do momento de dipolo magnético  $\mu_z$  pode assumir dois valores,

$$\begin{aligned}\mu_z &= +\frac{q_e\hbar}{2m}, \\ \mu_z &= -\frac{q_e\hbar}{2m},\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde  $q_e$  é a carga do elétron,  $m$  é a massa do elétron e  $\hbar = h/2\pi$ , sendo  $h$  a constante de Planck. De fato, a relação entre o momento magnético  $\vec{\mu}$  e o spin  $\mathbf{S}$  é dada por,

$$\vec{\mu} = \frac{q_e}{m}\mathbf{S}.\tag{2.2}$$



**Figura 2.1:** Representação semiclássica de spins, sendo o arranjo em (a) ferromagnético, (b) antiferromagnético e (c) paramagnético.

Com isso, há apenas dois valores possíveis para a componente  $z$  do spin  $\mathbf{S}$  do elétron,

$$\begin{aligned} S_z &= +\frac{\hbar}{2}, \\ S_z &= -\frac{\hbar}{2}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Há maneiras distintas dos spins se disporem na rede cristalina de um determinado material, sendo que algumas delas geram o que conhecemos como materiais ferromagnéticos ou antiferromagnéticos. Nos materiais, os spins interagem por meio de um mecanismo conhecido como interação de troca (*exchange interaction*) que é descrita por uma quantidade  $J$ , que pode ser positiva ou negativa dependendo do sistema: quando  $J$  é positivo, dizemos que o sistema é antiferromagnético e, quando  $J$  é negativo, o sistema é ferromagnético. A Fig. 2.1 mostra uma representação semiclássica de alguns arranjos de spins em sistemas de muitas partículas.

### 2.1.1 O modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg é utilizado para descrever um sistema em termos dos graus de liberdade de spin. Iremos utilizar este modelo para escrever o hamiltoniano do nosso sistema e, dessa forma, faremos uma breve introdução sobre sua origem.

Sejam dois átomos de hidrogênio interagindo entre si, de modo que o hamiltoniano deste sistema é dado por

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{q^2}{cr_{1a}} - \frac{q^2}{cr_{2b}} - \frac{q^2}{cr_{1b}} - \frac{q^2}{cr_{2a}} + \frac{q^2}{cr_{12}} + \frac{q^2}{cR_{ab}}. \tag{2.4}$$

Aqui, o índice 1 refere-se ao elétron do primeiro átomo e  $a$  ao seu próton, o índice 2 refere-se ao elétron do segundo átomo, com  $b$  sendo seu próton. Além disso, a constante  $c = 4\pi\epsilon_0$ ,  $p_1$  e  $p_2$  são, respectivamente, os momentos lineares dos dois elétrons 1 e 2,  $m$  é a massa do elétron,  $r_{ij}$  é a distância entre as partículas  $i$  e  $j$ , com  $i, j = 1, 2, a, b$  e, finalmente,  $R_{ab}$  é a distância entre os prótons dos átomos 1 e 2. Aqui, as energias cinéticas dos prótons não são consideradas, pois assumimos que eles estão fixos no espaço.

Para calcular o valor médio da energia do sistema, vamos utilizar o método variacional, isto é,

$$E[\Psi] = \frac{\int \Psi^* H \Psi d^3r_1 d^3r_2}{\int \Psi^* \Psi d^3r_1 d^3r_2}. \tag{2.5}$$

Para a função tentativa  $\Psi$ , utilizaremos combinações lineares dos problemas de dois átomos de hidrogênio isolados,

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_a(\vec{r}_1)\Phi_b(\vec{r}_2) \pm \Phi_a(\vec{r}_2)\Phi_b(\vec{r}_1)], \tag{2.6}$$

onde  $\Phi_a(\vec{r}_1)$  é a função de onda (parte espacial) do estado fundamental do átomo isolado 1 e  $\Phi_b(\vec{r}_2)$  é a função de onda (parte espacial) do estado fundamental do átomo isolado 2, que são encontradas por meio das expressões,

$$\left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{q^2}{cr_{1a}}\right) \Phi_a(\vec{r}_1) = \varepsilon_0 \Phi_a(\vec{r}_1), \quad (2.7)$$

$$\left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{q^2}{cr_{2b}}\right) \Phi_b(\vec{r}_2) = \varepsilon_0 \Phi_b(\vec{r}_2). \quad (2.8)$$

Os estados  $\Psi_+$  e  $\Psi_-$  em (2.6) estão, respectivamente, relacionados aos estados de singlete e tripleto do sistema: Lembrando que os estados de singlete e tripleto são resultados provenientes da teoria da soma de momentos angulares da mecânica quântica; no nosso caso, um sistema constituído por dois spins  $\mathbf{S} = 1/2$ ; podemos representar estes estados pela notação  $|s, m\rangle$  e, assim, obtemos os estados,

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (2.9)$$

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (2.10)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (2.11)$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (2.12)$$

onde, para  $s = 0$ , temos um único estado de singlete e, para  $s = 1$ , temos três estados de tripleto para o conjunto de dois átomos de hidrogênio; como o estado  $|\Psi_T\rangle$  do sistema de dois átomos deve ser antissimétrico em relação à troca de duas partículas, temos que a combinação linear (espacial) simétrica  $\Psi_+$  em (2.6) está associada ao estado de singlete,

$$|\Psi_T\rangle = |\Psi_+\rangle|0, 0\rangle, \quad (2.13)$$

enquanto a combinação linear antissimétrica  $\Psi_-$  está associada ao estado de tripleto,

$$|\Psi_T\rangle = |\Psi_-\rangle|1, m\rangle, \quad (2.14)$$

com  $m = -1, 0, 1$ .

É interessante definirmos algumas quantidades para determinarmos a energia variacional (2.5):

$$\int \Psi_{\pm}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 = 1 \pm \alpha^2, \quad (2.15)$$

onde,

$$\alpha = \int \Phi_a^*(\vec{r}_1) \Phi_b(\vec{r}_1) d^3r_1 = \int \Phi_a^*(\vec{r}_2) \Phi_b(\vec{r}_2) d^3r_2. \quad (2.16)$$

A parte relacionada à interação entre os dois átomos do hamiltoniano (2.4), ou seja,

$$H_i = \frac{q^2}{cr_{12}} + \frac{q^2}{cR_{ab}} - \frac{q^2}{cr_{1b}} - \frac{q^2}{cr_{2a}}, \quad (2.17)$$

pode ser trabalhada no numerador de (2.5), de tal modo que podemos definir,

$$V = \int \Phi_a^*(\vec{r}_1) \Phi_b^*(\vec{r}_2) H_i \Phi_a(\vec{r}_1) \Phi_b(\vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2, \quad (2.18)$$

e,

$$U = \int \Phi_a^*(\vec{r}_1) \Phi_b^*(\vec{r}_2) H_i \Phi_a(\vec{r}_2) \Phi_b(\vec{r}_1) d^3r_1 d^3r_2, \quad (2.19)$$

em que  $V$  é conhecida como integral de Coulomb ou integral direta e  $U$  é a chamada integral de troca. Finalmente, podemos escrever o numerador de (2.5) como

$$\int \Psi^* H \Psi d^3r_1 d^3r_2 = V \pm U + 2\varepsilon_0(1 \pm \alpha). \quad (2.20)$$

Segue que as soluções para as energias dos estados simétrico (2.13) e antissimétrico (2.14) são dadas por

$$E_{\pm} = 2\varepsilon_0 + \frac{V \pm U}{1 \pm \alpha^2}, \quad (2.21)$$

sendo que a diferença entre as energias dos estados de singleto e tripleto do sistema é

$$E_s - E_t = -2 \frac{V\alpha^2 - U}{1 - \alpha^4}. \quad (2.22)$$

Precisamos agora encontrar um hamiltoniano efetivo  $H_{eff}$  que atue nas componentes de spin dos estados (2.13) e (2.14) ao invés das componentes espaciais, de modo que

$$\begin{aligned} H_{eff} |0, 0\rangle &= E_+ |0, 0\rangle, \\ H_{eff} |1, m\rangle &= E_- |1, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Ocorre que existe um  $H_{eff}$  que possui esse comportamento, sendo dado por

$$H_{eff} = J_0 - J_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.24)$$

onde,

$$J_0 = \frac{1}{4} (E_+ + 3E_-), \quad (2.25)$$

$$J_{12} = \frac{1}{\hbar^2} (E_+ - E_-) = \frac{2}{\hbar^2} \frac{U - V\alpha^2}{1 - \alpha^4} \quad (2.26)$$

e  $\vec{S}_i$  é o operador de spin associado ao átomo  $i$ . Dessa forma, podemos concluir que o hamiltoniano (2.4) é equivalente ao hamiltoniano efetivo (2.24), porém cada hamiltoniano

está escrito em termos de graus de liberdade distintos. O hamiltoniano efetivo  $H_{eff}$  é conhecido como hamiltoniano de Heisenberg e pode ser escrito como

$$H = J_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.27)$$

onde desprezamos a constante  $J_0$  e incluímos o sinal negativo na definição da constante de troca  $J_{12}$ . Contudo, deve-se lembrar que o sinal da constante de troca  $J_{12}$  depende da diferença energética entre os estados de singleto e tripleto do sistema em questão [Eq. (2.26)], podendo assumir valores positivos (sistemas antiferromagnéticos) ou negativos (sistemas ferromagnéticos).

Finalmente, podemos generalizar o hamiltoniano (2.27) para uma rede, ou seja,

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.28)$$

onde  $\vec{S}_i$  é o operador de spin associado ao sítio  $i$  da rede e  $J_{ij}$  é a constante de troca que descreve a interação entre os spins localizados nos sítios  $i$  e  $j$  da rede. Este modelo será utilizado como ponto de partida para descrever o sistema proposto neste trabalho.

Podemos considerar algumas variantes do modelo (2.27) (para mais detalhes, veja as Refs. [23, 24]). Duas delas são o modelo  $XY$ , cujo hamiltoniano é dado por

$$H_{XY} = \sum_{\langle i,j \rangle} J (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y), \quad (2.29)$$

e o chamado modelo de Ising,

$$H_{Ising} = \sum_{\langle i,j \rangle} J S_i^z S_j^z, \quad (2.30)$$

onde o termo  $\langle i, j \rangle$  indica interação somente entre os spins primeiros vizinhos da rede. Os modelos (2.29) e (2.30) podem descrever alguns sistemas dependendo de suas propriedades macroscópicas, pois, em alguns casos, a constante de acoplamento  $J$  pode ser não uniforme e dependente da direção. Em materiais tetragonais, por exemplo, temos  $J_x = J_y \neq J_z$ . Como dito anteriormente, os dois modelos acima podem ser aplicados para descrever sistemas realísticos, no entanto, o modelo  $XY$  é uma aproximação para o caso  $J_x = J_y \gg J_z$ , enquanto o modelo de Ising para  $J_x, J_y \ll J_z$ ; o modelo de Ising descreve tanto sistemas clássicos quanto quânticos, a depender do valor do spin.

### 2.1.2 Fases magnéticas clássicas

Vamos utilizar o modelo de Heisenberg (2.28) para compreendermos o comportamento clássico (spin  $S \gg 1$ ) de tais sistemas magnéticos (para mais detalhes, veja as Refs. [23, 24]).

Sejam dois spins 1 e 2 em sítios vizinhos de uma rede e descritos por vetores clássicos. Nesse caso, podemos reescrever (2.28) como

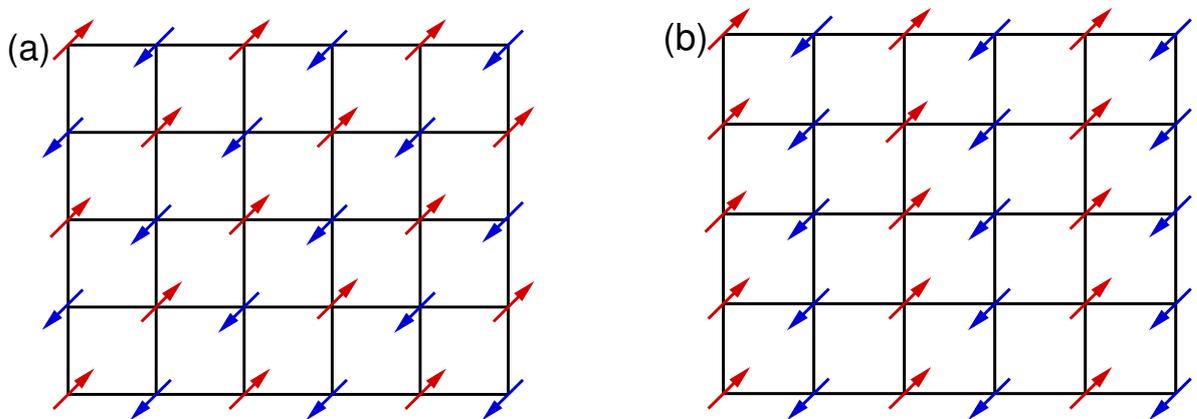
$$H = JS^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\Phi_{ij}), \quad (2.31)$$

em que  $S$  é o módulo dos spins  $S_1$  e  $S_2$  e  $\Phi_{ij}$  é o ângulo formado entre os vetores  $S_1$  e  $S_2$ . Nessas circunstâncias, o modelo (2.31) com  $J > 0$  favorece o alinhamento antiparalelo dos spins (sistema antiferromagnético), pois a energia  $E_0$  do sistema será a menor possível para ângulos  $\Phi_{ij} = \pi$ , isto é,

$$E_0 = -\frac{JS^2 Nz}{2}, \quad (2.32)$$

onde  $z$  é o número de spins primeiros vizinhos e  $N$  é o número de sítios da rede. Caso semelhante acontece se considerarmos  $J < 0$ : nesse caso, o ângulo entre os spins que minimiza a energia total é igual a zero, ou seja, os spins estão alinhados na mesma direção do espaço (sistema ferromagnético).

Consequimos, especificando a rede, entender melhor a disposição dos spins no estado fundamental em um sistema antiferromagnético. Em particular, para a rede quadrada, a Fig. 2.2 (a) representa esquematicamente o estado fundamental do hamiltoniano (2.28) para  $J > 0$ , conhecido como estado de Néel. Note que este problema possui uma simetria tal que a direção em que os spins apontam pode ser arbitrária: qualquer rotação dos spins  $S_i$  e  $S_j$  de um ângulo  $\theta$  em torno de um certo eixo e que mantenha  $\Phi_{ij}$  invariante preserva o estado de Néel. Veja que se tratando de um modelo que considera apenas interação entre primeiros vizinhos, não há nenhuma frustração magnética, ou seja, todos os primeiros vizinhos de qualquer "spin vermelho" ou "spin azul" estão dispostos de tal maneira a minimizar a energia de todos os pares de spin interagentes do sistema. Como será mostrado mais adiante, vamos considerar o modelo de Heisenberg (2.28) antiferromagnético na



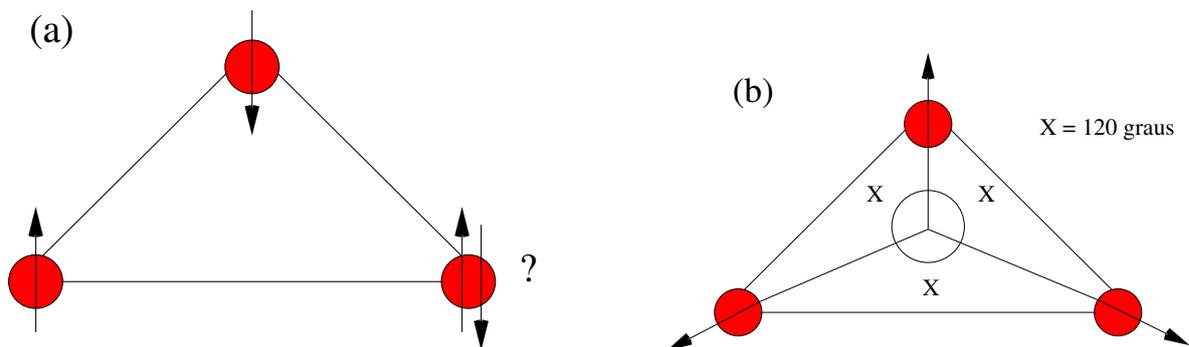
**Figura 2.2:** Representação esquemática de possíveis estados fundamentais de um sistema antiferromagnético clássico na rede quadrada: (a) estado de Néel e (b) estado de listras, ambos colineares.

rede quadrada, porém vamos considerar interações entre primeiros e também segundos vizinhos. Nesse caso, veja que, para a interação entre segundos vizinhos (diagonal que liga dois "spins vermelhos" ou "spins azuis"), os spins estão na mesma direção e sentido, ou seja, não estão dispostos de modo a minimizar a energia em sua interação. Portanto, é neste sentido que o chamado modelo de Heisenberg antiferromagnético  $J_1 - J_2$  na rede quadrada é um exemplo de um sistema magnético frustrado, pois não é possível satisfazer simultaneamente todos os pares de interação do sistema. Entretanto, em alguns casos, o estado de Néel ainda é a configuração que minimiza a energia total do modelo  $J_1 - J_2$ . Apenas se assumíssemos  $J_2$  negativo, então teríamos a menor energia entre segundos vizinhos, resolvendo o problema da frustração, mas este não será o caso. Finalmente, deve-se mencionar que os spins de um sistema antiferromagnético na rede quadrada ainda podem se organizar de modo diferente ao arranjo mostrado na Fig. 2.2 (a): como discutido abaixo, veremos que o modelo  $J_1 - J_2$  admite um estado fundamental de listras, como mostrado na Fig. 2.2 (b).

Podemos entender melhor o conceito de frustração magnética, considerando o modelo de Heisenberg antiferromagnético (2.28) em uma rede triangular. Como mostrado na Fig. 2.3 (a), não é possível satisfazer simultaneamente o alinhamento antiparalelo entre os três spins que interagem entre si em pares. Existe, entretanto, uma saída para este problema. É possível determinar o estado fundamental do sistema reescrevendo o hamiltoniano  $H_\Delta$  como

$$H_\Delta = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) = \frac{J}{2}(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3)^2 - \frac{3JS^2}{2}. \quad (2.33)$$

Nesse caso, podemos minimizar a energia do sistema se  $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3) = 0$ . Note que essa condição pode ser satisfeita se os três spins se encontrarem num plano com ângulo relativo igual a  $120^\circ$  [veja a Fig. 2.3 (b)].



**Figura 2.3:** Sistema antiferromagnético clássico na rede triangular. Vemos em (a) um arranjo antiparalelo dos spins primeiros vizinhos, que ilustra o conceito de frustração magnética, e, em (b), o arranjo planar e não-colinear dos spins que minimiza a energia do sistema.

### 2.1.3 Magnetização espontânea e quebra de simetria

Em sistemas reais, não necessariamente encontramos sistemas antiferromagnéticos (AFM) em um estado de Néel, pois a ordem magnética de longo alcance depende da temperatura do material. Definimos então a magnetização (veja Ref. [25] para mais detalhes), uma quantidade capaz de quantificar o efeito total da disposição destes spins no material. Em sistemas ferromagnéticos (FM), temos

$$\vec{M}_{FM} = \sum_i^N \langle \mathbf{S}_i \rangle, \quad (2.34)$$

enquanto, para sistemas antiferromagnéticos do tipo Néel, é interessante introduzir a magnetização alternada (*staggered*).

$$\vec{M}_{stag} = \sum_i^N (-1)^i \langle \mathbf{S}_i \rangle. \quad (2.35)$$

Em ambas as expressões, temos a soma de todos os  $N$  momentos magnéticos da rede dados por  $\langle \vec{S}_i \rangle$ , que é o valor esperado do spin em cada sítio  $i$  da rede.

É possível determinar aproximadamente o comportamento da magnetização de um sistema em termos da temperatura via uma aproximação de campo médio. Nesse caso, procura-se descrever o problema de muitos corpos interagentes como um problema de uma única interação efetiva. No entanto, esta aproximação não é muito precisa, pois é dependente da dimensionalidade do sistema tratado, como veremos adiante. A seguir, seguiremos o procedimento descrito na Sec. 2 da referência [26].

Vamos considerar o modelo de Ising (2.30) ferromagnético. Seja  $\vec{S}_i$  um spin qualquer na rede de spins e  $z$  o número de primeiros vizinhos, como mostrado na Fig. 2.2 (a) para o estado de Néel. Considere que os spins ao redor de  $\vec{S}_i$  estão estáticos e que  $\vec{S}_i$  pode ser *up* ou *down*, pois estamos considerando apenas as componentes  $S_z$  dos spins. Além disso, vamos supor que o sistema está submetido à um campo magnético externo  $h$ . A teoria de campo médio de Weiss assume que cada spin pode ser escrito como seu valor médio mais flutuações em torno da média, ou seja,

$$S_i^z = \langle S_i^z \rangle + \delta S_i^z. \quad (2.36)$$

Dessa forma, podemos escrever (2.30) como

$$H_{Ising}^{FM} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle + \langle S_i^z \rangle \delta S_j^z + \delta S_i^z \langle S_j^z \rangle + O[(\delta S^z)^2]) - h \sum_i S_i^z. \quad (2.37)$$

Desprezando termos quadráticos nas flutuações de spin e reescrevendo as flutuações em

termos dos spins originais, temos que

$$H_{Ising}^{FM} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (-\langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle + \langle S_i^z \rangle S_j^z + S_i^z \langle S_j^z \rangle) - h \sum_i S_i^z. \quad (2.38)$$

Considerando  $\langle S_i^z \rangle = M_i$ , podemos reescrever (2.38) como

$$H_{Ising}^{FM} = J \sum_{\langle i,j \rangle} M_i M_j - J \sum_i \sum_j M_j S_i^z - J \sum_j \sum_i M_i S_j^z - h \sum_i S_i^z. \quad (2.39)$$

Aqui, faremos  $\langle S_i^z \rangle = M_i = \langle S_j^z \rangle = M_j = M$ , que é a magnetização devido o alinhamento médio dos spins vizinhos a  $\vec{S}_i$  ( $M$  para magnetização na direção  $+z$  e  $-M$  para magnetização na direção  $-z$ ). Além disso, no terceiro termo de (2.39), podemos trocar a ordem dos índices  $i$  e  $j$ , de tal modo que a Eq. (2.39) se torna

$$H_{Ising}^{FM} = JM^2 Nz - (2JzM + h) \sum_i S_i^z, \quad (2.40)$$

em que  $N$  é o número de spins da rede. Vale lembrar que  $z = 4$  para a rede quadrada. Assim, para evitar uma dupla contagem dos termos da soma, é necessário introduzirmos um fator  $1/2$ , de modo que (2.40) assume a forma

$$H_{Ising}^{FM} = \frac{JM^2 Nz}{2} - (JzM + h) \sum_i S_i^z. \quad (2.41)$$

Note que para o hamiltoniano (2.41) tudo se passa como se agora o spin  $S_i^z$  interagisse com um campo magnético efetivo de módulo  $h_w = JzM + h$ . Para prosseguir com a determinação da magnetização deste sistema, faremos  $k_B = \hbar = 1$ .

Da física estatística, sabemos que a magnetização de um sistema pode ser calculada como

$$M = -\frac{\partial F}{\partial h}, \quad (2.42)$$

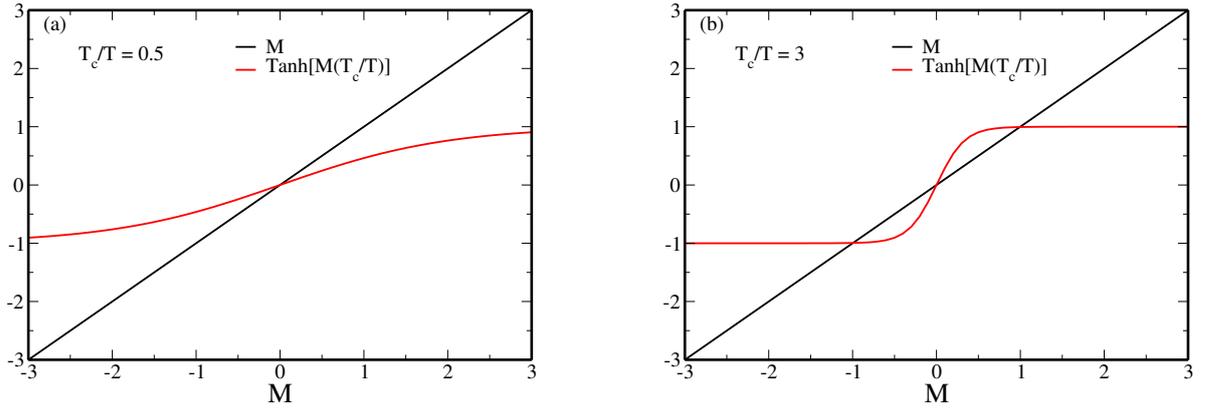
ou seja,  $M$  pode ser entendida como uma resposta do sistema à um campo externo aplicado. Aqui,  $F$  é a energia livre dada por

$$F = -T \ln Z, \quad (2.43)$$

sendo  $Z$  a função de partição dada por

$$Z = \sum_j g_j \exp^{-\beta E_j}, \quad (2.44)$$

e  $g_j$  é o grau de degenerescência da autoenergia  $E_j$  e  $\beta = 1/k_B T$ .



**Figura 2.4:** Solução da equação (2.47):(a) Para  $JzM/T < 1$  o sistema admite apenas uma solução; (b) para  $JzM/T > 1$ , há três possíveis soluções (pontos de intersecção entre as duas curvas).

Portanto para nosso caso, as Eqs. (2.44) e (2.43) assumem a forma

$$Z = \exp^{-\beta N J z M^2 / 2} [2 \cosh(\beta h_w)]^2 \quad (2.45)$$

e

$$F = \frac{J N z M^2}{2} - N T \ln [2 \cosh(h_w/T)], \quad (2.46)$$

respectivamente, e portanto,

$$M = \tanh \left[ \frac{1}{T} (J z M + h) \right]. \quad (2.47)$$

A equação (2.47) é uma equação transcendente. Podemos resolver esta equação e determinar a magnetização  $M$  plotando ambos os lados da equação num gráfico, como mostrado na Fig. 2.4. Veja que, quando  $JzM/T < 1$  ( $T > zJ$ ), a única solução é  $M = 0$ . Isso mostra que a temperatura  $T$  é alta o suficiente para causar desordem total no sistema, ou seja, não há ordem magnética de longo alcance. Quando  $JzM/T > 1$  ( $T < zJ$ ), temos três soluções:  $M = 0$  e  $M = +M, -M$ . Entretanto, como não há preferência para a magnetização  $M = +M$  ou  $M = -M$ , dizemos que há uma probabilidade igual para o sistema atingir estes dois valores caso ocorra alguma flutuação na região  $M = 0$ . Note que a temperatura crítica  $T_c$  que separa as fases com magnetização nula e finita é dada por

$$T = T_c = zJ. \quad (2.48)$$

Além disso, mesmo para  $h = 0$ , vemos que há magnetização no sistema, ou seja, a magnetização surge espontaneamente. Note também que  $T_c$  é proporcional ao número de vizinhos de  $\vec{S}_i$ . Para o caso unidimensional ( $z = 2$ ), a equação (2.48) mostra que há magnetização espontânea para temperaturas  $T < T_c = 2J$ . Entretanto, sabemos que o modelo de Ising unidimensional (1D) não apresenta magnetização espontânea a temperatura  $T$  finita, fato

que nos leva a concluir que, para baixas dimensões, a aproximação de campo médio não é apropriada. Para sistemas antiferromagnéticos, a temperatura crítica (2.48) é conhecida como temperatura de Néel  $T_N$ .

O físico Lev Davidovich Landau [27] propôs uma teoria que descreve as transições de fase clássicas em que a magnetização é o parâmetro de ordem. Landau foi um dos primeiros a perceber que a transição entre uma fase paramagnética e uma fase ferromagnética está vinculada com uma mudança na simetria do sistema. O que ocorre é que, muitas vezes, o hamiltoniano que descreve o sistema possui uma simetria maior que o estado fundamental. Por exemplo, o modelo de Heisenberg (2.28) é invariante por rotação de spin em relação a qualquer direção; porém, em uma fase ferromagnética, os spins procuram se alinhar em uma dada direção preferencial e, assim, o estado fundamental é invariante apenas por rotações ao longo do eixo da magnetização. Quando isso acontece, surge o que conhecemos por **quebra espontânea de simetria**. Nesse caso, há o surgimento dos modos de Nambu-Goldstone, que são excitações cuja dispersão  $\omega(\vec{k})$  vai a zero quando o vetor de onda  $\vec{k}$  tende a zero, em outras palavras, não há um *gap* para a criação dessas excitações. O teorema de Goldstone afirma que sempre que uma simetria contínua é quebrada espontaneamente, novas partículas escalares sem massa (ou muito leves, se a simetria não for exata) aparecem dentro do espectro de possíveis excitações. Para sistemas ferromagnéticos, na região de longos comprimentos de onda, a dispersão das excitações elementares (ondas de spin ou mágnons)  $\omega(\vec{k}) \sim |k^2|$ , enquanto que, para o caso antiferromagnético,  $\omega(\vec{k}) \sim |k|$ .

## 2.2 Topologia no estado sólido

As excitações de um determinado sistema em matéria condensada podem ser classificadas com topologicamente triviais ou não-triviais. A topologia nesse caso é referente ao hamiltoniano do sistema, cujas excitações podem ou não manter determinadas características quando variamos alguns parâmetros do hamiltoniano, como, por exemplo, campo magnético externo, magnitude da interação entre os spins, etc. Ocorre que, se estas mudanças não alterarem uma quantidade que vamos definir adiante, dizemos que as excitações são topologicamente protegidas. No entanto, pode acontecer do sistema passar por uma transição de uma fase topologicamente não-trivial para uma fase topologicamente trivial devido a alterações no hamiltoniano.

A quantidade que indica se as excitações provém de uma fase topológica ou não é conhecida como número de Chern (invariante topológico) [6, 7, 8]. Este parâmetro não muda enquanto a natureza topológica ou não do sistema não for modificada. Além disso, o número de Chern pode apenas ser nulo (excitações topologicamente triviais) ou finito inteiro (excitações topologicamente não-triviais). Vale ainda lembrar que as excitações elementares de um sistema podem ser de natureza bosônica ou fermiônica. Definir este

invariante topológico (número de Chern) somente é possível se a seguinte condição a respeito das bandas de energia das excitações do sistema for satisfeita: as bandas de energia não podem ser degeneradas em nenhum ponto na primeira zona de Brillouin (considerando um sistema cristalino).

Antes de iniciarmos uma discussão mais profunda sobre o invariante topológico, vamos, inicialmente, considerar a chamada curvatura de Berry [28, 29], que é proveniente do estudo de evoluções adiabáticas de hamiltonianos com dependência temporal. Michael Berry compreendeu que, quando consideramos processos em que o hamiltoniano varia muito lentamente, há o surgimento de uma fase geométrica em seus autoestados. Essa fase é conhecida como fase de Berry e será explicada sucintamente abaixo (para mais detalhes, veja a Sec. 5.6 da Ref. [22]).

Primeiramente, faremos a hipótese de que  $H = H(t) = H[\vec{R}(t)]$ , em que  $\vec{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \dots)$  é um conjunto de parâmetros que varia lentamente no tempo. Aqui, é interessante introduzir o conceito de base instantânea  $|\varphi_n(t)\rangle$ , que é um autoestado do hamiltoniano  $H(t)$  para  $t$  fixo, isto é,

$$H(t)|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)|\varphi_n(t)\rangle, \quad (2.49)$$

onde  $\langle\varphi_n(t)|\varphi_m(t)\rangle = \delta_{n,m}$ , para  $t$  fixo.

A equação de movimento de um estado arbitrário  $|\varphi(t)\rangle$  é dada por

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle = H(t)|\varphi(t)\rangle. \quad (2.50)$$

Podemos ainda considerar que

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|\varphi_n(t)\rangle. \quad (2.51)$$

Combinando as Eqs. (2.50) e (2.51), podemos encontrar a seguinte expressão

$$i\hbar\dot{C}_k(t) - E_k(t)C_k(t) = -i\hbar\sum_n C_n(t)\langle\varphi_k(t)|\frac{d}{dt}|\varphi_n(t)\rangle. \quad (2.52)$$

A próxima etapa é determinar o termo  $\langle\varphi_k(t)|\frac{d}{dt}|\varphi_n(t)\rangle$ . A partir de  $\langle\varphi_n(t)|\varphi_n(t)\rangle = 1$  verifica-se que

$$\langle\varphi_n(t)|\frac{d}{dt}|\varphi_n(t)\rangle = i\alpha_n(t), \quad (2.53)$$

isto é, o termo  $\langle\varphi_k(t)|\frac{d}{dt}|\varphi_n(t)\rangle$  é imaginário puro, pois  $\alpha_n(t)$  é real. Por outro lado, a partir da Eq. (2.49), verifica-se que, para  $n \neq k$ ,

$$\langle\varphi_k(t)|\frac{d}{dt}|\varphi_n(t)\rangle = \frac{\langle\varphi_k(t)|\dot{H}|\varphi_n(t)\rangle}{E_n(t) - E_k(t)}. \quad (2.54)$$

Dessa forma, a Eq. (2.52) pode ser escrita como

$$\dot{C}_k(t) + \frac{i}{\hbar} [E_k(t) + \hbar\alpha_k(t)] C_k(t) = - \sum_{n \neq k} C_n(t) \frac{\langle \varphi_k(t) | \dot{H} | \varphi_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_k(t)}. \quad (2.55)$$

Acontece que o termo que envolve  $\dot{H}$  pode ser desprezado (aproximação adiabática), caso a variação do hamiltoniano  $H(t)$  seja muito lenta. Dessa forma, temos a seguinte solução aproximada para o estado  $|\varphi(t)\rangle$ :

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n C_n(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')\right) \exp[i\gamma_n(t)] |\varphi_n(t)\rangle, \quad (2.56)$$

em que a fase não dinâmica  $\exp[i\gamma_n(t)]$  é gerada devido à aproximação adiabática. O termo  $\gamma_n(t)$  é conhecido como fase geométrica ou fase de Berry.

A fim de calcular a fase de Berry, consideramos uma curva fechada  $C$  [ $\vec{R}(0) = \vec{R}(t)$ ] no espaço de parâmetros  $\vec{R}(t)$ , no qual o hamiltoniano  $H(t)$  depende temporalmente. Verifica-se que

$$\gamma_n(C) = \oint_C i \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | n(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R} = \int_S (\vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(R)) \cdot d\vec{s}, \quad (2.57)$$

em que  $C$  é a curva fechada no espaço de parâmetros associada à condição  $\vec{R}(0) = \vec{R}(t)$ ,  $S$  é a superfície delimitada pela curva fechada  $C$  e  $\vec{A}_n(\vec{R}) = i \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | n(\vec{R}) \rangle$ , com  $|\varphi_n(t)\rangle = |n(\vec{R})\rangle$ . Se entendermos  $\gamma_n(C)$  por meio da expressão do rotacional de  $\vec{A}_n(R)$ , então tudo se passa como se existisse um fluxo de "campo magnético"  $\vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(R)$  através da superfície  $S$ . Vemos, portanto, que a fase de Berry depende da curva  $C$  ou da superfície  $S$ , sendo, assim, uma fase geométrica.

Trabalhando com a expressão que envolve o rotacional, podemos reescrever a expressão de  $\gamma_n(C)$  como

$$\gamma_n(C) = i \int_S (\vec{\nabla}_R \times \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | n(\vec{R}) \rangle) \cdot d\vec{s} = i \int_S \langle \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) | \times | \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{s}, \quad (2.58)$$

em que  $n(\vec{R})$  é um autoestado da base instantânea e  $\vec{\nabla}_R$  é o operador com as derivadas parciais em relação aos parâmetros  $R_i$  associados ao hamiltoniano do sistema. O termo

$$i \langle \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) | \times | \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) \rangle = \Omega_n(\vec{R}) \quad (2.59)$$

é conhecido como curvatura de Berry, a quantidade que iremos utilizar para definir o número de Chern.

Podemos estender a discussão acima para um sistema de muitas partículas, mais especificamente, para uma rede cristalina e suas bandas eletrônicas. Neste tipo de sistema, as

partículas estão sob a ação de um potencial periódico  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ , onde  $\vec{R}$  é o parâmetro de rede, de modo que o hamiltoniano também obedece tal simetria de translação, ou seja,  $H(\vec{r}) = H(\vec{r} + \vec{R})$ . O teorema de Bloch fornece as autofunções para o problema de autovalores, isto é,

$$H(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (2.60)$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.61)$$

em que  $\vec{k}$  é o momento cristalino e  $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$  é uma função periódica. Portanto, os autoestados de um hamiltoniano, cujo potencial é periódico, possuem um índice novo  $\vec{k}$  e, assim, podemos escrever

$$H(\vec{r})\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.62)$$

em que o índice  $n$  indica a chamada banda de energia ocupada pelas partículas, conceito que vamos comentar a seguir. Em princípio, não há razão para que a Eq. (2.62) tenha apenas uma solução para um dado valor de  $\vec{k}$ . Lembre-se que  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  é uma função periódica, fazendo que para um mesmo  $\vec{k}$  tenhamos um conjunto de soluções para o problema. Além disso, por conta de  $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  envolver a função periódica  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ , ela possui a seguinte propriedade:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.63)$$

isto é, a menos de uma fase constante, as funções  $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  e  $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$  são iguais. Portanto, é suficiente resolver a Eq. (2.62) na célula unitária do cristal, com a condição de que, toda vez que o vetor  $\vec{r}$  localizar-se na superfície da célula, precisamos impor  $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ .

Podemos ainda escrever a função periódica  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  em termos de quantidades do espaço recíproco, ou seja,

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}), \quad (2.64)$$

em que  $c_{\vec{k}-\vec{G}}$  são coeficientes da soma e  $\vec{G}$  é um vetor da rede recíproca. Substituindo (2.64) em (2.61) para  $\vec{k} + \vec{G}$ , temos que

$$\Psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.65)$$

ou seja, as funções de onda de Bloch que diferem por um vetor da rede recíproca, são iguais. Portanto, podemos mostrar sem grandes problemas que  $E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G})$ , isto é, os autovalores ou autoenergias  $E(\vec{k})$  são funções periódicas no espaço recíproco, de tal modo que, agora, podemos reduzir nosso problema à primeira zona de Brillouin associada à rede considerada.

Agora, podemos definir o conceito de bandas de energia. Existem dois modos de

visualizar a criação das bandas rotuladas por  $n$ . O primeiro deles é utilizando o conceito de zona repetida, ou seja, por conta da propriedade  $E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G})$ , pode-se construir repetidas vezes a dispersão de um sistema, pois para cada  $\vec{k} + \vec{G}$  a energia se repete. Dessa primeira forma, quando olhamos então apenas para a primeira zona de Brillouin da rede em questão, vemos que haverá diversas dispersões, umas sobre as outras, fazendo com que para um mesmo  $\vec{k}$ , tenhamos vários valores da energia  $E(\vec{k})$ . A fim de distinguirmos esses diferentes valores de energia para o mesmo vetor  $\vec{k}$ , incluímos um índice de banda  $n$ . O segundo modo para construirmos o conceito de bandas de energia é pensar que estamos dobrando a dispersão do nosso sistema na primeira zona de Brillouin a fim de incluir todos os valores possíveis de energia do sistema. Entretanto, nesse caso teremos mais de um valor de energia para um mesmo  $\vec{k}$  e, novamente, é necessário adicionar o rótulo  $n$  na energia e nas funções de onda (para mais detalhes, veja Ref [30]).

Vamos considerar a expressão (2.59) e identificar o estado  $n(\vec{R})$  como sendo um estado análogo a  $u_n(\vec{k})$  para uma rede cristalina, em que  $u_{n,k}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | u_n(\vec{k}) \rangle$  é a parte periódica da função de onda de Bloch (2.61),  $n$  é o índice que indica a banda de energia do sistema e  $\vec{k}$  é o vetor de onda proveniente do tratamento do problema no espaço de momento. Portanto, a expressão que de fato iremos utilizar é

$$\Omega_n(\vec{k}) = i \langle \vec{\nabla}_{\vec{k}} u_n(\vec{k}) | \times | \vec{\nabla}_{\vec{k}} u_n(\vec{k}) \rangle. \quad (2.66)$$

Note que podemos definir uma curvatura de Berry para um sistema cristalino, pois aqui o parâmetro do hamiltoniano é o vetor de onda  $\vec{k}$  e este, quando analisado na primeira zona de Brillouin do sistema, irá percorrer um caminho fechado, de acordo com a definição Eq. (2.58). Como veremos adiante, iremos utilizar o formalismo da segunda quantização para tratar nosso problema, o que fará com que a Eq. (2.66) seja apresentada de outra maneira. Entretanto, chamaremos a atenção para a nova versão de  $\Omega_n(\vec{k})$  no momento adequado.

A curvatura de Berry indica, portanto, propriedades referentes às  $n$  bandas eletrônicas de cada sistema, sendo dependente dos autoestados do hamiltoniano eletrônico, que por sua vez também são indexados por um índice de banda  $n$ . Sendo assim, podemos compreender que (2.66) é diferente para cada banda eletrônica  $n$  não degeneradas. O número de Chern é então uma quantidade definida a partir de (2.66) com o intuito de carregar informações de cada banda  $n$  do sistema. Essa quantidade pode assumir apenas valores inteiros, inclusive ser nulo, além de poder ser definida apenas para bandas não degeneradas, ou seja, é necessário que exista um *gap* entre as possíveis múltiplas bandas do sistema.

Para sistemas eletrônicos bidimensionais, o número de Chern  $C_n$  é definido como

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} \Omega_n(\vec{k}) d^2 \vec{k} = \mathbb{Z}, \quad (2.67)$$

em que  $\Omega_n(\vec{k})$  é a curvatura de Berry associada à banda  $n$  e a integral é realizada na primeira zona de Brillouin da rede recíproca. Em duas dimensões (2D), o número de Chern é equivalente ao "fluxo" da curvatura de Berry que atravessa a superfície delimitada pela primeira zona de Brillouin. Essa quantidade é entendida como uma propriedade intrínseca da estrutura de bandas e tem vários efeitos para os fenômenos de transporte do sistema. Quando a curvatura de Berry é totalmente simétrica, o número de Chern pode ou não ser nulo, dependendo dos valores da curvatura nos diferentes pontos delimitados pela primeira zona de Brillouin. Contudo, alguns sistemas podem apresentar  $\Omega_n(\vec{k})$  assimétrica. Além disso, uma propriedade importante é que

$$Ch = \sum_n C_n = 0, \quad (2.68)$$

ou seja, a soma dos números de Chern das  $n$  bandas será sempre nula.

## 2.3 Efeito Hall térmico de mágnons

Um dos fenômenos de transporte que iremos analisar no presente trabalho é a chamada condutividade Hall térmica [10, 11, 31, 32, 33, 34]. Em particular, vamos verificar o quão relevante é o papel da topologia das bandas de energia das excitações do sistema na determinação dessa condutividade. Para isso, iremos utilizar os conceitos mostrados acima que são válidos não apenas para elétrons, mas também para excitações elementares bosônicas, como mágnons e triplons.

Em um sistema ferromagnético, por exemplo, temos os mágnons como excitações elementares, que por sua vez são excitações bosônicas. Dessa forma, podemos aplicar um gradiente de temperatura que induzirá uma corrente transversa, além de promover uma corrente longitudinal. A presença dessa corrente transversa caracteriza o chamado efeito Hall térmico.

Para um sistema ferromagnético, foi mostrado que a condutividade Hall térmica  $\kappa_{xy}$  pode ser escrita em termos da curvatura de Berry das bandas de energia dos mágnons (excitações elementares do sistema) [35]. Na sequência, faremos uma breve discussão sobre a determinação da condutividade Hall térmica seguindo a Ref. [35]. Neste artigo, os autores discutem o efeito Hall térmico para os mágnons em um sistema ferromagnético, porém, é possível estender tais resultados para quaisquer excitações magnéticas desde que apresentem carácter bosônico.

Vamos considerar a seguinte função de onda de Bloch

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_n(\vec{k}, \vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (2.69)$$

em que  $n$  é o índice de banda. Podemos construir um pacote de ondas a partir de

uma combinação linear das funções de onda de Bloch (2.69), localizado tanto no espaço recíproco quanto no espaço real. Os centros  $\vec{k}$  e  $\vec{r}$  do pacote obedecem as equações de movimento semiclássicas dadas por

$$\begin{aligned}\dot{\vec{r}} &= \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) - \dot{\vec{k}} \times \Omega_n(\vec{k}), \\ \hbar \dot{\vec{k}} &= -e \vec{E},\end{aligned}\tag{2.70}$$

em que  $E_n$  é a energia da banda  $n$ ,  $\vec{E}$  é o campo elétrico,  $-e$  é a carga do elétron, e  $\Omega_n(\vec{k})$  é a curvatura de Berry. O termo  $\dot{\vec{k}} \times \Omega_n(\vec{k})$  é conhecido como velocidade anômala, sendo perpendicular ao campo elétrico  $\vec{E}$ , gerando, assim, um efeito Hall (para detalhes sobre a introdução desse termo na equação de movimento, veja a Ref. [36]). Esse efeito pode ser observado tanto em um sistema de partículas/quasipartículas carregadas quanto neutras: para um sistema eletrônico, o campo elétrico é suficiente; por outro lado, para um sistema de mágnons, é necessário utilizar outro tipo de campo externo. Para o tratamento dos mágnons e também para o nosso trabalho, vamos considerar o efeito gerado por um gradiente de temperatura e, assim, temos um efeito Hall térmico.

Para o caso ferromagnético, utiliza-se comumente o formalismo de Holstein-Primakoff [37] para o tratamento dos operadores de spin em segunda quantização e, assim, verifica-se que as excitações do sistema (mágnons) obedecem à estatística bosônica. Para calcular o efeito Hall térmico deste sistema, é necessário considerar [35]

$$\begin{aligned}\vec{j} &= L_{11} [-\nabla U - \nabla \mu] + L_{12} \left[ T \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \right], \\ \vec{j}_Q &= L_{12} [-\nabla U - \nabla \mu] + L_{22} \left[ T \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \right],\end{aligned}\tag{2.71}$$

em que  $L_{ij}$  são tensores,  $\vec{j}_Q = \vec{j}_E - \mu \vec{j}$  é a densidade de corrente de calor com  $\vec{j}_E$  sendo a densidade de corrente de energia,  $\vec{j}$  é a densidade de corrente de mágnons,  $U$  é um potencial [de confinamento, similar ao potencial elétrico em (2.70)] para os mágnons e  $\mu$  é o potencial químico dos mágnons. Na equação (2.71), os elementos (espaciais) fora da diagonal  $L_{11}^{xy}$  e  $L_{22}^{xy}$  estão associados, respectivamente, ao efeito Hall e ao efeito Hall térmico. O artigo [35] descreve dois processos para o cálculo da condutividade Hall térmica, sendo que, aqui, vamos nos concentrar no formalismo baseado nas equações de movimento semiclássicas (2.70) para um pacote de mágnons. O procedimento alternativo é via a teoria da resposta linear.

Podemos adaptar a Eq. (2.70) para o caso dos mágnons,

$$\begin{aligned}\dot{\vec{r}} &= \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_{n\vec{k}} - \dot{\vec{k}} \times \Omega_n(\vec{k}), \\ \hbar \dot{\vec{k}} &= -\nabla U(\vec{r}),\end{aligned}\tag{2.72}$$

em que  $n$  é o índice de banda,  $\varepsilon_{n\vec{k}}$  é a energia dos mágnons da banda  $n$  e momento  $\vec{k}$ ,  $\Omega_n(\vec{k})$  é a curvatura de Berry no espaço  $\vec{k}$  definido pelo teorema de Bloch para a função de onda dos mágnons e, por fim,  $U(\vec{r})$  é um potencial de confinamento para os mágnons. Consideraremos, a partir de agora, um sistema magnético bidimensional (nosso caso de interesse) para a dedução da condutividade Hall térmica  $\kappa_{xy}$  (para maiores detalhes, veja a Sec. 3.1 da Ref. [35]). Por meio da corrente de borda dos mágnons  $I$  e da corrente de energia de borda  $I^E$ , podemos expressar as quantidades  $\vec{j}$  (densidade de corrente transversa) e  $\vec{j}^E$  (densidade de corrente de energia transversa) provocadas pelo gradiente de temperatura como

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \nabla \times \frac{1}{\hbar V} \sum_{n,\vec{k}} \int_{\varepsilon_{n,\vec{k}}}^{\infty} \rho^B(\varepsilon) \Omega_n(\vec{k}) d\varepsilon, \\ \vec{j}^E &= \nabla \times \frac{1}{\hbar V} \sum_{n,\vec{k}} \int_{\varepsilon_{n,\vec{k}}}^{\infty} \varepsilon \rho^B(\varepsilon) \Omega_n(\vec{k}) d\varepsilon,\end{aligned}\tag{2.73}$$

em que  $V$  é a área da amostra,  $\rho^B(\varepsilon)$  é a função de distribuição de Bose-Einstein, que é dada por

$$\rho^B(\varepsilon) = [\exp \beta(\varepsilon - \mu) - 1]^{-1},\tag{2.74}$$

com  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $\mu$  é o potencial químico dos mágnons e  $T$  é a temperatura. Na presença de um gradiente de temperatura na direção  $y$ , por exemplo, pode-se calcular a corrente de borda e a densidade de corrente na direção  $x$ :

$$\begin{aligned}(j)_x^{\nabla T} &= T \partial_y \left( \frac{1}{T} \right) \sum_{n,\vec{k}} \int_{\varepsilon_{n,\vec{k}}}^{\infty} \frac{\varepsilon - \mu}{\hbar V} \left( \frac{d\rho^B}{d\varepsilon} \right) \Omega_n(\vec{k}) d\varepsilon, \\ (j_E)_x^{\nabla T} &= T \partial_y \left( \frac{1}{T} \right) \sum_{n,\vec{k}} \int_{\varepsilon_{n,\vec{k}}}^{\infty} \frac{\varepsilon(\varepsilon - \mu)}{\hbar V} \left( \frac{d\rho^B}{d\varepsilon} \right) \Omega_n(\vec{k}) d\varepsilon.\end{aligned}\tag{2.75}$$

Com a ajuda da Eq. (2.71), podemos derivar o coeficiente de transporte transversal  $L_{ij}^{xy}$ , e, assim, definimos a condutividade Hall térmica para o sistema como sendo

$$\kappa_{xy} = L_{22}^{xy}/T = -\frac{k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{n,\vec{k}} \left[ c_2[\rho^B(\varepsilon_{n\vec{k}})] - \frac{\pi^2}{3} \right] \Omega_n(\vec{k}),\tag{2.76}$$

em que

$$c_2(x) = \int_0^x dt \left( \ln \frac{1+t}{t} \right)^2 = (1+x) \left( \ln \frac{1+x}{x} \right)^2 - (\ln x)^2 - 2Li_2(-x),\tag{2.77}$$

sendo  $Li_2(x)$  conhecida como função polilogarítmica  $Li_n(x)$  para  $n = 2$ . Além disso, como há uma soma  $n$  sob todas as bandas do sistema, e dado que uma das propriedades do número de Chern é que a soma de todos os números de Chern é sempre nula como mostra

(2.68), temos que

$$-\frac{k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{n, \vec{k}} \left[ \frac{\pi^2}{3} \right] \Omega_n(\vec{k}) = 0, \quad (2.78)$$

independentemente se as excitações são topologicamente triviais ou não-triviais. Desse modo, a expressão para a condutividade Hall térmica se reduz a

$$\kappa_{xy} = -\frac{k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{\vec{k}} \sum_{n=1}^N [c_2(\rho^B(\varepsilon_{n\vec{k}}))] \Omega_n(\vec{k}). \quad (2.79)$$

Outras quantidades associadas ao transporte das excitações podem ser calculadas, mas focaremos neste trabalho apenas no cálculo da condutividade Hall térmica.

# Sistema antiferromagnético na rede quadrada

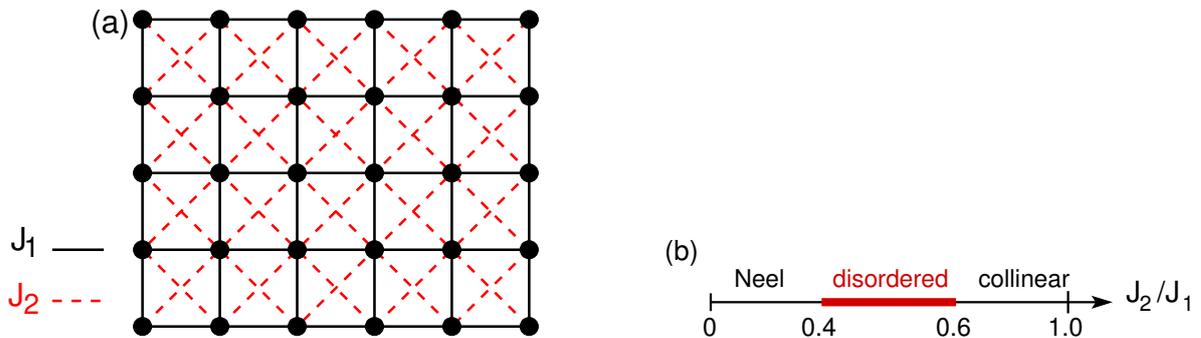
## 3.1 Introdução

Neste capítulo, iniciaremos a descrição do nosso estudo sobre as propriedades topológicas de um antiferromagneto de Heisenberg numa rede quadrada. O sistema será descrito por um modelo de Heisenberg, que inclui as interações entre os spins primeiros e segundos vizinhos. Vamos considerar que seu estado fundamental é formado por um sólido de singletos (VBS) e utilizaremos o formalismo dos operadores de ligação para a descrição. Vamos considerar o hamiltoniano efetivo em uma aproximação quadrática e analisaremos se as excitações elementares (triplons) apresentarão bandas topologicamente não triviais.

O hamiltoniano do modelo de Heisenberg antiferromagnético  $J_1 - J_2$  na rede quadrada é dado por [veja Fig. 3.1 (a)]

$$H_{12} = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.1)$$

em que os índices  $\langle ij \rangle$  e  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  indicam soma sob primeiros e segundos vizinhos, respectivamente,  $\mathbf{S}_i$  é um operador de spin e  $J_1$  e  $J_2$  são as constantes de troca entre os primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. No caso clássico, ou seja, para  $S \gg 1$ , o diagrama de fases do hamiltoniano (3.1) não apresenta a região paramagnética (para mais detalhes, veja o Cap. 2 da Ref. [38]), isto é, há uma transição de fase do estado de Néel para o estado de listras quando  $J_2 = 0.5J_1$ . A região paramagnética surge pelo fato de estarmos tratando os operadores de spin quanticamente. O diagrama de fases quântico desse sis-



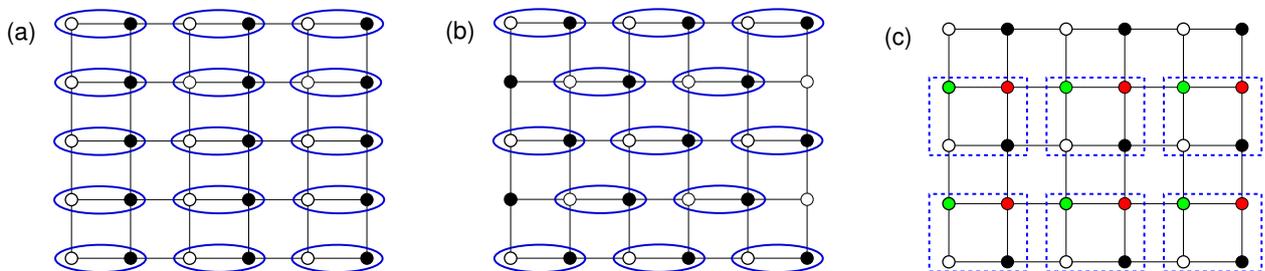
**Figura 3.1:** (a) Representação esquemática do modelo  $J_1$ - $J_2$  na rede quadrada. (b) Diagrama de fases do modelo  $J_1$ - $J_2$  na rede quadrada dividida em três regiões: Néel, paramagnética (desordem), estado de listras (collinear).

tema é mostrado na Fig. 3.1 (b) [15]. Para  $J_2 \lesssim 0.4 J_1$ , verifica-se que o modelo (3.1) apresenta ordem magnética de Néel de longo alcance com vetor de ordenamento magnético  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , para  $J_2 \gtrsim 0.6 J_1$ , temos uma ordem magnética colinear de longo alcance (estado de listras) com vetor de ordenamento  $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$  ou  $\mathbf{Q} = (0, \pi)$  [Fig. 2.2 (b)] e, na região  $0.4 J_1 \lesssim J_2 \lesssim 0.6 J_1$ , predomina uma fase paramagnética quântica. Além disso, verifica-se que a transição de fase quântica que ocorre para  $J_2 \approx 0.6 J_1$  é uma transição de primeira ordem, enquanto a natureza da transição de fase que ocorre para  $J_2 \approx 0.4 J_1$  é uma segunda questão em aberto relacionada à esse sistema [14, 15]. Tanto a natureza da fase desordenada (paramagnética) quanto a natureza da transição de fase para  $J_2 \approx 0.4 J_1$  são dificuldades que estão relacionadas ao fato de que simulações de Monte Carlo quântico não podem ser realizadas em sistemas magnéticos frustrados devido ao chamado problema do sinal [39].

## 3.2 A fase de sólido de singletos (VBS)

Muitas propostas têm sido feitas acerca do estado fundamental do modelo (3.1) em sua fase desordenada, sendo que uma destas é a fase de sólido de singletos (VBS) com arranjos colunar, alternado e do tipo plaquete, como mostrado esquematicamente na Fig. 3.2. Fases do tipo líquido de spin com gap nulo ou finito também têm sido consideradas. Artigos recentes [16, 17, 18, 19] indicam que este sistema pode apresentar dois comportamentos distintos na região paramagnética: para  $J_2 \lesssim 0.5 J_1$ , existem evidências para uma fase de líquido de spin com gap nulo e, para  $J_2 \gtrsim 0.5 J_1$ , há indicações para a estabilidade de uma fase VBS, sendo que esta última é aquela que vamos nos concentrar em nosso estudo, mais especificamente no VBS com arranjo colunar [Fig. 3.2 (a)].

A fase VBS pode ser vista como sendo formada por um arranjo regular de singletos formados por spins primeiros vizinhos em uma rede [1]. No caso do arranjo colunar, temos dois spins  $S = 1/2$  em um estado de singlete, sendo que o dímero formado por



**Figura 3.2:** Representações esquemáticas das fases de sólido de singletos (VBS) (a) colunar e (b) alternada na rede quadrada. As elipses azuis indicam que os spins  $\mathbf{S}^1$  (círculos brancos) e  $\mathbf{S}^2$  (círculos pretos) estão em um estado de singlete. (c) Representação esquemática da fase VBS no arranjo de plaquete na rede quadrada. O quadrado pontilhado azul indica que os spins  $\mathbf{S}^1$  (círculo aberto),  $\mathbf{S}^2$  (círculo preto),  $\mathbf{S}^3$  (círculo vermelho), e  $\mathbf{S}^4$  (círculo verde) formam um estado de singlete.

eles constituí a célula unitária da rede. Vale lembrar que não ocorre quebra espontânea de simetria de spin na formação da fase VBS, uma vez que o estado VBS é um produto de estados de singlete, ou seja, o spin total do estado VBS é  $S = 0$ . Por este motivo, não temos modos de Goldstone nessa fase, fato que nos permite afirmar que, sejam quais forem as excitações elementares deste sistema, elas devem apresentar um *gap* de energia finito.

Diferentemente de um estado ordenado ferromagnético ou do estado de Néel, onde os spins se organizam em uma certa "ordem magnética", em um líquido de spin, os spins não se encontram ordenados a baixas temperaturas: de fato, um líquido de spins pode ser visto como um líquido de singletos (essa fase não será discutida nesse trabalho; para mais detalhes, veja o Cap. 2 da Ref. [2]).

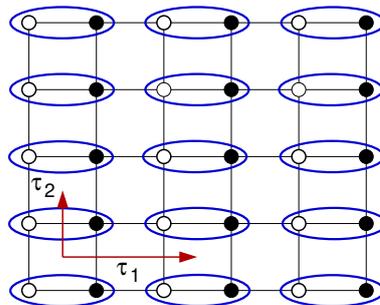
### 3.3 O modelo de Heisenberg para a fase VBS

Nos concentraremos agora em reescrever o modelo de Heisenberg (3.1) para a fase VBS com arranjo colunar na rede quadrada. Vale lembrar que utilizaremos  $J_2$  como parâmetro, fazendo  $J_1 = 1$ . Para o tratamento da fase VBS colunar, é interessante utilizar a rede dimerizada definida pelos singletos, como mostrado na Fig. 3.3. Dessa forma, o hamiltoniano (3.1) pode ser escrito como

$$H_{12} = J_1 \sum_{i \in D} (\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_i^2 + \mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_{i+2}^1 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_{i+2}^2 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_{i+1}^1) + J_2 \sum_{i \in D} (\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_{i+2}^2 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_{i+2}^1 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_{i+1+2}^1 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_{i+1-2}^1), \quad (3.2)$$

em que o índice  $i$  refere-se aos sítios da rede dimerizada, os índices (inferiores) 1 e 2 indicam, respectivamente, os vetores  $\vec{\tau}_1$  e  $\vec{\tau}_2$ ,

$$\begin{aligned} \vec{\tau}_1 &= 2a\hat{i}, \\ \vec{\tau}_2 &= a\hat{j}, \end{aligned} \quad (3.3)$$



**Figura 3.3:** Representação dos vetores primitivos  $\vec{\tau}_1$  e  $\vec{\tau}_2$  da rede dimerizada colunar do estado VBS.

sendo  $a$  o parâmetro de rede (aqui, para facilitar os cálculos, vamos considerar  $a = 1$ ), e os índices 1 e 2 sobre os operadores de spin  $\mathbf{S}$  indicam os dois spins que formam o dímero localizado no sítio  $i$  da rede dimerizada (veja a Fig. 3.3, onde os círculos brancos e pretos indicam, respectivamente, os spins  $\mathbf{S}_i^1$  e  $\mathbf{S}_i^2$ ).

Na próxima seção, introduziremos o formalismo dos operadores de ligação para reescrever o hamiltoniano (3.2) em segunda quantização em termos de operadores bosônicos que criam/destroem singletos e tripletos.

### 3.4 Formalismo dos operadores de ligação

Vamos, inicialmente, considerar o termo local  $\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_i^2$ . O spin total do dímero pode ser escrito como (o índice de sítio  $i$  será reintroduzido posteriormente)

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}^1 + \mathbf{S}^2. \quad (3.4)$$

Lembrando que, pela regra da soma de momentos angulares em mecânica quântica [40], o dímero formado no estado VBS envolve a soma de dois spins  $S = 1/2$  e, assim, temos dois tipos de estado: o singlete e o triplete. Dessa forma, utilizando uma função de onda genérica com componentes espacial e de spin, temos a seguinte igualdade:

$$\mathbf{S}^2 \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = [(\mathbf{S}^1)^2 + (\mathbf{S}^2)^2 + 2\mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2] \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = S(S+1)\hbar^2 \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.5)$$

$$\mathbf{S}^2 \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = [S_1(S_1+1)\hbar^2 + S_2(S_2+1)\hbar^2 + 2\mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2] \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.6)$$

em que  $S_1(S_1+1)\hbar^2$  e  $S_2(S_2+1)\hbar^2$  são os autovalores dos operadores  $(\mathbf{S}^1)^2$  e  $(\mathbf{S}^2)^2$ , respectivamente. Como estamos tratando de um sistema com spin  $S = 1/2$ , a expressão (3.6) assume a forma

$$\mathbf{S}^2 \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left[ \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2 \right] \psi_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.7)$$

o que resulta em

$$\mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2 = \frac{1}{2}\mathbf{S}^2 - \frac{3}{4}. \quad (3.8)$$

Neste momento, sabemos que, como resultado da soma dos dois spins  $1/2$ , temos  $S = 0$  (estado de singlete do dímero) e  $S = 1$  (estado de triplete do dímero). Dessa forma, a Eq. (3.8) indica que

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2 &= -\frac{3}{4} & (S = 0), \\ \mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2 &= +\frac{1}{4} & (S = 1). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Ocorre que o termo  $\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_i^2$  considera o índice de sítio da rede, portanto a tradução do resultado (3.9) para o problema na rede e em termos do formalismo de segunda quantização assume a forma

$$\sum_{i \in D} \mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_i^2 = -\frac{3}{4} \sum_i s_i^\dagger s_i + \frac{1}{4} \sum_{i\alpha} t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha}, \quad (3.10)$$

onde  $s_i$  é um operador que destrói um estado de singleto no sítio  $i$  (da rede dimerizada),  $t_i$  é um operador que destrói um estado de tripleto no sítio  $i$ ,  $s_i^\dagger$  é um operador de cria um estado de singleto no sítio  $i$  e, finalmente,  $t_i^\dagger$  é um operador que cria um estado de tripleto no sítio  $i$ . Vale lembrar que, aqui, o índice  $\alpha = x, y, z$  ou  $\alpha = 1, 2, 3$  e representa os três possíveis tripletos.

Como estamos estudando um sistema de partículas idênticas, é interessante utilizar o formalismo da segunda quantização, em que o espaço matemático que rege as expressões é conhecido como espaço de Fock [20]. Os estados contidos no espaço de Fock são rotulados pelos números de ocupação de estados de partícula única do sistema.

Precisamos, agora, reescrever os operadores de spins  $\mathbf{S}^1$  e  $\mathbf{S}^2$  em segunda quantização. Há várias representações para os operadores de spin, sendo que uma delas foi proposta por T. Holstein e H. Primakoff [37] para o tratamento das ondas de spin em ferromagnetos. No nosso caso, porém, vamos utilizar o formalismo dos operadores de ligação (*bond operator representation*) [21].

Como discutido acima, sabemos que um sistema de dois spins 1/2 ( $\mathbf{S}^1$  e  $\mathbf{S}^2$ ) formam um estado de singleto  $\mathbf{S}_T = 0$  ou três estados de tripleto  $\mathbf{S}_T = 1$ . Estes estados podem ser reescritos em termos de operadores  $s^\dagger$  e  $t_\alpha^\dagger$  que, quando aplicados sob um estado (fictício) de vácuo  $|0\rangle$ , criam, respectivamente, os estados de singleto e tripleto, isto é

$$|s\rangle = s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (3.11)$$

$$|t_x\rangle = t_x^\dagger |0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (3.12)$$

$$|t_y\rangle = t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (3.13)$$

$$|t_z\rangle = t_z^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (3.14)$$

Considerando a representação matricial das componentes dos operadores de spin na base  $|s\rangle$ ,  $|t_\alpha\rangle$ , ou seja,  $\langle s|S_\alpha^\mu|s\rangle$ ,  $\langle s|S_\alpha^\mu|t_\beta\rangle$  e  $\langle t_\gamma|S_\alpha^\mu|t_\beta\rangle$ , em que  $\mu = 1, 2$  e  $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ , é possível verificar que

$$\begin{aligned} S_\alpha^1 &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\ S_\alpha^2 &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \end{aligned} \quad (3.15)$$

em que os operadores  $s^\dagger$  e  $t^\dagger$  criam, respectivamente, uma partícula no estado de singleto

$|s\rangle$  e tripleto  $|t_\alpha\rangle$ ,  $s$  e  $t$  destroem, respectivamente, uma partícula no estado de singleto  $|s\rangle$  e tripleto  $|t_\alpha\rangle$ , o termo  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  representa o tensor de Levi-Civita e a quantidade  $i$  que o acompanha é  $i = \sqrt{-1}$ . A expressão (3.15) é conhecida como a representação dos operadores de spin em termos dos operadores de ligação.

Ocorre a dúvida sobre a estatística que os operadores  $s$  e  $t$  devem obedecer, fermiônica ou bosônica. Para isso, utilizamos a álgebra usual dos operadores de spin,  $[s_i, s_j] = i\epsilon_{ijk}s_k$ , e a representação (3.15) para verificar quais condições os operadores  $s$  e  $t$  precisam satisfazer. Verifica-se que a álgebra usual dos operadores de spin é satisfeita se

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, \quad [s, t_\alpha^\dagger] = 0, \quad (3.16)$$

que são as relações canônicas de comutação de operadores bosônicos. Portanto, a representação (3.15) nos permite mapear um sistema de spins em um sistema bosônico. Por se tratar de um sistema de bósons, podemos ter um número arbitrário destas partículas em cada sítio da rede dimerizada, o que não condiz com a física do problema, uma vez que, para cada sítio  $i$  da rede, pode haver apenas um estado de singleto ou um estado de tripleto. Sendo assim, para resolver este problema, condicionamos o sistema a um vínculo,

$$s^\dagger s + \sum_\alpha t_\alpha^\dagger t_\alpha = 1. \quad (3.17)$$

Por fim, podemos estender as expressões (3.15)-(3.17) para o nosso problema, ou seja, inserir índices de sítio nas expressões. A seguir, diagonalizaremos o hamiltoniano efetivo em termos dos operadores de ligação.

### 3.5 Diagonalização do hamiltoniano

Utilizando o resultado (3.10) e as expressões (3.15), podemos reescrever o hamiltoniano (3.2) em termos dos operadores de singlete  $s_i$  e tripleto  $t_{i\alpha}$ . Após alguns cálculos, verifica-se que o hamiltoniano  $H_{12}$  pode ser escrito como

$$H_{12} = H_0 + H_2 + H_3 + H_4, \quad (3.18)$$

em que

$$H_0 = -\frac{3}{4}J_1 \sum_i s_i^\dagger s_i, \quad (3.19)$$

$$H_2 = \frac{J_1}{4} \sum_i t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} + \frac{1}{4} \sum_{i,\tau} \xi_2(\tau) (s_i s_{i+\tau}^\dagger t_{i\alpha}^\dagger t_{i+\tau,\alpha} + h.c. + s_i^\dagger s_{i+\tau}^\dagger t_{i\alpha} t_{i+\tau,\alpha} + h.c.), \quad (3.20)$$

$$H_3 = \frac{i}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_{i,\tau} \xi_3(\tau) \left[ (s_i^\dagger t_{i\alpha} + t_{i\alpha}^\dagger s_i) t_{i+\tau,\beta}^\dagger t_{i+\tau,\gamma} - t_{i\beta}^\dagger t_{i\gamma} (s_{i+\tau}^\dagger t_{i+\tau,\alpha} + t_{i+\tau,\alpha}^\dagger s_{i+\tau}) \right], \quad (3.21)$$

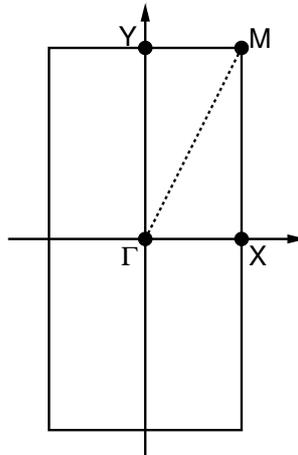
$$H_4 = -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta'\gamma'} \sum_{i,\tau} \xi_4(\tau) t_{i\beta}^\dagger t_{i+\tau,\beta'}^\dagger t_{i+\tau,\gamma'} t_{i\gamma}. \quad (3.22)$$

Aqui, utilizamos a convenção de soma sobre os índices (gregos) repetidos. As três funções  $\xi_i(\tau)$  podem ser encontradas no Apêndice A. Em particular, a função  $\xi_2(\tau)$  é dada por

$$\xi_2(\tau) = 2(J_1 - J_2)\delta_{\tau,2} - J_1\delta_{\tau,1} - J_2(\delta_{\tau,1+2} + \delta_{\tau,1-2}), \quad (3.23)$$

com  $\tau = 1, 2$  indicando os vetores (3.3) e  $\delta_{i,j}$  sendo a delta de Kronecker.

Como estamos adotando o estado VBS como sendo o estado fundamental desta fase



**Figura 3.4:** Primeira zona de Brillouin da rede quadrada dimerizada, onde  $X = (\frac{\pi}{2}, 0)$ ;  $M = (\frac{\pi}{2}, \pi)$ ;  $Y = (0, \pi)$  e  $\Gamma = (0, 0)$ .

paragmética, vamos assumir que todos os dímeros estejam em um estado de singlete (mais baixa energia). Por conta disso, vamos considerar que a fase VBS corresponda a um condensado de singletos e, assim, faremos a seguinte substituição no hamiltoniano (3.18)

$$s_i^\dagger = s_i = \langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \sqrt{N_0}, \quad (3.24)$$

em que  $\langle s_i^\dagger s_i \rangle = N_0$  é o valor esperado associado ao estado fundamental VBS do número de singletos em cada sítio da rede dimerizada. A partir dessa consideração, conseguimos entender que, sendo o estado de tripleto mais energético em relação ao estado de singlete, se fornecermos energia de alguma forma para o sistema, o estado de singlete poderá se tornar um tripleto, e, assim, este último se propagará pela rede dimerizada, transformando momentaneamente dímeros com  $S_T = 0$  em estados com  $S_T = 1$ . Essa excitação de spin  $S = 1$  é denominada **tríplon**.

As expressões (3.19) - (3.22) estão formuladas em termos de operadores definidos no espaço real. Por questões simplificadoras, é interessante reescrevermos o hamiltoniano (3.18) no espaço recíproco (espaço  $\mathbf{k}$ ) e, assim, vamos utilizar a transformada de Fourier dos operadores  $t$  (veja Cap. 20 da Ref. [41]),

$$t_{i\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} t_{\vec{k}\alpha}^\dagger, \quad (3.25)$$

em que  $\vec{R}_i$  é o vetor posição do dímero no sítio  $i$ ,  $N' = \frac{N}{2}$  é o número de dímeros da rede, com  $N$  sendo o número de sítios da rede quadrada original e  $\vec{k}$  é a nova variável (número de onda) restrita à primeira zona de Brillouin (BZ) dimerizada (veja Fig. 3.4). Por fim, o vínculo (3.17) é inserido no hamiltoniano (3.18) via um multiplicador de Lagrange  $\mu$

$$-\mu \sum_i \left( s_i^\dagger s_i + t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} - 1 \right). \quad (3.26)$$

Logo, as expressões de  $H_0$ ,  $H_2$ ,  $H_3$  e  $H_4$  assumem a forma

$$H_0 = -\frac{3}{8} J_1 N_0 N - \frac{\mu N}{2} (N_0 - 1), \quad (3.27)$$

$$H_2 = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2} B_{\vec{k}} \left( t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{-\vec{k}\alpha}^\dagger + h.c. \right), \quad (3.28)$$

$$H_3 = \frac{1}{2\sqrt{N'}} \sum_{\vec{p}, \vec{k}} \xi_{\vec{k}-\vec{p}} t_{\vec{k}-\vec{p}, \alpha}^\dagger t_{\vec{p}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} + h.c., \quad (3.29)$$

$$H_4 = \frac{1}{2N'} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta'\gamma'} \sum_{\vec{q}, \vec{p}, \vec{k}} \gamma_{\vec{k}} t_{\vec{p}+\vec{k}, \beta}^\dagger t_{\vec{q}-\vec{k}, \mu} t_{\vec{q}\gamma'} t_{\vec{p}\gamma}, \quad (3.30)$$

em que os coeficientes  $A_{\vec{k}}$ ,  $B_{\vec{k}}$ ,  $\xi_{\vec{k}}$  e  $\gamma_{\vec{k}}$  são dados por

$$A_{\vec{k}} = \frac{1}{4}J_1 - \mu + B_{\vec{k}}, \quad (3.31)$$

$$B_{\vec{k}} = -\frac{N_0}{2}[J_1 \cos(2k_x) - 2(J_1 - J_2) \cos(k_y) + J_2 \cos(2k_x + k_y) + J_2 \cos(2k_x - k_y)], \quad (3.32)$$

$$\xi_{\vec{k}} = -\sqrt{N_0}[J_1 \sin(2k_x) + J_2 \sin(2k_x + k_y) + J_2 \sin(2k_x - k_y)], \quad (3.33)$$

$$\gamma_{\vec{k}} = -\frac{1}{2}[J_1 \cos(2k_x) + 2(J_1 + J_2) \cos(k_y) + J_2 \cos(2k_x + k_y) + J_2 \cos(2k_x - k_y)]. \quad (3.34)$$

Com o hamiltoniano (3.18) em termos de quantidades do espaço  $\mathbf{k}$ , faremos a sua diagonalização na aproximação harmônica, isto é, vamos considerar

$$H_{12} \approx H_0 + H_2 = H^{ham}, \quad (3.35)$$

em que o hamiltoniano  $H^{ham}$  é quadrático em termos dos operadores de tripleto  $t_{\vec{k}\alpha}$ . Os termos  $H_3$  e  $H_4$  descrevem, respectivamente, interações entre três e quatro triplons e serão ignorados, visto que o número de tripletos presente no sistema é pequeno para  $T = 0$  [veja a Fig. 3.5 (a) abaixo]. Temos então,

$$H^{ham} = -\frac{3}{8}J_1 N_0 N - \frac{\mu N}{2}(N_0 - 1) + \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2} B_{\vec{k}} (t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{-\vec{k}\alpha}^\dagger + h.c.). \quad (3.36)$$

Para diagonalizar o hamiltoniano (3.36), utilizaremos uma transformação de Bogoliubov [42], em que os operadores (bosônicos) originais são reescritos em termos de novos operadores que também obedecem a álgebra bosônica, isto é, vamos considerar uma transformação canônica. Em particular, vamos considerar

$$\begin{aligned} t_{\vec{k}\alpha} &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}\alpha} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\alpha}^\dagger, \\ t_{\vec{k}\alpha}^\dagger &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}\alpha}^\dagger + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\alpha}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

em que  $b_{\vec{k}\alpha}$  e  $b_{\vec{k}\alpha}^\dagger$  são os novos operadores bosônicos e  $u_{\vec{k}}$  e  $v_{\vec{k}}$  são funções a serem determinadas. Sabemos que os operadores  $t$  obedecem uma álgebra bosônica, ou seja,

$$\left[ t_{\vec{k}\alpha}, t_{\vec{k}\alpha}^\dagger \right] = 1, \quad (3.38)$$

e, portanto, verifica-se que os novos operadores  $b$  também satisfazem uma álgebra bosônica desde que

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (3.39)$$

As funções  $u_{\vec{k}} = \cosh(\xi)$  e  $v_{\vec{k}} = -\sinh(\xi)$  satisfazem a condição (3.39). Substituindo

(3.37) em (3.36), verifica-se que se

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{A_{\vec{k}}}{\sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}} \right), \quad (3.40)$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{A_{\vec{k}}}{\sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}} - 1 \right), \quad (3.41)$$

$$u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = \frac{B_{\vec{k}}}{2\omega_{\vec{k}}}, \quad (3.42)$$

o hamiltoniano  $H^{ham}$  assume uma forma diagonal, isto é,

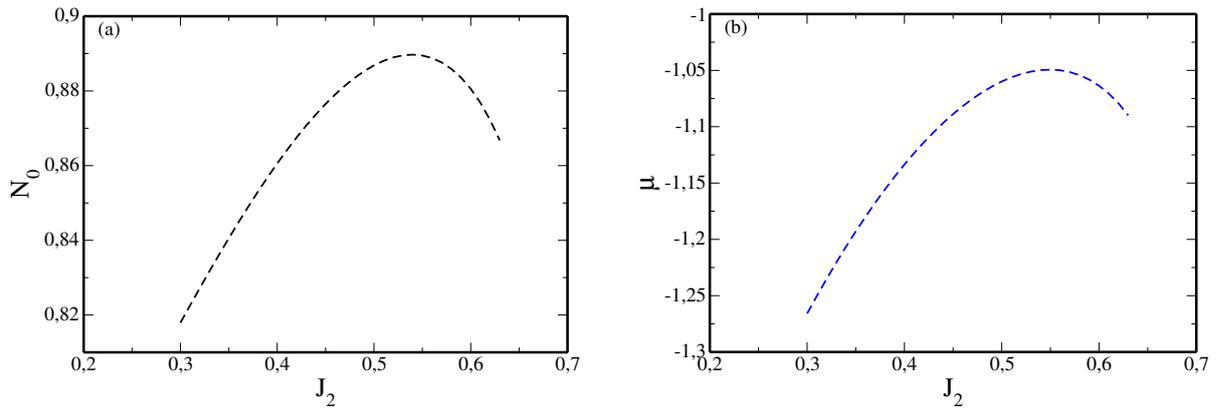
$$H^{ham} = -\frac{3}{8} J_1 N_0 N - \frac{\mu N}{2} (N_0 - 1) + \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}} (\omega_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}\alpha} \omega_{\vec{k}} b_{\vec{k}\alpha}^\dagger b_{\vec{k}\alpha}, \quad (3.43)$$

em que

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}, \quad (3.44)$$

$$E_0^{ham} = -\frac{3}{8} J_1 N_0 N - \frac{\mu N}{2} (N_0 - 1) + \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}} (\omega_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}). \quad (3.45)$$

A expressão (3.44), a menos da constante de Planck  $\hbar$ , representa a dispersão em termos de  $\vec{k}$  dos bósons  $b$  criados no sistema acima do estado fundamental, que possui energia  $E_0^{ham}$  expressa em (3.45). Contudo, para encontrarmos os valores de  $\omega_{\vec{k}}$  e  $E_0^{ham}$ , devemos determinar  $N_0$  e  $\mu$  para cada valor da constante de troca  $J_2$ . Para isso, vamos



**Figura 3.5:** (a) Parâmetro  $N_0$  [Eq. (3.47)] como função de  $J_2$  calculado numericamente para o estado VBS colunar na rede quadrada, e (b) parâmetro  $\mu$  [Eq. (3.48)] como função de  $J_2$  calculado numericamente para o estado VBS colunar na rede quadrada.

minimizar a expressão (3.45) em termos de  $\mu$  e  $N_0$ , isto é,

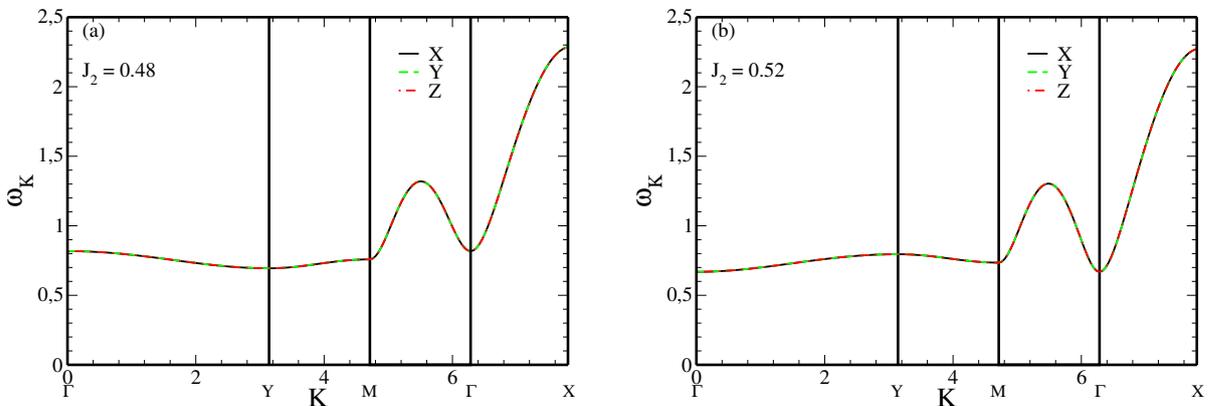
$$\begin{aligned}\frac{\partial E_0^{ham}}{\partial \mu} &= 0, \\ \frac{\partial E_0^{ham}}{\partial N_0} &= 0.\end{aligned}\tag{3.46}$$

Dessa forma, encontramos as seguintes equações autoconsistentes

$$N_0 = 1 + \frac{3}{2N'} \sum_{\vec{k}} \left(1 - \frac{A_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}\right),\tag{3.47}$$

$$\mu = -\frac{3}{4}J_1 + \frac{3}{2N'N_0} \sum_{\vec{k}} \left[ \frac{B_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}} (A_{\vec{k}} - B_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}) \right].\tag{3.48}$$

As expressões (3.47) e (3.48) podem ser resolvidas numericamente, de modo que os comportamentos de  $N_0$  e  $\mu$  em termos da constante de troca  $J_2$  são mostrados nas Figs. 3.5 (a) e (b), respectivamente. O primeiro ponto a se observar na Fig. 3.5 (a) é que não encontramos valores de  $N_0$  exatamente igual a 1 para nenhum valor de  $J_2$ , ou seja, o estado fundamental VBS não é constituído, de fato, por um estado de singlete por sítio, mas por uma sobreposição de uma grande número de singletos e um pequeno número de tripletos. Isso ocorre por conta de flutuações quânticas que foram consideradas nos cálculos. As Figs. 3.6 (a) e (b) mostram a dispersão (3.44) dos triplons ao longo de caminhos da primeira zona de Brillouin dimerizada [Fig. 3.4] para  $J_2 = 0.48$  e  $0.52$ , respectivamente. Nos dois casos, nota-se que as três dispersões dos triplons  $x, y$  e  $z$  são triplamente degeneradas, ou seja, se tocam em um ou mais pontos. Em princípio, isso é um problema, pois estamos interessados em um sistema que apresente excitações com bandas de energia completamente não degeneradas. A próxima seção explicará brevemente o problema associado à degenerescência das bandas dos triplons do modelo (3.36). Outro fato interessante de ve-



**Figura 3.6:** Dispersão dos triplons  $\omega_{\vec{k}}$  [Eq. (3.44)] do estado VBS colunar da rede quadrada na aproximação harmônica restritos à primeira zona de Brillouin para os parâmetros (a)  $J_2 = 0.48$  e (b)  $J_2 = 0.52$ .

rificarmos é que há um *gap* nas bandas dos triplons, ou seja, diferentemente das ondas de spin do estado de Néel [43], os triplons de uma fase VBS precisam de uma energia mínima para serem produzidos. Isso ocorre, pois entre o estado de singlete (menos energético) e o estado de tripleto (mais energético) há um *gap* de energia, pois, como discutido acima, não há quebra espontânea de simetria de spin na formação do estado VBS.

### 3.6 O problema da degenerescência

Como mencionamos anteriormente, trabalhos recentes mostraram que alguns sistemas magnéticos podem apresentar triplons com bandas de energia topologicamente não triviais [5, 44, 45, 46, 47, 48]. Esses sistemas seriam análogos bosônicos dos chamados isolantes de Chern, isto é, sistemas eletrônicos que apresentam bandas de energia caracterizadas por um número de Chern (invariante topológico) finito [6, 7, 8].

Estamos interessados em estudar as propriedades topológicas de um estado VBS, mais especificamente, estudar a possível não-trivialidade das bandas de energia dos triplons. Como foi comentado no Cap. 2, precisamos enfatizar a importância de que as bandas de energia dos triplons precisam ser não degeneradas para que possamos estudar uma quantidade que está intrinsecamente associada à topologia dessas bandas. Essa quantidade é o número de Chern, que somente pode ser definido em um sistema que apresenta bandas de energia não degeneradas. Como mostrado na Fig. 3.6, as bandas dos triplons  $x, y$  e  $z$  da fase VBS do modelo (3.1) são triplamente degeneradas e, por esta razão, é impossível associar um número de Chern a cada uma delas. O próximo capítulo mostrará uma primeira tentativa para quebrarmos esta degenerescência.

# A interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Neste capítulo, vamos introduzir a interação de Dzyaloshinskii-Moriya [12, 13], que será incluída no modelo de Heisenberg  $J_1 - J_2$  [Eq. (3.1)] a fim de, em princípio, quebrar a degenerescência das bandas de energia dos triplons.

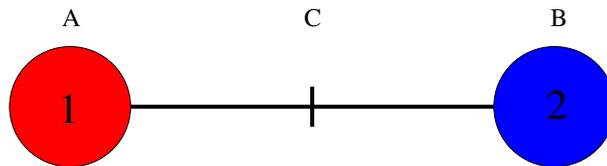
## 4.1 Origem da interação

No ano de 1958, Igor Dzyaloshinskii estudava a intrigante observação do ferromagnetismo fraco nos compostos antiferromagnéticos  $\alpha - Fe_2O_3$  e  $Cr_2O_3$  [12]. Dadas as diferentes simetrias entre as duas redes cristalinas, Dzyaloshinskii mostrou primeiramente que, dependendo da temperatura, o composto  $\alpha - Fe_2O_3$  podia apresentar um ferromagnetismo fraco, enquanto o mesmo efeito não era observado no composto  $Cr_2O_3$ . Sendo assim, ele levantou o seguinte questionamento: seria possível mudar a direção e a intensidade dos spins do sistema antiferromagnético sem quebrar a simetria da distribuição inicial, de modo a resultar numa soma não-nula dos spins nas células unitárias?

Utilizando a Teoria de Landau para as transições de fase de segunda ordem [27], Dzyaloshinskii estudou o sistema considerando seus potenciais termodinâmicos e mostrou que haveria uma contribuição para o *weak ferromagnetism* devido ao acoplamento spin-órbita entre os spins localizados em sítios distintos da rede. No entanto, também fica claro neste trabalho a importância da simetria geométrica do sistema, ou seja, para certas simetrias, esse ferromagnetismo não aconteceria.

Em 1960, foi a vez de Tôru Moriya contribuir para o entendimento deste fenômeno. Considerando as ideias de Dzyaloshinskii, Moriya conseguiu encontrar a forma matemática correspondente à interação de troca anisotrópica e proveniente da interação spin-órbita entre os spins localizados em sítios distintos [13],

$$H_{DM} = \sum_{\langle ij \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (4.1)$$



**Figura 4.1:** Representação esquemática de dois íons 1 e 2 utilizadas para expressar as cinco regras de Moriya.

em que  $i$  e  $j$  são índices de sítios distintos,  $\mathbf{S}_i$  são operadores de spin associados ao sítio  $i$  da rede e  $\vec{D}_{ij}$  são os chamados vetores de Dzyaloshinskii-Moriya (DM).

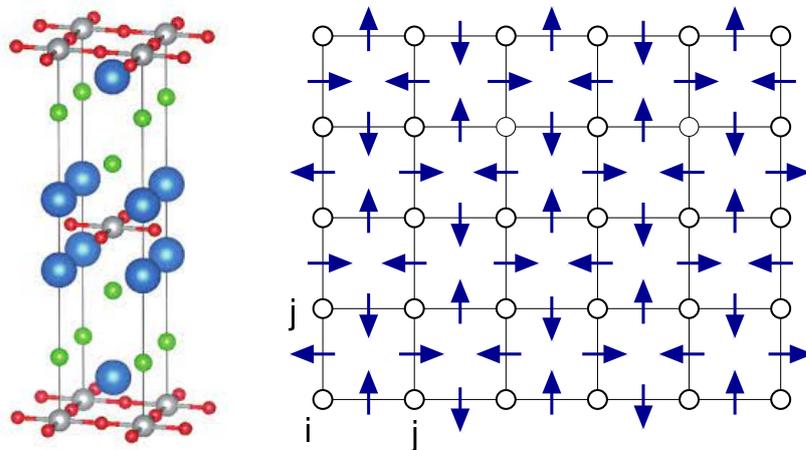
Após compreender melhor o problema proposto por Dzyaloshinskii [12], Moriya encontrou uma forma de caracterizar os vetores DM [13]. Para isso, Moriya propôs cinco regras para determinação de DM que podem ser enunciadas da seguinte forma (veja Fig. 4.1):

- 1 - When a center of inversion is located at  $C$ ,  $\mathbf{DM} = 0$ .
- 2 - When a mirror plane perpendicular to  $AB$  passes through  $C$ ,  $\mathbf{DM} \parallel$  mirror plane or  $\mathbf{DM} \perp AB$ .
- 3 - When there is a mirror plane including  $A$  and  $B$ ,  $\mathbf{DM} \perp$  mirror plane.
- 4 - When a two-fold rotation axis perpendicular to  $AB$  passes through  $C$ ,  $\mathbf{DM} \perp$  two-fold axis.
- 5 - When there is an  $n$ -fold axis ( $n \geq 2$ ) along  $AB$ ,  $\mathbf{DM} \parallel AB$ .

## 4.2 A interação DM e os operadores de ligação

Um ingrediente importante para a existência de excitações bosônicas (mágnons ou triplons) topologicamente não-triviais observadas nos sistemas magnéticos considerados nas Refs. [5, 44, 45, 46, 47, 48] e nas Refs. [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57] é a presença da interação DM entre os spins. Por este motivo, vamos introduzir a interação DM no modelo (3.1), a fim de buscar a quebra da degenerescência das bandas de energia dos triplons e introduzir uma topologia não-trivial nessas bandas.

Trabalhos envolvendo o estudo de cupratos (estruturas cristalinas dominadas por planos de óxidos de cobre) [60, 61] mostram como os vetores de DM se comportam em



**Figura 4.2:** Painel à esquerda: representação da rede cristalina do  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  na fase ortorrômbica a baixas temperaturas, indicando os íons  $\text{La}^{3+}$  (azuis),  $\text{O}^{2-}$  (verdes e vermelhos) e  $\text{Cu}^{2+}$  (cinza); figura retirada da Ref. [58]. Painel à direita: representação dos vetores DM no plano de  $\text{CuO}$  para a fase ortorrômbica do  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ; os círculos brancos indicam átomos de  $\text{Cu}$ , que fornecem o spin  $1/2$ .

diferentes compostos. Os cupratos têm sido muito estudados devido ao fato que esses compostos apresentam supercondutividade à alta temperatura crítica [62]. Dada a importância desses materiais e o fato de que os átomos de Cu nos planos de CuO formam uma rede quadrada, decidimos considerar os vetores de DM associados aos cupratos no nosso estudo.

Para o composto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , verifica-se que os vetores de DM na rede quadrada dos planos de  $\text{CuO}_2$  possuem sentidos opostos em  $x$  e  $y$  (veja Fig. 4.2). Por outro lado, para o composto  $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$  (Fig. 4.3), os vetores de DM nos planos de CuO são tais que  $\vec{D} = (d, 0, 0)$  e  $\vec{D}' = (0, -d, 0)$ , sendo  $d$  o módulo destes vetores [61]. Em particular, vamos considerar o padrão dos vetores de DM associados ao composto  $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$ .

A fim de estudar a fase VBS do modelo (3.1) acrescido do termo DM (4.1), vamos, com a ajuda da Fig. 3.3, reescrever o hamiltoniano  $H_{DM}$  em termos da rede dimerizada associada ao VBS colunar, isto é,

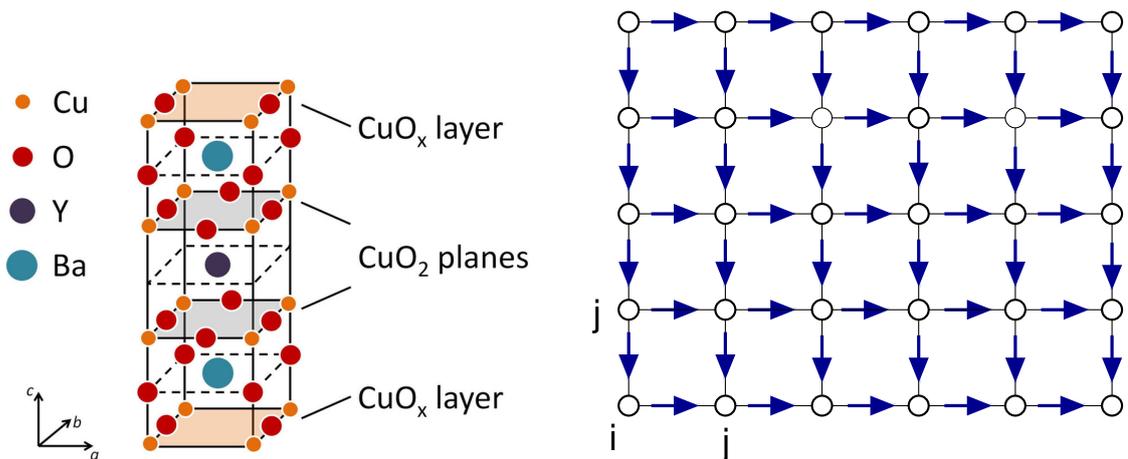
$$H_{DM} = \sum_{\langle ij \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j) = \sum_{i \in D} \left[ \vec{D}_{i,i} \cdot (\mathbf{s}_i^1 \times \mathbf{s}_i^2) + \vec{D}_{i,i+2} \cdot (\mathbf{s}_i^1 \times \mathbf{s}_{i+2}^1) \right] + \left[ \vec{D}_{i,i+2} \cdot (\mathbf{s}_i^2 \times \mathbf{s}_{i+2}^2) + \vec{D}_{i,i+1} \cdot (\mathbf{s}_i^2 \times \mathbf{s}_{i+1}^1) \right], \quad (4.2)$$

em que os índices inferiores 1 e 2 são referentes aos vetores primitivos  $\tau_1$  e  $\tau_2$ , [veja Eq. (3.3)] e

$$\vec{D}_{i,i} = \vec{D}_{i,i+1} = (d, 0, 0) \quad (4.3)$$

e

$$\vec{D}_{i,i+2} = (0, -d, 0). \quad (4.4)$$



**Figura 4.3:** Painel à esquerda: representação da rede cristalina do  $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$ , indicando os planos de  $\text{CuO}_2$  com Cu (laranja) e O (vermelhos), além dos átomos de Y (azul escuro) e de Ba (azul claro); figura retirada da Ref. [59]. Painel à direita: representação dos vetores de DM no plano de CuO, os círculos brancos indicam átomos de Cu, que fornecem o spin 1/2, sendo O apenas o mediador da interação.

Dessa forma, o hamiltoniano (4.2) assume a forma

$$H_{DM} = \sum_{i \in D} [d\hat{e}_1 \cdot [(\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_i^2) + (\mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+1}^1)] - d\hat{e}_2 \cdot [(\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_{i+2}^1) + (\mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+2}^2)]], \quad (4.5)$$

em que  $\hat{e}_1 = \hat{x}$  e  $\hat{e}_2 = \hat{y}$ .

Utilizando a representação (3.15) dos operadores de spin em termos dos operadores de ligação, podemos reescrever o hamiltoniano (4.5) em termos dos operadores de singleto  $s_i$  e tripleto  $t_{i\alpha}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_i^2 &= \sum_{\alpha=1}^3 \frac{i}{2} s_i^\dagger t_{i\alpha} + h.c., \quad (4.6) \\ \mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+1}^1 &= \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{4} (-s_i^\dagger s_{i+1}^\dagger t_{i\beta} t_{i+1,\gamma} - h.c. \right. \\ &\quad \left. - s_i s_{i+1}^\dagger t_{i\beta}^\dagger t_{i+1,\gamma} - h.c.) \right] \hat{e}_\alpha \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{i}{4} [(s_i^\dagger t_{i\beta} + h.c.) \epsilon_{\gamma\mu\nu} t_{i+1,\mu}^\dagger t_{i+1,\nu} \right. \\ &\quad \left. + \epsilon_{\beta\mu\nu} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} (-s_{i+1}^\dagger t_{i+1,\gamma} - h.c.)] \right] \hat{e}_\alpha \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\beta\mu\nu} \epsilon_{\gamma\mu'\nu'} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} t_{i+1,\mu'}^\dagger t_{i+1,\nu'} \right] \hat{e}_\alpha, \quad (4.7) \end{aligned}$$

enquanto os termos  $(\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_{i+2}^1)$  e  $(\mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+2}^2)$  seguem a mesma estrutura de (4.7) e as respectivas expressões são mostradas no Apêndice B, veja as Eqs. (B.1) e (B.2).

Assim como na expressão (3.18), podemos escrever o hamiltoniano (4.5) como

$$\begin{aligned} H_{DM} &= H_{DM}^0(1) + H_{DM}^0(2) + H_{DM}^1(1) + H_{DM}^1(2) + H_{DM}^2(1) \\ &\quad + H_{DM}^2(2) + H_{DM}^3(1) + H_{DM}^3(2) + H_{DM}^4(1) + H_{DM}^4(2), \quad (4.8) \end{aligned}$$

em que os índices (1) e (2) dizem respeito às componentes de  $H_{DM}$  que estão relacionadas com o produto escalar com os vetores  $d\hat{e}_1$  e  $d\hat{e}_2$ , respectivamente. As expressões dos termos  $H_{DM}^3(1)$ ,  $H_{DM}^3(2)$ ,  $H_{DM}^4(1)$  e  $H_{DM}^4(2)$  do hamiltoniano (4.8) são mostradas no Apêndice B. Na sequência, discutiremos apenas os termos do hamiltoniano (4.8) que vamos utilizar em nossa análise, ou seja, os termos em ordem zero e quadrática nos operadores de tripleto  $t$ , desprezando, inicialmente, o termo linear proveniente da interação local. O termo  $H_{DM}^1(1) + H_{DM}^1(2)$  envolve um tratamento distinto mostrado no Apêndice D e, por isso, será discutido posteriormente.

Na aproximação harmônica, o termo DM (4.8) assume a forma

$$H_{DM} \approx H_{DM}^{ham} = H_{DM}^0(1) + H_{DM}^0(2) + H_{DM}^2(1) + H_{DM}^2(2), \quad (4.9)$$

em que

$$H_{DM}^0(1) = H_{DM}^0(2) = 0, \quad (4.10)$$

$$H_{DM}^2(1) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \sum_{i \in D} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{4} (-s_i^\dagger s_{i+1}^\dagger t_{i\beta} t_{i+1,\gamma} - h.c. - s_i s_{i+1}^\dagger t_{i\beta}^\dagger t_{i+1,\gamma} - h.c.) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_1, \quad (4.11)$$

$$H_{DM}^2(2) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \sum_{i \in D} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{2} (s_i^\dagger s_{i+2}^\dagger t_{i\beta} t_{i+2,\gamma} + h.c. + s_i s_{i+2}^\dagger t_{i\beta}^\dagger t_{i+2,\gamma} + h.c.) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_2. \quad (4.12)$$

Novamente vamos considerar a aproximação (3.24), assim como reescrever as Eqs. (4.11) e (4.12) no espaço recíproco utilizando a transformada de Fourier (3.25). Verifica-se que

$$H_{DM}^2(1) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \frac{i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} N_0}{4} \sum_{\vec{k}} \sin(2k_x) (t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma} - t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger - 2t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma}) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_1, \quad (4.13)$$

$$H_{DM}^2(2) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \frac{i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} N_0}{2} \sum_{\vec{k}} \sin(k_y) (t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger + 2t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} - t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_2. \quad (4.14)$$

Portanto, na aproximação quadrática, o hamiltoniano (4.9) no espaço recíproco assume a forma

$$H_{DM}^{ham} = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \frac{i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} N_0}{4} \sum_{\vec{k}} \sin(2k_x) (t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma} - t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger - 2t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma}) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_1 - \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \frac{i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} N_0}{2} \sum_{\vec{k}} \sin(k_y) (t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger + 2t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} - t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{-\vec{k}\gamma}) \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_2. \quad (4.15)$$

Os únicos produtos escalares não nulos são aqueles associados às componentes  $\hat{e}_1$  e  $\hat{e}_2$  e, assim, o hamiltoniano (4.15) assume a forma

$$H_{DM}^{ham} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} -iC_{\vec{k}} (t_{\vec{k}z}^\dagger t_{\vec{k}x} - t_{-\vec{k}x}^\dagger t_{-\vec{k}z} - t_{\vec{k}x}^\dagger t_{\vec{k}z} + t_{-\vec{k}z}^\dagger t_{-\vec{k}x}) - iC_{\vec{k}} (t_{-\vec{k}z}^\dagger t_{\vec{k}x} - t_{\vec{k}x}^\dagger t_{-\vec{k}z} - t_{-\vec{k}x}^\dagger t_{\vec{k}z} + t_{\vec{k}z}^\dagger t_{-\vec{k}x}) - iD_{\vec{k}} (t_{\vec{k}y}^\dagger t_{\vec{k}z} - t_{-\vec{k}z}^\dagger t_{-\vec{k}y} - t_{\vec{k}z}^\dagger t_{\vec{k}y} + t_{-\vec{k}y}^\dagger t_{-\vec{k}z}) - iD_{\vec{k}} (t_{-\vec{k}y}^\dagger t_{\vec{k}z} - t_{\vec{k}z}^\dagger t_{-\vec{k}y} - t_{-\vec{k}z}^\dagger t_{\vec{k}y} + t_{\vec{k}y}^\dagger t_{-\vec{k}z}), \quad (4.16)$$

em que

$$C_{\vec{k}} = dN_0 \sin(k_y) \quad (4.17)$$

e

$$D_{\vec{k}} = \frac{dN_0 \sin(2k_x)}{2}. \quad (4.18)$$

Entretanto, como mostrado no Apêndice D, o único efeito da inclusão do termo linear (4.6) é apenas modificar a função  $D_{\vec{k}}$ , de modo que

$$D_{\vec{k}} = \frac{dN_0 \sin(2k_x)}{2} \rightarrow \frac{dN_0 \sin(2k_x)}{2} + \frac{dN_0}{2} [\sin(2k_x) + J_2 (\sin(2k_x + k_y) + \sin(2k_x - k_y))]. \quad (4.19)$$

### 4.3 O modelo $J_1 - J_2$ e a interação DM

O modelo a ser estudado a partir de agora é formado pela combinação dos hamiltonianos (3.1) e (4.1), ou seja,

$$H = H_{12} + H_{DM}, \quad (4.20)$$

em que os vetores de DM são dados pela Fig. 4.3. Utilizando as expressões (3.36) e (4.16), podemos escrever o hamiltoniano (4.20) em termos dos operadores de tripleto  $t$  e na aproximação harmônica, isto é,

$$H = H^{ham} + H_{DM}^{ham} = H_0 + H_2 + H_{DM}^{ham}, \quad (4.21)$$

em que  $H_0$  e  $H_2$  correspondem aos termos constante e em segunda ordem nos operadores de tripleto  $t$ , respectivamente.

Para diagonalizar este novo hamiltoniano (4.21), vamos reescrevê-lo em forma matricial, ou seja,

$$H = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^\dagger \hat{H}_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}, \quad (4.22)$$

em que,

$$\psi_{\vec{k}}^\dagger = \left( t_{\vec{k}x}^\dagger \quad t_{\vec{k}y}^\dagger \quad t_{\vec{k}z}^\dagger \quad t_{-\vec{k}x} \quad t_{-\vec{k}y} \quad t_{-\vec{k}z} \right) \quad (4.23)$$

e

$$\psi_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} t_{\vec{k}x} \\ t_{\vec{k}y} \\ t_{\vec{k}z} \\ t_{-\vec{k}x}^\dagger \\ t_{-\vec{k}y}^\dagger \\ t_{-\vec{k}z}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

são spinores e

$$\hat{H}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} A_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} \\ 0 & A_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} & 0 & B_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} \\ -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} & -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} \\ B_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} \\ 0 & B_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} & 0 & A_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} \\ -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} & -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

é o hamiltoniano do sistema na forma matricial, sendo que  $i = \sqrt{-1}$ . Podemos ainda escrever (4.25) como

$$\hat{H}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{A}_{\vec{k}} & \hat{B}_{\vec{k}} \\ \hat{B}_{\vec{k}} & \hat{A}_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

em que  $\hat{A}_{\vec{k}}$  e  $\hat{B}_{\vec{k}}$  são matrizes hermitianas  $3 \times 3$  com elementos iguais a  $A_{\vec{k}}^{ab}$  e  $B_{\vec{k}}^{ab}$ , respectivamente. Os detalhes do procedimento utilizado para a diagonalização deste problema podem ser encontrados no Apêndice C. Verifica-se que o hamiltoniano diagonalizado assume a forma

$$H = E'_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^\dagger \hat{H}'_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}, \quad (4.27)$$

em que  $E'_0$  é a energia do estado fundamental do sistema,

$$E'_0 = -\frac{3}{8} J_1 N_0 N - \frac{\mu N}{2} (N_0 - 1) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} (\Omega_{\vec{k}}^{\alpha} - A_{\vec{k}}), \quad (4.28)$$

com  $\alpha = 1, 2, 3 = x, y, z$ . A dispersão  $\Omega_{\vec{k}}^{\alpha}$  em (4.28) é o análogo da dispersão  $\omega_{\vec{k}}$  em (3.44), sendo que o índice  $\alpha$  indica uma das três expressões distintas da dispersão dos triplons  $x, y, z$  [para detalhes, veja as Eqs. (C.3), (C.4) e (C.5)]. Os novos spinores indicados em (4.27) são definidos como

$$\phi_{\vec{k}}^\dagger = \left( b_{kx}^\dagger \quad b_{ky}^\dagger \quad b_{kz}^\dagger \quad b_{-\vec{k}x} \quad b_{-\vec{k}y} \quad b_{-\vec{k}z} \right), \quad (4.29)$$

em que os novos operadores bosônicos de triplon  $b$  estão relacionados com os antigos operadores de tripleto  $t$  da seguinte forma:

$$\phi_{\vec{k}} = \hat{T}_{\vec{k}}^{-1} \psi_{\vec{k}}, \quad (4.30)$$

em que  $\hat{T}_{\vec{k}}$  é a matriz de transformação escrita em termos dos coeficientes de Bogoliubov [14, 35],

$$\hat{T}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{U}_{\vec{k}} & \hat{C}_{\vec{k}} \\ \hat{V}_{\vec{k}} & \hat{X}_{\vec{k}} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

As matrizes  $\hat{U}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{V}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{C}_{\vec{k}}$  e  $\hat{X}_{\vec{k}}$  contidas em  $\hat{T}_{\vec{k}}$  são matrizes  $3 \times 3$ , sendo que seus elementos

são definidos como  $u^{ab}(\vec{k})$ ,  $v^{ab}(\vec{k})$ ,  $c^{ab}(\vec{k})$  e  $x^{ab}(\vec{k})$ , respectivamente, com  $a, b = 1, 2, 3$ . Finalmente,  $\hat{H}'_{\vec{k}}$  é uma matriz  $6 \times 6$  diagonal,

$$\hat{H}'_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{h}_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \hat{h}_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

com

$$\hat{h}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \Omega_{\vec{k}}^x & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_{\vec{k}}^y & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_{\vec{k}}^z \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

É possível diagonalizar o hamiltoniano (4.22) de maneira exata (veja Apêndice C para detalhes), sem a necessidade de utilizar a matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$  e, por esta razão, no momento, não mostraremos a forma dos coeficientes de Bogoliubov. No entanto, a expressão (4.31) da matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$  será de grande importância para a definição da curvatura de Berry e, por consequência, do número de Chern e da condutividade Hall térmica.

Podemos ainda escrever o hamiltoniano (4.27) da seguinte forma

$$H = E'_0 + \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}}^{\alpha} b_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} b_{\vec{k}\alpha}, \quad (4.34)$$

sendo que as novas equações auto-consistentes, determinadas via as condições  $\partial E'_0 / \partial N_0 = 0$  e  $\partial E'_0 / \partial \mu = 0$ , são dadas por

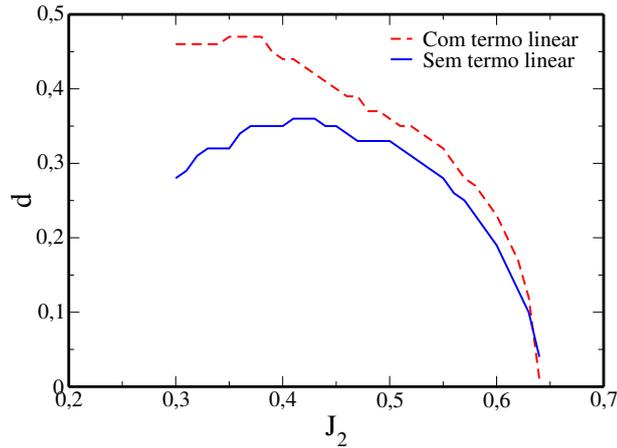
$$N_0 = 1 + \frac{1}{2N'} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{\partial \Omega_{\vec{k}}^{\alpha}}{\partial \mu} + 1 \right), \quad (4.35)$$

$$\mu = -\frac{3}{4} J_1 + \frac{1}{2N'} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{\partial \Omega_{\vec{k}}^{\alpha}}{\partial N_0} - \frac{B_{\vec{k}}}{N_0} \right). \quad (4.36)$$

Novamente, podemos resolver as Eqs. (4.35) e (4.36) numericamente a fim de determinar os parâmetros  $N_0$  e  $\mu$  em termos da constante de troca  $J_2$  e do módulo  $d$  dos vetores de DM. Assim, podemos determinar a energia do estado fundamental  $E'_0$  e a dispersão dos triplons  $\Omega_{\vec{k}}^{\alpha}$ .

Começamos discutindo o diagrama de fases do modelo (4.20), que é mostrado na Fig. 4.4. Note que o diagrama é feito para valores da constante de troca  $0.3 \leq J_2 \leq 0.64$ , pois essa é a região paramagnética do sistema [14, 15, 16, 17, 18, 19]. Além disso, realizamos os cálculos para valores do módulo dos vetores de DM tais que  $0.0 \leq d \leq 1.0$ . Os dados mostrados na Fig. 4.4 indicam a região no espaço de parâmetros  $J_2$  e  $d$  onde é possível encontrar soluções das equações auto-consistentes (4.35) e (4.36) (região abaixo das curvas contínua e tracejada).

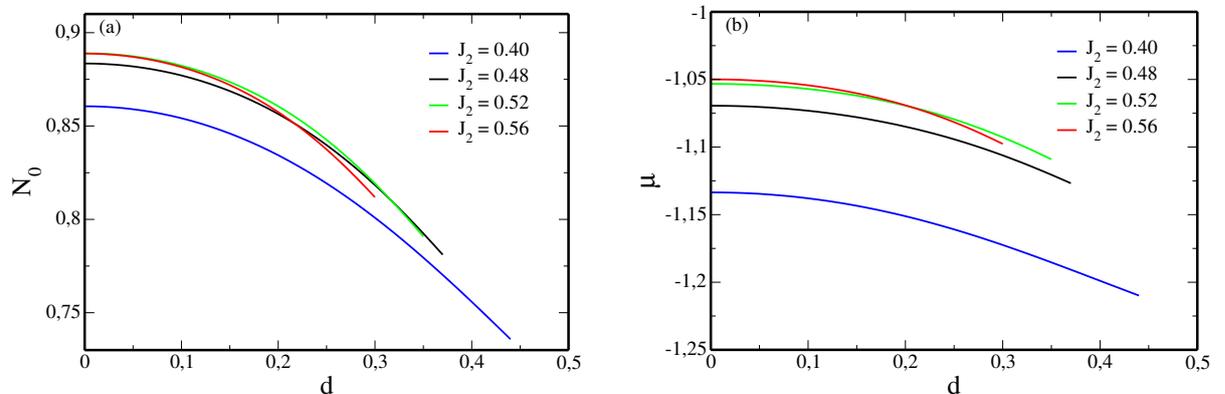
Nota-se que o sistema estudado não admite soluções para todos os valores do parâ-



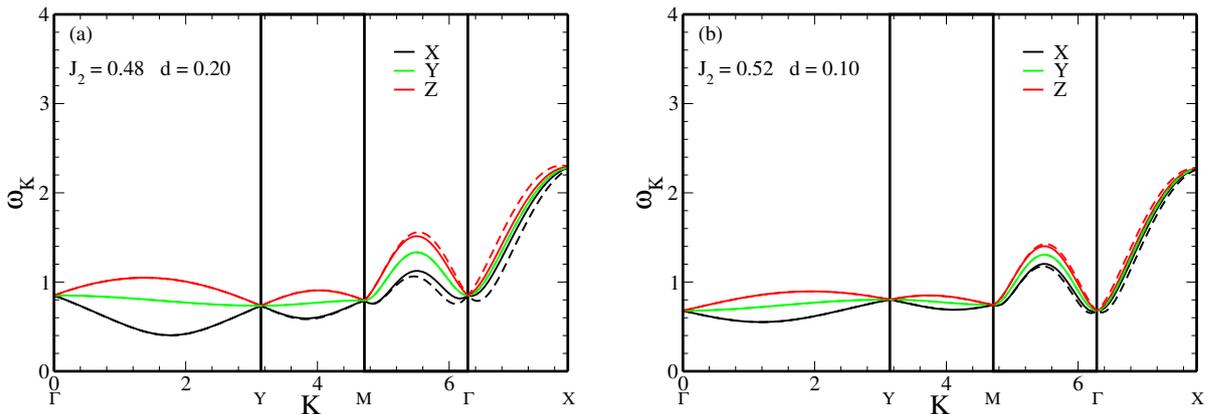
**Figura 4.4:** Região de estabilidade do VBS colunar (abaixo das curvas contínua e tracejada) para o modelo (4.20), considerando (linha contínua) e desprezando (linha tracejada) o termo linear (4.6).

metro  $d$ . Quando o termo linear (4.6) não é considerado, nota-se que o valor máximo do parâmetro  $d = 0.36$  ocorre para  $J_2 = 0.42$ . Por outro lado, quando consideramos o termo linear (4.6), vemos que o valor máximo do parâmetro  $d = 0.47$  ocorre em torno de  $J_2 = 0.36$ . Note que, para a região  $0.30 \leq J_2 \leq 0.45$ , as curvas são bastante distintas, enquanto, para  $J_2 \gtrsim 0.5$ , a região de estabilidade do VBS independe da presença ou da ausência do termo linear (4.6). Aqui, o termo linear está sendo tratado de forma aproximada, utilizando uma expansão na razão  $d/2J_1$  e considerando apenas os termos em primeira ordem deste parâmetro, como mostrado no Apêndice D; a diferença entre as curvas azul e vermelha para  $J_2 < 0.45$  pode ser vista como uma indicação de que termos de ordem superior precisam ser incluídos, já que o termo linear deveria fornecer uma correção pequena; dessa forma, na sequência, serão consideradas apenas as configurações com  $d < 0.30$ .

Os comportamentos dos parâmetros  $N_0$  e  $\mu$  em função de  $d$  para valores fixos da



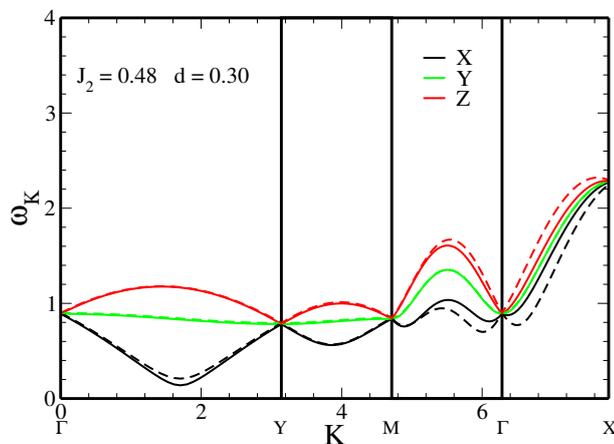
**Figura 4.5:** Comportamento dos parâmetros (a)  $N_0$  e (b)  $\mu$  em termos do módulo  $d$  dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca  $J_2$ . Resultados determinados via solução numérica das Eqs. (4.35) e (4.36).



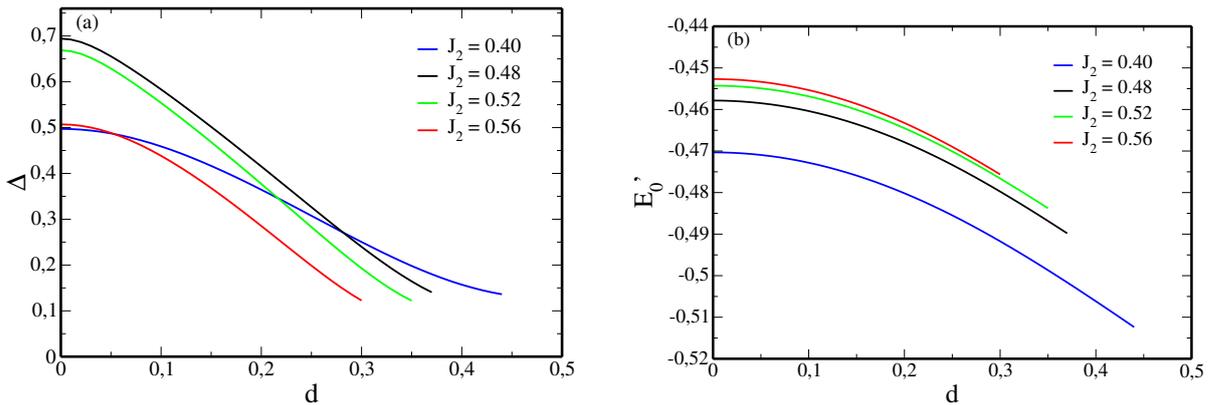
**Figura 4.6:** Dispersões  $\Omega_k^\alpha$  dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para (a)  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.20$  e (b)  $J_2 = 0.52$  e  $d = 0.10$  na ausência (linhas contínuas) e presença (linhas tracejadas) do termo linear (4.6) associado à interação DM.

constante de troca  $J_2$  são mostrados nas Figs. 4.5 (a) e (b), respectivamente. Vemos mais uma vez que, mesmo com  $d$  nulo, não temos  $N_0$  igual a 1.0 para nenhum valor de  $J_2$ , o que se deve ao fato de considerarmos flutuações quânticas em nossos cálculos, fato que foi verificado no capítulo anterior, onde a interação DM não foi considerada. Sendo assim, não conseguimos verificar o caso ideal, isto é, um estado VBS composto por um único estado de singlete por dímero da rede quadrada.

As dispersões dos triplons, determinadas através das Eqs. (C.3), (C.4) e (C.5) e desconsiderando o termo linear (4.6), para  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.20$  são mostradas na Fig. 4.6 (a) (linhas contínuas). Nota-se que não há quebra completa da degenerescência, quando comparado com o caso  $d = 0$  [Fig. 3.6 (a)], pois a dispersão é triplamente degenerada nos pontos  $\Gamma, Y, M$  e  $X$  da primeira zona de Brillouin dimerizada (veja Fig. 3.4). Comportamento similar é observado para o caso  $J_2 = 0.52$  e  $d = 0.10$  [Fig. 4.6 (b)]. Dessa forma, não podemos continuar com a investigação sobre as propriedades topológicas destes tri-



**Figura 4.7:** Dispersão  $\Omega_k^\alpha$  dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.30$  na ausência (linhas contínuas) e presença (linhas tracejadas) do termo linear (4.6) associado à interação DM.



**Figura 4.8:** Comportamento dos parâmetros (a)  $\Delta$  e (b)  $E'_0$  em termos do módulo  $d$  dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca  $J_2$ . Resultados determinados via a solução numérica da Eq. (4.28).

plons, pois não é possível associar um número de Chern para tais bandas degeneradas. As Figs. 4.6 (a) e (b) também mostram a dispersão dos triplons considerando o termo linear (4.6) (curvas tracejadas). Nota-se que o principal efeito da presença do termo linear (4.6) ocorre em torno do centro da primeira zona de Brillouin e ao longo da direção  $\Gamma - X$ . Veja que, à medida que o parâmetro  $d$  da interação DM aumenta, maior é a distinção entre as curvas contínuas e tracejadas. Essas diferenças ficam mais evidentes para o caso  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.30$  mostrado na Fig. 4.7 (para mais detalhes, veja Apêndice D).

A partir da dispersão dos triplons  $\Omega_k^\alpha$ , podemos também calcular a energia do gap  $\Delta$  e a energia do estado fundamental  $E'_0$  em função do parâmetro  $d$  para determinados valores da constante de troca  $J_2$  [veja Figs. 4.8 (a) e (b)]. Em relação à energia do gap  $\Delta$ , vemos que, para todos os valores de  $J_2$ , o valor do gap diminui à medida que o parâmetro  $d$  aumenta. O fechamento do gap  $\Delta$  estaria, portanto, relacionado com a transição de fase mostrada na Fig. 4.4. Para o caso  $d = 0$ , nota-se que a energia do gap aumenta quando  $J_2$  varia de  $J_2 = 0.40$  para  $J_2 = 0.48$ , porém diminui, quando  $J_2$  aumenta de  $J_2 = 0.52$  para  $J_2 = 0.56$ . Em relação à energia do estado fundamental, nota-se que  $E'_0$  aumenta com o acréscimo da constante de troca  $J_2$  para valores fixos de  $d$ . Por outro lado, para valores fixos de  $J_2$ ,  $E'_0$  decresce à medida que o parâmetro  $d$  aumenta.

Como último recurso para a quebra da degenerescência das bandas de energia dos triplons, introduziremos um campo magnético externo  $\vec{B}$  e estudaremos seus efeitos sob o modelo (4.20). Os resultados e as discussões acerca dessa inserção serão apresentados na próxima seção.

## 4.4 A adiç o de um campo magn tico externo

O pr ximo passo para tentarmos levantar a degeneresc ncia ilustrada nas Figs. 4.6 (a) e (b)   introduzir um campo magn tico externo  $\vec{B}$ . Para isso, acrescentamos o seguinte termo no modelo (4.20)

$$H_B = \vec{S} \cdot \vec{B} = \sum_{\alpha=1}^3 S_\alpha B_\alpha, \quad (4.37)$$

onde  $\alpha = x, y, z = 1, 2, 3$ , de modo que o hamiltoniano do novo modelo que ser  analisado   dado por

$$H = H_{12} + H_{DM} + H_B, \quad (4.38)$$

sendo que os termos  $H_{12}$  e  $H_{DM}$  est o indicados na Eq. (4.20).

Para prosseguirmos com a an lise do hamiltoniano (4.37), utilizaremos novamente o formalismo dos operadores de liga o para os operadores de spin [veja Eq. (3.15)]. Como   necess rio identificar os spins 1 e 2 em cada s tio da rede dimerizada, temos que

$$H_B = \sum_i \left( \sum_{\alpha=1}^3 S_{i\alpha}^1 B_\alpha + \sum_{\alpha=1}^3 S_{i\alpha}^2 B_\alpha \right), \quad (4.39)$$

o que resulta em

$$H_B = -i \sum_i \sum_{\alpha=1}^3 \left( \epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i\beta}^\dagger t_{i\gamma} \right) B_\alpha. \quad (4.40)$$

Com a ajuda da transformada de Fourier (3.25) para o operador  $t$ , podemos reescrever a express o anterior no espa o rec proco:

$$H_B = -i \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\vec{k}} \left( \epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} \right) B_\alpha. \quad (4.41)$$

Trabalhando com o hamiltoniano (4.41), podemos encontrar uma forma tal qual se relaciona com a express o (4.16), ou seja,

$$\begin{aligned} H_B = & -\frac{iB_x}{2} \sum_{\vec{k}} \left( t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} + t_{-\vec{k}\gamma} t_{-\vec{k}\beta}^\dagger - t_{\vec{k}\gamma}^\dagger t_{\vec{k}\beta} - t_{-\vec{k}\beta} t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger \right) \\ & - \frac{iB_y}{2} \sum_{\vec{k}} \left( t_{\vec{k}\gamma}^\dagger t_{\vec{k}\alpha} + t_{-\vec{k}\alpha} t_{-\vec{k}\gamma}^\dagger - t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{\vec{k}\gamma} - t_{-\vec{k}\gamma} t_{-\vec{k}\alpha}^\dagger \right) \\ & - \frac{iB_z}{2} \sum_{\vec{k}} \left( t_{\vec{k}\alpha}^\dagger t_{\vec{k}\beta} + t_{-\vec{k}\beta} t_{-\vec{k}\alpha}^\dagger - t_{\vec{k}\beta}^\dagger t_{\vec{k}\alpha} - t_{-\vec{k}\alpha} t_{-\vec{k}\beta}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Dessa forma, de maneira an loga   Eq. (4.22), podemos reescrever o hamiltoniano (4.38) na forma matricial, mudando apenas o conte do da matriz  $\hat{H}_{\vec{k}}$  [veja a matriz  $\hat{H}'_{\vec{k}}$  contida no Ap ndice E]. No entanto, o processo para a diagonaliza o do novo hamiltoniano  $\hat{H}'_{\vec{k}}$

não é similar àquele utilizado na diagonalização do modelo (4.20) sem o campo externo, pois as componentes  $x, y, z$  do campo modificam o problema matemático. Contudo, nota-se que se considerarmos apenas a componente  $B_z$  do campo externo, o processo para a diagonalização não se altera, quando comparado ao processo empregado na diagonalização do modelo (4.20) sem campo magnético externo. Assim, considerando apenas a componente  $B_z$ , obtivemos finalmente a quebra da degenerescência na dispersão dos triplons do modelo estudado, como será mostrado abaixo.

Considerando apenas a componente  $z$  do campo externo, temos que o equivalente da Eq. (4.25) assume a forma

$$\hat{H}'_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} A_{\vec{k}} & -iB_z & iC_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} \\ iB_z & A_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} & 0 & B_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} \\ -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} & -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} \\ B_{\vec{k}} & 0 & iC_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} & iB_z & iC_{\vec{k}} \\ 0 & B_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} & -iB_z & A_{\vec{k}} & -iD_{\vec{k}} \\ -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & B_{\vec{k}} & -iC_{\vec{k}} & iD_{\vec{k}} & A_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

em que a forma do novo hamiltoniano diagonal,

$$H = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^\dagger \hat{H}'_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}, \quad (4.44)$$

é idêntica à forma do hamiltoniano (4.22), exceto pela expressão de  $\hat{H}'_{\vec{k}}$ . Como dito anteriormente, o processo para a diagonalização de (4.44) é idêntico ao processo empregado na diagonalização do modelo (4.20) sem o campo externo, com a ressalva de que agora o campo externo  $B_z$  aparece na expressão de  $\Omega_{\vec{k}}$ , ou seja, a expressão do hamiltoniano diagonal, e as equações autoconsistentes para os parâmetros  $N_0$  e  $\mu$  são parecidas ao caso sem campo externo,

$$H = E'_0 + \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}}^{\alpha} b_{\vec{k}\alpha}^\dagger b_{\vec{k}\alpha}, \quad (4.45)$$

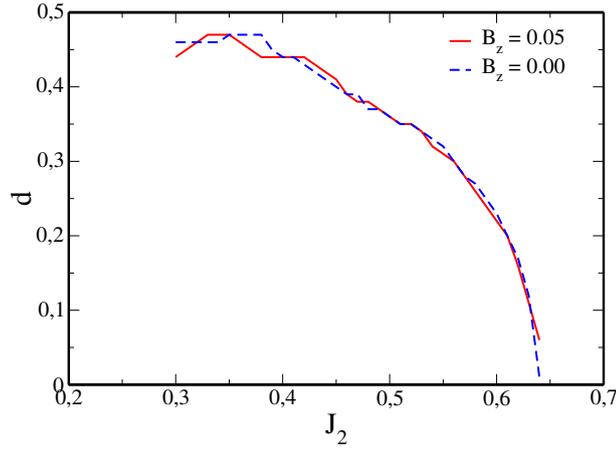
$$N_0 = 1 + \frac{1}{2N'} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{\partial \Omega_{\vec{k}}^{\alpha}}{\partial \mu} + 1 \right) \quad (4.46)$$

e

$$\mu = -\frac{3}{4} J_1 + \frac{1}{2N'} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{\partial \Omega_{\vec{k}}^{\alpha}}{\partial N_0} - \frac{B_{\vec{k}}}{N_0} \right), \quad (4.47)$$

sendo que (4.46) e (4.47) são obtidas via as condições  $\frac{\partial E'_0}{\partial N_0} = 0$  e  $\frac{\partial E'_0}{\partial \mu} = 0$ . As expressões das dispersões  $\Omega_{\vec{k}}$  para a situação com o campo externo podem ser encontradas no Apêndice C [veja as Eqs. (C.13), (C.14) e (C.15)]. Podemos então inserir o campo magnético externo no processo numérico para o cálculo das expressões acima e verificar alguns resultados.

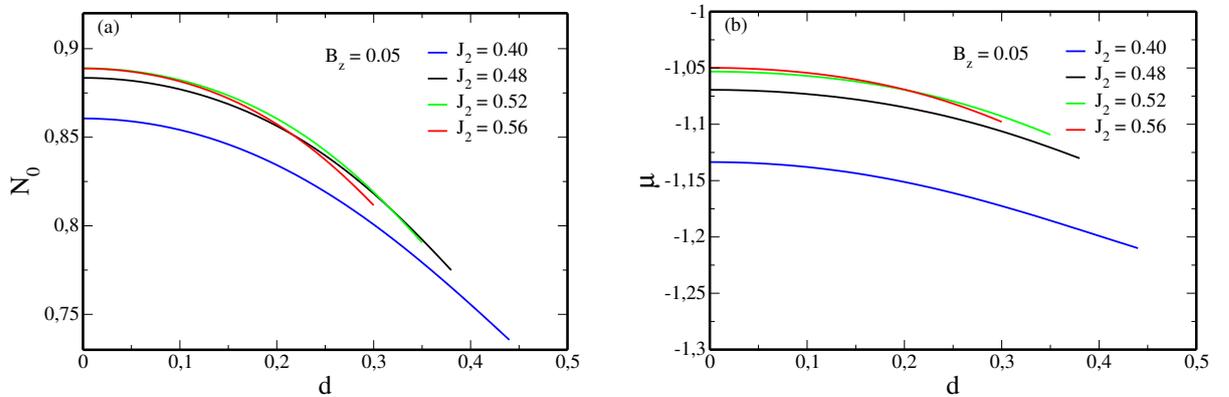
Começamos novamente pelo diagrama de fases mostrado na Fig. 4.9, onde percebe-se



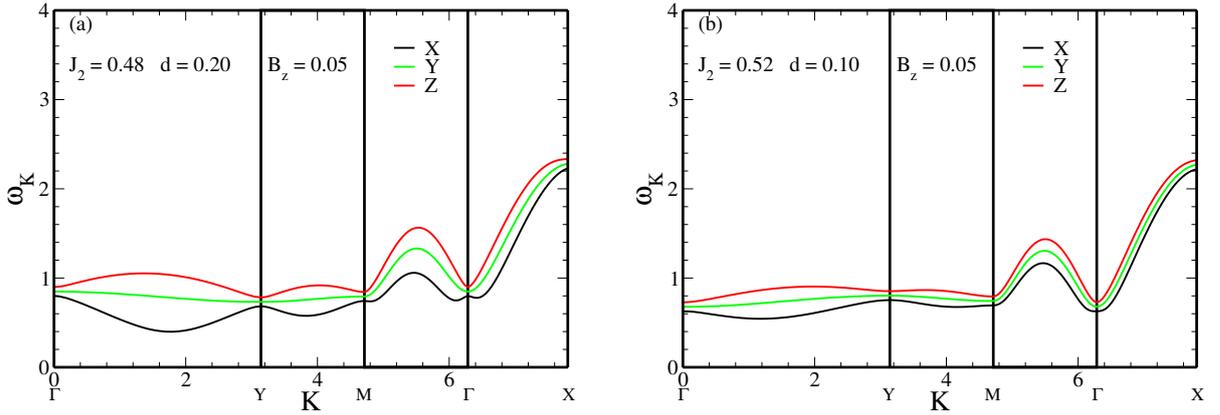
**Figura 4.9:** Região de estabilidade (abaixo das curvas contínua e tracejada) do VBS colunar para o modelo (4.38) na ausência (linha tracejada) e presença (linha contínua) de um campo magnético externo  $B_z$ .

que a adição do campo magnético externo não altera abruptamente a região de estabilidade do estado VBS, quando comparado ao caso sem o campo externo. As Figs. 4.10 (a) e (b) mostram, respectivamente, o comportamento dos parâmetros  $N_0$  e  $\mu$  em termos do módulo  $d$  dos vetores de DM para determinados valores de  $J_2$ . Ambos os gráficos são bastante similares aos resultados obtidos na ausência do campo externo [veja Figs. 4.5 (a) e (b)]. Dessa forma, podemos afirmar que o campo externo  $B_z$  altera muito pouco os valores dos parâmetros  $N_0$  e  $\mu$ .

Nas Figs. 4.11 (a) e (b), vemos a dispersão  $\Omega_k^\alpha$  dos triplons, calculadas a partir das expressões (C.3), (C.4) e (C.5) e utilizando as quantidades (C.13), (C.14) e (C.15) que incluem o campo externo  $B_z$ , para  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.20$  [Fig. 4.11 (a)] e  $J_2 = 0.52$  e  $d = 0.10$  [Fig. 4.11 (b)] (para detalhes, veja Apêndice C). Nesse caso, pode-se notar que houve a quebra da tripla degenerescência nos pontos  $\Gamma$ ,  $Y$ ,  $M$  e  $X$  da primeira zona de Brillouin encontrada no caso de campo externo nulo [veja as Figs. 4.6 (a) e (b)]. A partir desse



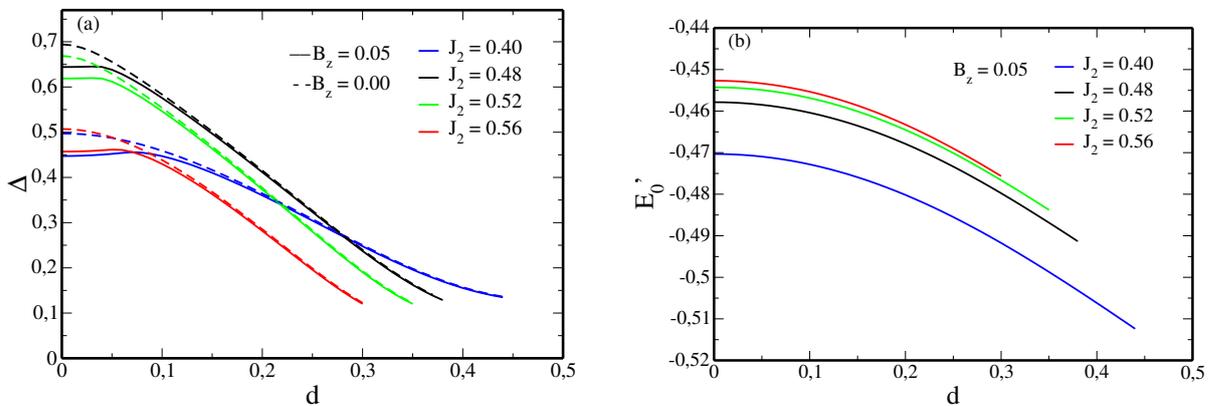
**Figura 4.10:** Comportamento dos parâmetros (a)  $N_0$  e (b)  $\mu$  em termos do módulo  $d$  dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca  $J_2$  para  $B_z = 0.05$ . Resultados determinados via a solução numérica das Eqs. (4.46) e (4.47) (versão com campo magnético externo  $B_z$ ).



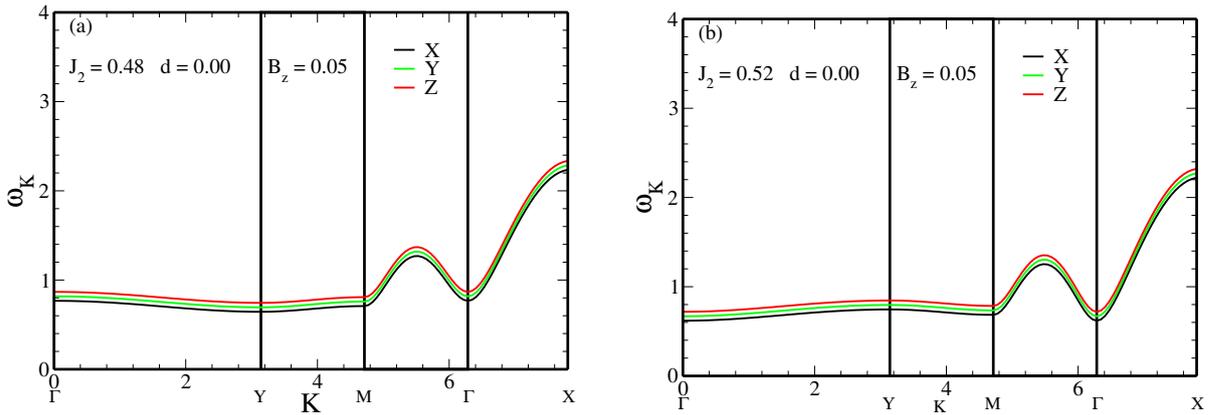
**Figura 4.11:** Dispersões  $\Omega_k^\alpha$  dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5)] para o caso com adição do campo magnético externo  $B_z$  para (a)  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.20$  e (b)  $J_2 = 0.52$  e  $d = 0.10$  com a presença do termo linear (4.6) associado à interação DM.

momento, podemos associar um número de Chern para cada uma das bandas de energia dos triplons e, assim, podemos continuar com a investigação das possíveis propriedades topológicas deste sistema. Lembrando que as dispersões dos triplons mostradas nas Figs. 4.11 (a) e (b) consideram a presença do termo linear (4.6). Os efeitos desse termo linear na dispersão dos triplons foi discutido na Sec. 4.3 para o caso  $B_z = 0$ .

Finalmente, nas Figs. 4.12 (a) e (b), vemos, respectivamente, o comportamento do gap  $\Delta$  e da energia do estado fundamental  $E'_0$  em função do parâmetro  $d$  para diferentes valores da constante de troca  $J_2$ . Note que há uma comparação com o caso sem campo externo na Fig. 4.12 (a): para um valor fixo de  $J_2$ , os valores da energia de gap  $\Delta$  são distintos para os casos  $B_z$  nulo e finito apenas para pequenos valores do parâmetro  $d$ . Dessa forma, os valores do gap  $\Delta$  associados às dispersões mostradas nas Figs. 4.11 (a) e (b) são bastante similares ao caso sem campo externo [veja Figs. 4.6 (a) e (b)]. Comparando-se as Figs. 4.8 (b) e 4.12 (b), verifica-se que a presença do campo magnético  $B_z$  praticamente não altera o valor da energia do estado fundamental.



**Figura 4.12:** Comportamento dos parâmetros (a)  $\Delta$  e (b)  $E'_0$  em termos do módulo  $d$  dos vetores de DM para determinados valores da constante de troca  $J_2$ . Resultados determinados via a solução numérica da Eq. (4.28) (versão com campo magnético externo  $B_z$ ).



**Figura 4.13:** Dispersões  $\Omega_k^\alpha$  dos triplons [veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5) para o caso com adição do campo magnético externo  $B_z$ ] para (a)  $J_2 = 0.48$  e  $d = 0.00$  e (b)  $J_2 = 0.52$  e  $d = 0.00$  com a presença do termo linear (4.6) associado à interação DM.

É importante mencionar que resolvemos numericamente os problemas autoconsistentes (4.46) e (4.47) e determinamos as dispersões  $\Omega_k^\alpha$  para diferentes valores de  $B_z$ . Dado que todos os casos apresentam o mesmo comportamento qualitativo, decidimos mostrar apenas os resultados para  $B_z = 0.05$  a fim de ilustrar o efeito do campo magnético externo. Como esperado, verificamos que, com o aumento de  $B_z$ , o gap entre as três bandas de energia dos triplons aumenta. Paralelamente, realizamos cálculos para  $d = 0$  e  $B_z$  finito, sendo que alguns resultados obtidos são mostrados nas Figs. 4.13 (a) e (b). Nota-se que o campo magnético externo já é suficiente para quebrar a tripla degenerescência encontrada nas bandas de energia dos triplons do modelo inicial (3.1). Apesar disso, consideramos a presença da interação de Dzyaloshinskii-Moriya, pois queremos verificar se ela é capaz de gerar triplons topológicos em nosso sistema.

# Propriedades topológicas do sistema

Nesta última etapa do nosso trabalho, vamos discutir algumas propriedades do modelo de Heisenberg considerado e da fase VBS colunar que estão associados à sua topologia, como, por exemplo, o número de Chern das bandas referentes à dispersão dos triplons, isto é, vamos verificar se os triplons são ou não topológicos, e o que isso afeta no cálculo da condutividade Hall térmica do sistema.

## 5.1 Introdução

Neste capítulo, vamos calcular e analisar algumas propriedades topológicas das excitações elementares da fase VBS colunar do sistema AFM na rede quadrada acrescido da interação de Dzyaloshinskii-Moriya e de um campo magnético externo  $B_z$ , isto é, vamos verificar a possível não trivialidades dos triplons (número de Chern das bandas de energia não nulos). Inicialmente, precisamos calcular a curvatura de Berry [10, 11] para cada uma das bandas de energia  $x, y$  e  $z$  dos triplons, pois é a partir dessa curvatura que o cálculo do número de Chern (invariante topológico)[6, 7, 8] é feito. Finalmente, vamos verificar se as possíveis curvaturas de Berry finitas das bandas dos triplons podem acarretar em uma condutividade Hall térmica  $\kappa_{xy} \neq 0$ , como discutido nas referências [31, 32, 33, 34]. De acordo com os teoremas *no-go* discutidos em [31] e [63], esse efeito não deveria ser observado na rede quadrada.

## 5.2 Curvatura de Berry

A curvatura de Berry é uma quantidade definida para cada uma das bandas de energia do sistema. Sua definição é baseada na matriz de transformação  $\hat{T}_{\vec{k}}$  [Eq. (4.31)], que relaciona os novos operadores bosônicos que diagonalizam o problema matricial (4.27) com os operadores na base não diagonal (4.22),

$$\hat{T}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{U}_{\vec{k}} & \hat{C}_{\vec{k}} \\ \hat{V}_{\vec{k}} & \hat{X}_{\vec{k}} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Como discutido na Sec. 4.3, o hamiltoniano (4.43) é  $6 \times 6$  e, assim, a matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$  também é  $6 \times 6$ , sendo que as matrizes  $\hat{U}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{V}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{C}_{\vec{k}}$  e  $\hat{X}_{\vec{k}}$  contidas em  $\hat{T}_{\vec{k}}$  são matrizes  $3 \times 3$  e possuem elementos do tipo  $u^{ab}(\vec{k})$ ,  $v^{ab}(\vec{k})$ ,  $c^{ab}(\vec{k})$  e  $x^{ab}(\vec{k})$ , respectivamente, com  $a, b = 1, 2, 3$ . Estes elementos são conhecidos como os coeficientes de Bogoliubov da transformação, que

realizam uma transformação canônica e diagonalizam o problema. A matrix (5.1) obedece algumas propriedades, tais como

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \hat{T}_{\vec{k}}^\dagger \hat{H}_{\vec{k}} \hat{T}_{\vec{k}}, \quad (5.2)$$

$$\hat{T}_{\vec{k}}^\dagger \hat{I}_b \hat{T}_{\vec{k}} = \hat{I}_b = \hat{T}_{\vec{k}} \hat{I}_b \hat{T}_{\vec{k}}^\dagger, \quad (5.3)$$

em que  $\varepsilon_{\vec{k}}$  são os elementos do resultado da diagonalização (4.43) e

$$\hat{I}_b = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

sendo  $\hat{I}_{3 \times 3}$  a matriz identidade. A matriz  $\hat{I}_b$  também é utilizada no processo de diagonalização do hamiltoniano (4.43), pois estamos considerando um sistema bosônico (veja Apêndice C). Definimos então a curvatura de Berry [9, 10, 11, 35] no espaço de momento  $\vec{k}$  como

$$\Omega_n(\vec{k}) = i\epsilon_{\mu\nu} \left[ \hat{I}_b \frac{\partial \hat{T}_{\vec{k}}^\dagger}{\partial k_\mu} \hat{I}_b \frac{\partial \hat{T}_{\vec{k}}}{\partial k_\nu} \right]_{nn}, \quad (5.5)$$

em que o índice  $nn$  com  $n = 1, 2, 3$  indica os elementos da diagonal da matriz  $6 \times 6$  resultado do produto dos elementos contidos na expressão acima,  $n = 1, 2, 3$  se refere às curvaturas de Berry das bandas  $x, y, z$ , respectivamente,  $\mu$  e  $\nu = x, y$ , sendo que a soma sob índices repetidos é considerada,  $k_x$  e  $k_y$  estão restritos à primeira zona de Brillouin (da rede dimerizada),  $\epsilon_{\mu\nu}$  é o tensor antisimétrico e  $i = \sqrt{-1}$ . Como podemos verificar em (5.5),  $\Omega_n(\vec{k})$  é calculada a partir de derivadas parciais dos elementos da matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$  em relação às componentes  $k_x$  e  $k_y$  do momento  $\vec{k}$  e, assim, precisamos encontrar todos os 36 coeficientes de Bogoliubov da matriz de transformação. Além disso, note que em (5.5) a matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$  têm o mesmo papel das funções de Bloch  $u_n(\vec{k})$  na definição (2.66).

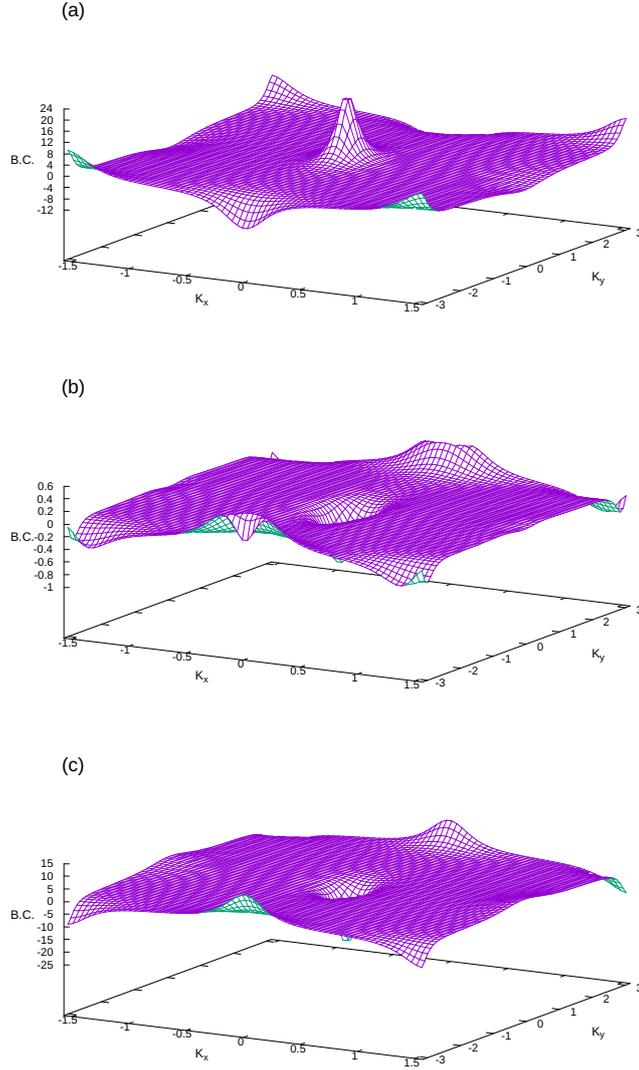
Para o cálculo dos coeficientes de Bogoliubov, utilizamos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{F} - \Omega_{\vec{k}}^1 \hat{F} &= 0, \\ \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{S} - \Omega_{\vec{k}}^2 \hat{S} &= 0, \\ \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{Z} - \Omega_{\vec{k}}^3 \hat{Z} &= 0, \end{aligned} \quad (5.6)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{J} + \Omega_{\vec{k}}^1 \hat{J} &= 0, \\ \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{G} + \Omega_{\vec{k}}^2 \hat{G} &= 0, \\ \hat{I}_b \hat{H}'_{\vec{k}} \hat{Y} + \Omega_{\vec{k}}^3 \hat{Y} &= 0, \end{aligned} \quad (5.7)$$

em que  $\hat{H}'_{\vec{k}}$  corresponde ao hamiltoniano não diagonal (4.43),  $\Omega_{\vec{k}}^\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) é a dispersão dos triplons  $x, y, z$  encontradas no Apêndice C (versão com campo magnético externo) e  $\hat{F}_{\vec{k}}, \hat{S}_{\vec{k}}, \hat{Z}_{\vec{k}}, \hat{J}_{\vec{k}}, \hat{G}_{\vec{k}}$  e  $\hat{Y}_{\vec{k}}$  são matrizes envolvendo os coeficientes de Bogoliubov da matriz

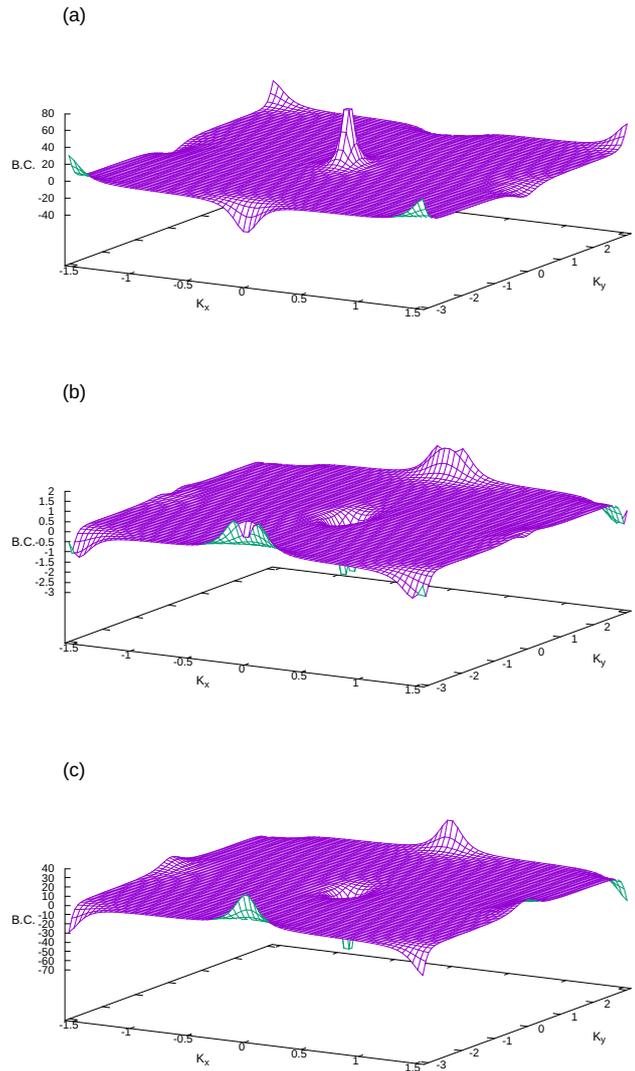


**Figura 5.1:** Curvaturas de Berry das bandas de energia (a)  $x$ , (b)  $y$  e (c)  $z$  dos triplons para o conjunto de parâmetros  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.10$  e  $B_z = 0.05$  do modelo (4.38).

de transformação  $\hat{T}_{\vec{k}}$  dados por

$$\begin{aligned}
 \hat{F}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} u^{11}(\vec{k}) & u^{12}(\vec{k}) & u^{13}(\vec{k}) & v^{11}(\vec{k}) & v^{12}(\vec{k}) & v^{13}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \\
 \hat{S}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} u^{21}(\vec{k}) & u^{22}(\vec{k}) & u^{23}(\vec{k}) & v^{21}(\vec{k}) & v^{22}(\vec{k}) & v^{23}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \\
 \hat{Z}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} u^{31}(\vec{k}) & u^{32}(\vec{k}) & u^{33}(\vec{k}) & v^{31}(\vec{k}) & v^{32}(\vec{k}) & v^{33}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \\
 \hat{J}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} c^{11}(\vec{k}) & c^{12}(\vec{k}) & c^{13}(\vec{k}) & x^{11}(\vec{k}) & x^{12}(\vec{k}) & x^{13}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \\
 \hat{G}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} c^{21}(\vec{k}) & c^{22}(\vec{k}) & c^{23}(\vec{k}) & x^{21}(\vec{k}) & x^{22}(\vec{k}) & x^{23}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \\
 \hat{Y}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} c^{31}(\vec{k}) & c^{32}(\vec{k}) & c^{33}(\vec{k}) & x^{31}(\vec{k}) & x^{32}(\vec{k}) & x^{33}(\vec{k}) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Dessa forma, conseguimos encontrar as expressões para os 36 elementos da matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$

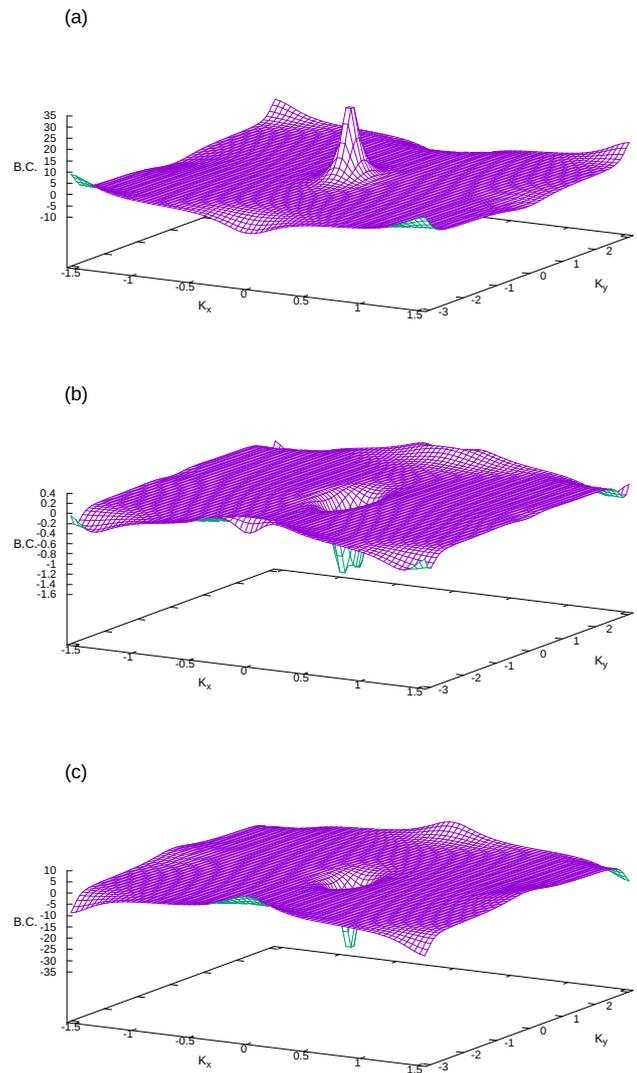


**Figura 5.2:** Curvaturas de Berry das bandas de energia (a)  $x$ , (b)  $y$  e (c)  $z$  dos triplons para o conjunto de parâmetros  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.20$  e  $B_z = 0.05$  do modelo (4.38).

(ver Sec. E.0.1 do Apêndice E) e calcular a curvatura de Berry (5.5) para cada banda  $x, y$  e  $z$ .

A Fig. 5.1 mostra as três curvaturas de Berry das dispersões  $x, y, z$  para  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.10$  e  $B_z = 0.05$ . Note que, para cada par  $(k_x, k_y)$  (restritos à primeira zona de Brillouin), temos um valor de  $\Omega_n(\vec{k})$ . A simetria da superfície associada à curvatura de Berry também é importante, pois essa propriedade permite compreender o valor do número de Chern encontrado para essas bandas. Veja que a simetria da curvatura é tal que ela assume valores positivos e negativos, que provavelmente se cancelarão na realização da integral (2.67) envolvida no cálculo do número de Chern. Note também que esse padrão é observado nas três curvaturas associadas às bandas  $x, y$  e  $z$ , não importando os valores de  $J_2$ ,  $d$  e  $B_z$ , como exemplificado nas Figs. 5.2 e 5.3.

O próximo passo agora é calcular o número de Chern de cada banda e verificar, final-



**Figura 5.3:** Curvaturas de Berry das bandas de energia (a)  $x$ , (b)  $y$  e (c)  $z$  dos triplons para o conjunto de parâmetros  $J_2 = 0.52$ ,  $d = 0.10$  e  $B_z = 0.05$  do modelo (4.38).

mente, se estes triplons são topológicos ou não, isto é, se possuem um número de Chern finito (topológicos ou não triviais) ou nulo (não topológicos ou triviais).

### 5.3 O número de Chern bosônico

Enfatizamos ao longo do trabalho a importância de criar um gap  $\Delta$  entre as bandas  $x, y, z$  dos triplons do nosso modelo, pois queríamos verificar se as excitações encontradas na fase VBS são topologicamente triviais ou não. Como discutido no início do trabalho, Sec. 2.2, a quantidade que responderá essa pergunta é o número de Chern bosônico (invariante topológico) [6, 7, 8, 9]. Esse invariante topológico é definido quando há um gap na estrutura de bandas de um sistema e, como indicado na Eq. (2.67), assume a

forma

$$C_n = \int_{BZ} \frac{dk_x dk_y}{2\pi} \Omega_n(\vec{k}), \quad (5.9)$$

em que  $BZ$  se refere à integração restrita à primeira zona de Brillouin (dimerizada) e  $\Omega_n(\vec{k})$  é a curvatura de Berry (5.5) para uma banda  $n$  específica.  $C_n$  assumirá valores inteiros ou nulo, contudo uma de suas propriedades, indicadas anteriormente na Eq. (2.68), é que

$$Ch = \sum_n C_n = 0, \quad (5.10)$$

ou seja, a soma dos números de Chern das bandas do sistema se anula.

O direcionamento do nosso trabalho envolve verificar se haverá ou não valores finitos para a condutividade Hall térmica destes triplons e se fatores relacionados à topologia dos triplons afetariam expressivamente este cálculo. Entretanto, existem inúmeros aspectos que podem ser investigados caso as excitações sejam topológicas, como, por exemplo, os estados de borda que podem surgir em determinados sistemas quando as excitações são não-triviais [9]. De qualquer modo, para o cálculo da  $\kappa_{xy}$  que será mostrado na seção seguinte, precisamos calcular as curvaturas de Berry e, com isso, podemos rapidamente verificar se os triplons da fase VBS são triviais ou não.

Utilizando métodos numéricos, conseguimos determinar os coeficientes de Bogoliubov (veja Sec. E.0.1 do Apêndice E) e determinar os números de Chern (5.9). Lembrando que uma série de cálculos foram realizados para diferentes valores dos parâmetros  $J_2$ ,  $d$  e  $B_z$ , dentro da região da estabilidade da fase VBS. As tabelas 5.1 e 5.2 abaixo mostram alguns valores numéricos para o número de Chern associados a  $J_2 = 0.48$  e  $0.52$ , respectivamente, e diferentes valores do parâmetro de DM  $d$ . Na tabela 5.1, nota-se que os números de Chern das bandas de energia dos triplons para  $d = 0.10$  são nulos enquanto, para  $d = 0.20$ , encontramos valores finitos, porém muito próximos de zero. Dessa forma, podemos concluir que não há indícios de que tais quantidades possam assumir valores inteiros e finitos. Para  $d = 0.20$ , nota-se que a soma dos números de Chern das três bandas é nula. Algo semelhante é observado na tabela 5.2. Portanto, concluímos que os triplons da fase VBS colunar do modelo de Heisenberg AFM  $J_1 - J_2$  na rede quadrada, acrescido

**Tabela 5.1:** Números de Chern das bandas de energia  $x$ ,  $y$  e  $z$  dos triplons da fase VBS colunar para  $J_2 = 0.48$  e  $B_z = 0.05$ .

$d$	Banda	Número de Chern
0.10	$x$	0
0.10	$y$	0
0.10	$z$	0
0.20	$x$	$-2.05 \times 10^{-4}$
0.20	$y$	$-2.07 \times 10^{-4}$
0.20	$z$	$+4.12 \times 10^{-4}$

**Tabela 5.2:** Números de Chern das bandas de energia  $x, y$  e  $z$  dos triplons da fase VBS colunar para  $J_2 = 0.52$  e  $B_z = 0.05$ .

$d$	Banda	Número de Chern
0.10	$x$	$-1 \times 10^{-6}$
0.10	$y$	$-8 \times 10^{-6}$
0.10	$z$	$+9 \times 10^{-6}$
0.20	$x$	$-1.049 \times 10^{-3}$
0.20	$y$	$-8.66 \times 10^{-4}$
0.20	$z$	$+1.915 \times 10^{-3}$

de um termo de interação Dzyaloshinskii-Moriya e na presença de um campo magnético externo na direção  $z$ , são excitações topologicamente triviais. Como dito anteriormente, podemos justificar esse fato observando a simetria das curvaturas de Berry mostradas nas Figs. 5.1, 5.2 e 5.3: nota-se que as curvaturas são nulas em grande parte da primeira zona de Brillouin e apresentam pequenas regiões positivas e negativas que, quando somadas em (5.9), resultam em números de Chern nulos. Trabalhos anteriores [44, 46, 47], que consideraram os efeitos da interação DM em AFMs em redes diferentes da rede quadrada e para fases estudadas distintas da fase VBS, encontraram excitações topologicamente não triviais, o que não foi o caso do presente trabalho.

Finalmente, deve-se mencionar que, utilizando apenas um campo magnético externo na direção  $z$ , obtivemos a quebra da tripla degenerescência das bandas de energia dos triplons, como mostrado nas Figs. 4.13 (a) e (b). Assim, poderíamos continuar a investigação sobre a natureza topológica das excitações sem a presença de um termo de Dzyaloshinskii-Moriya no hamiltoniano (3.1). Entretanto, como discutido nas Refs. [44, 45, 46, 47], a interação DM é muitas vezes responsável pela presença de excitações topologicamente não triviais e, assim, decidimos considerar o termo de DM ao longo do nosso estudo. Dito isso, podemos inferir que, caso realizássemos o mesmo procedimento para  $d = 0$ , o número de Chern das bandas continuariam sendo nulos. De fato, para  $d = 0$ , o procedimento matemático que utilizamos para encontrar os coeficientes de Bogoliubov (E.0.1) muda de forma significativa, pois o hamiltoniano (4.43) passa a apresentar vários termos nulos. Realizamos então cálculos para  $d \ll 1$ , da ordem de  $10^{-3}$ , e, como esperado, encontramos que as dispersões são aproximadamente iguais àquelas obtidas para  $d = 0$  em [Figs. 4.13 (a) e (b)]. Para o caso  $d \ll 1$ , é possível determinar as curvaturas de Berry e os números de Chern como descrito acima, e, como esperado, encontramos números de Chern nulos. Esse fato indica que, mesmo na ausência da interação DM, as excitações do estado fundamental VBS na rede quadrada são topologicamente não triviais.

## 5.4 Condutividade Hall térmica

Finalmente, podemos verificar se a condutividade Hall térmica (2.79) para os triplons (topologicamente triviais) da fase VBS colunar do AFM (4.38) na quadrada é finita.

A medida da condutividade Hall térmica é feita experimentalmente a partir do conhecimento da densidade de corrente de calor  $\vec{j}_Q$  e da variação de temperatura  $\Delta T$  transversal do material em análise. A Fig. 5.4 mostra o arranjo esquemático utilizado para a medida de  $\kappa_{xy}$ : que nesse caso, a potência fornecida pelo aquecedor colocado em uma das bordas da amostra é conhecida e, assim, a quantidade  $\vec{j}_Q$  é determinada, pois ela é a razão entre a potência fornecida pelo equipamento e a área da seção transversal da amostra. Em seguida, dividindo por  $\Delta T$ , temos o valor experimental de  $\kappa_{xy}$ .

Agora que entendemos melhor como a condutividade Hall térmica é medida, utilizaremos a expressão (2.79) para determinar teoricamente o valor de  $\kappa_{xy}$  para os triplons triviais,

$$\kappa_{xy} = -\frac{k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{\vec{k}} \sum_{n=1}^N [c_2(\rho^B(\varepsilon_{n\vec{k}}))] \Omega_n(\vec{k}), \quad (5.11)$$

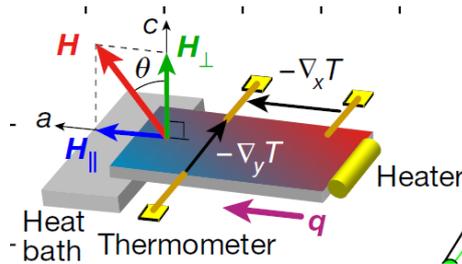
em que  $T$  é a temperatura do sistema,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $V$  é a área da primeira zona de Brillouin,  $\Omega_n(\vec{k})$  é a curvatura de Berry (5.5) da banda  $n$ ,  $\varepsilon_{n\vec{k}}$  é a energia dos triplons associados à banda  $n$  e número de onda  $\vec{k}$  (isto é, a dispersão  $\Omega_k^\alpha$  introduzida no capítulo anterior),  $\rho^B(\varepsilon_{n\vec{k}})$  é a distribuição de Bose-Einstein dada por

$$\rho^B(\varepsilon_{n\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{n\vec{k}}} - 1} \quad (5.12)$$

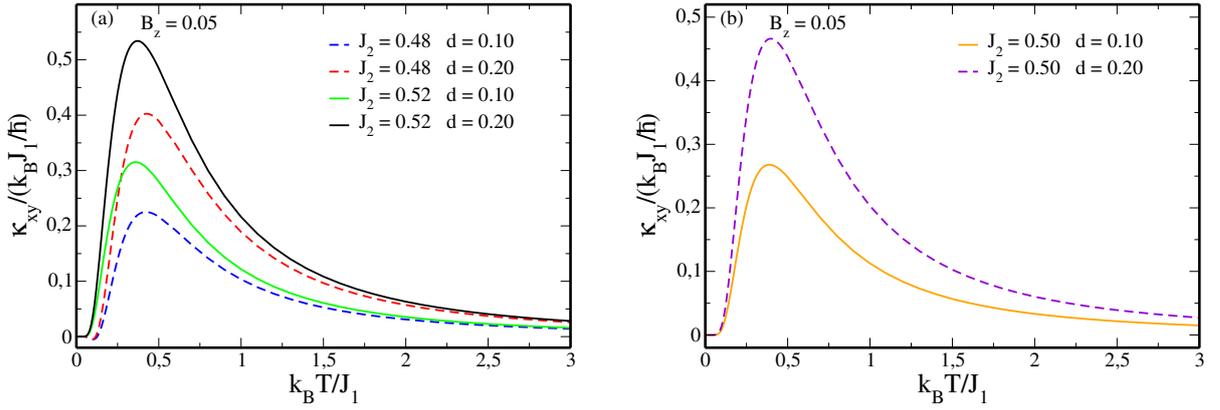
e  $c_2(x)$  é dada por

$$c_2(x) = \int_0^x dt \left( \ln \frac{1+t}{t} \right)^2 = (1+x) \left( \ln \frac{1+x}{x} \right)^2 - (\ln x)^2 - 2Li_2(-x), \quad (5.13)$$

sendo  $Li_2(x)$  a função polilogarítmica para  $n = 2$ . A partir da expressão (5.11), podemos extrair informações sobre a condutividade Hall térmica dos triplons da fase VBS colunar do AFM na rede quadrada.



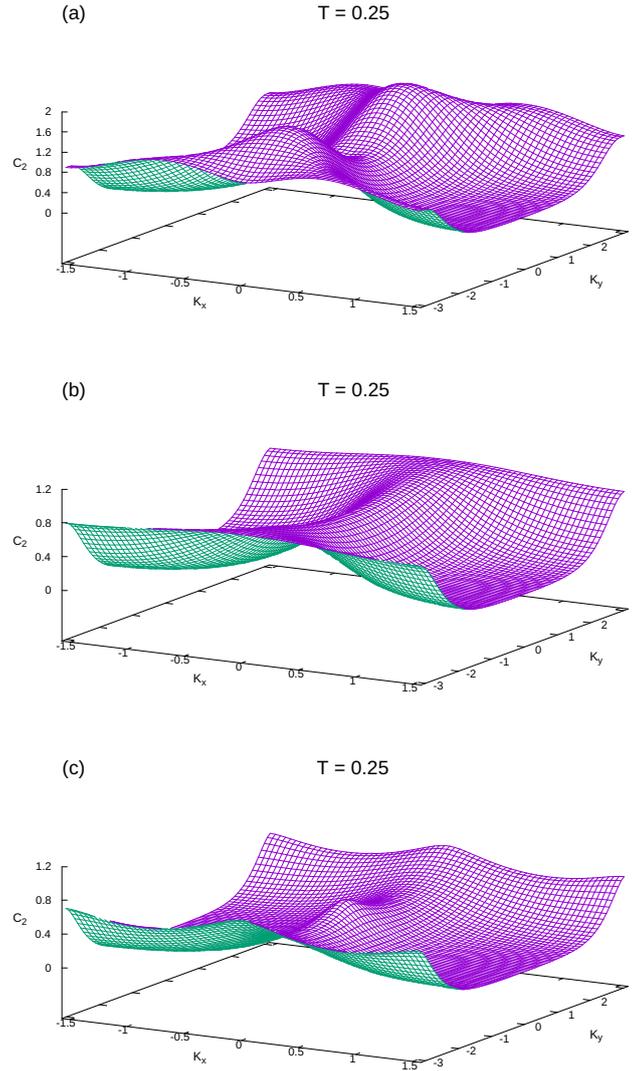
**Figura 5.4:** Representação esquemática do procedimento experimental utilizado para a medida de  $\kappa_{xy}$ . Figura retirada da Ref. [64].



**Figura 5.5:** Condutividade Hall térmica (5.11) para os triplons na fase VBS do AFM na rede quadrada (a) para  $J_2 = 0.48$  (linhas tracejadas) e  $J_2 = 0.52$  (linhas contínuas) e  $d = 0.10$  e  $0.20$  e (b) para  $J_2 = 0.50$  e  $d = 0.10$  e  $0.20$ . Em todos os casos, o campo magnético externo  $B_z = 0.05$ .

As Figs. 5.5 (a) e (b) mostram o comportamento da condutividade Hall térmica em termos da temperatura  $T$  (apesar de considerarmos  $J_1 = 1$ , reintroduzimos essa constante de troca nos gráficos para maior clareza). Nota-se que o comportamento qualitativo de  $\kappa_{xy}$  é o mesmo, independentemente dos valores de  $J_2$  e  $d$ . Para um valor fixo do parâmetro  $d$  da interação de DM, nota-se que o pico da condutividade Hall térmica aumenta conforme aumentamos o valor de  $J_2$ . Comportamento similar é observado para valores fixos de  $J_2$  e variação do parâmetro  $d$ . Todos os picos observados em  $\kappa_{xy}$  ocorrem na vizinhança de um mesmo valor de temperatura,  $k_B T / J_1 = 0.5$ . Interessante, para  $J_2 = 0.48$  [Fig. 5.5 (a)],  $\kappa_{xy}$  assume valores negativos na região de baixas temperaturas: nessa faixa de temperaturas, podemos entender que o transporte tem o sentido oposto. Esse comportamento não é observado para  $J_2 = 0.52$  e  $J_2 = 0.50$  [Fig. 5.5 (b)], que apresentam  $\kappa_{xy} = 0$  para baixas temperaturas  $T$ . Finalmente, é importante mencionar que as dispersões (veja Eqs. (4.33), (C.3), (C.4) e (C.5) para o caso com adição do campo magnético externo  $B_z$ ) dos triplons foram determinadas a temperatura  $T = 0$ : apesar da Fig. 5.5 mostrar o comportamento de  $\kappa_{xy}(T)$  para  $0 < k_B T / J_1 < 3$ , devemos, de fato, considerar apenas a região  $0 < k_B T / J_1 < \Delta / J_1$ , onde  $\Delta$  é a energia de *gap* para os triplons (veja as Figs. 4.11 e 4.12 (a)); o condensado de singletos está bem definido apenas nessa faixa de baixas temperaturas.

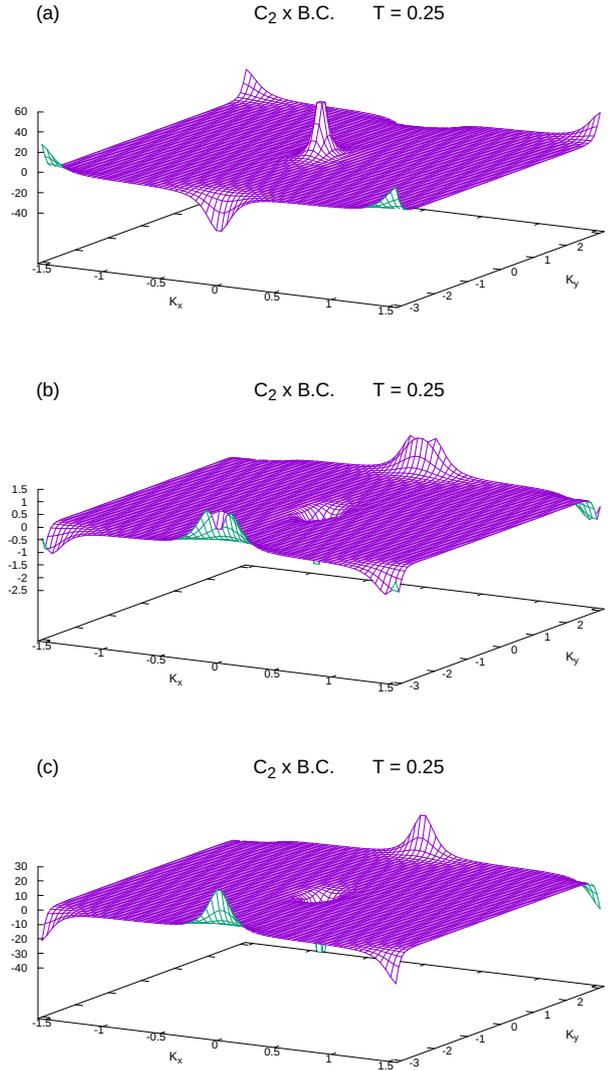
Apesar da integral da curvatura de Berry sob a primeira zona de Brillouin ser nula, a condutividade térmica Hall  $\kappa_{xy}(T)$  é não nula. Esse resultado está associado ao fato de que o integrando da Eq. (5.11) depende do produto da função  $c_2$  [Eq. (5.13)] pela curvatura de Berry. As Figs. 5.6 e 5.7 exemplificam, respectivamente, os comportamentos da função  $c_2(x)$  e do produto  $c_2(x)\Omega_n(\vec{k})$  para  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.20$ ,  $B_z = 0.05$ ,  $x = \rho^B(\epsilon_{n\vec{k}})$  [Eq. (5.12)] e  $T = 0.25$  com (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$  e (c)  $n = 3$  correspondendo às dispersões dos triplons  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente. Nota-se que as funções  $c_2$  possuem valores apenas positivos fazendo com que os pontos negativos das curvaturas de Berry tenham um peso



**Figura 5.6:** Função  $c_2(x)$  [Eq. (5.13)] para  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.20$ ,  $B_z = 0.05$ ,  $x = \rho^B(\epsilon_{n\vec{k}})$  [Eq. (5.12)] e  $T = 0.25$  com (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$  e (c)  $n = 3$  correspondendo as dispersões dos triplons  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente.

menor na realização do somatório contido em  $\kappa_{xy}$ . Veja em Fig. 5.7 que o produto de  $c_2$  com  $\Omega_n(\vec{k})$  para os pontos  $k_x = 1.5$ ,  $k_y = 0$  e  $k_x = -1.5$ ,  $k_y = 0$  as funções para os triplons  $x$ ,  $y$  e  $z$  são nulas, o que difere do próprio gráfico de  $\Omega_n(\vec{k})$  para os mesmos pontos [veja Fig. 5.2]. Por conta dos dois pontos citados acima, temos um  $\kappa_{xy}(T)$  finito e não nulo, como foi o caso do número de Chern.

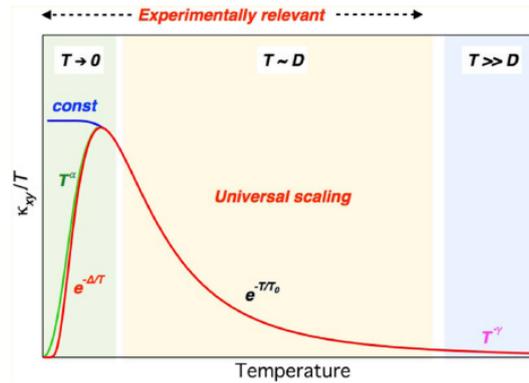
Como discutido na Ref. [65], é possível identificar três regiões distintas no comportamento de  $\kappa_{xy}$  em termos da temperatura: (i) Para  $T = 0$  até a saturação de  $\kappa_{xy}$ , temos uma lei de potência  $T^\alpha$  ou um comportamento termo ativado  $\exp(-\Delta/T)$  dependendo das diferentes propriedades espectrais das excitações subjacentes; (ii) para a região de decaimento, temos  $\kappa_{xy} \propto \exp(-T/T_0)$ , com  $T \sim D$ , em que  $D$  representa a energia característica das excitações e  $T_0$  representa a escala de decaimento do efeito Hall com o



**Figura 5.7:** Comportamento da função  $c_2(x)\Omega_n(\vec{k})$  para  $J_2 = 0.48$ ,  $d = 0.20$ ,  $B_z = 0.05$ ,  $x = \rho^B(\epsilon_{n\vec{k}})$  [Eq. (5.12)] e  $T = 0.25$  com (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$  e (c)  $n = 3$  correspondendo as dispersões dos tríplons  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente.

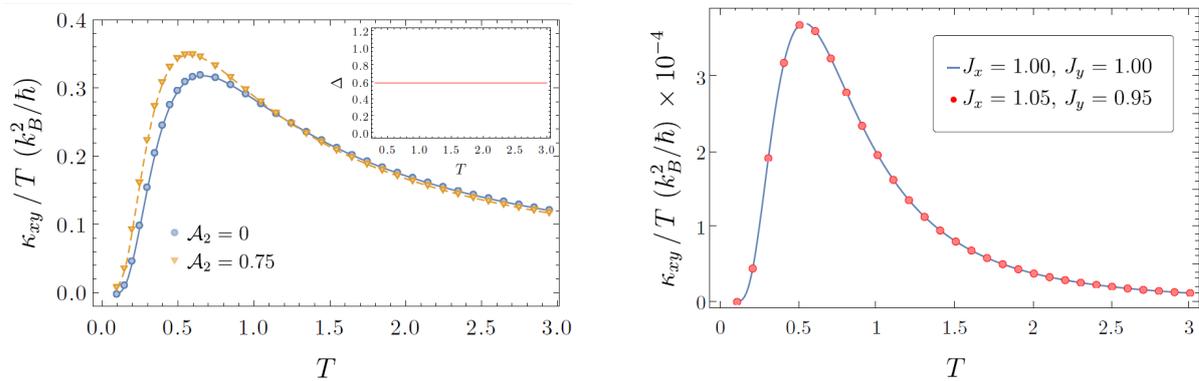
aumento da temperatura; (iii) para altas temperaturas,  $\kappa_{xy} \propto T^{-\gamma}$  com  $\gamma = 1$  para bósons e  $\gamma = 3$  para férmions. Além disso, os comportamentos de todos os gráficos são iguais com o aumento da temperatura  $T$ , ou seja,  $\kappa_{xy} \rightarrow 0$  [veja a Fig. 5.8].

Podemos notar então que  $\kappa_{xy}$  não é nulo mesmo para um sistema que apresenta triplons topologicamente triviais. Entretanto, o valor de  $\kappa_{xy}$  seria maior e mais suave na queda se as excitações fossem topologicamente não triviais, como mostrado na Ref. [11], em que são comparadas as condutividades para sistemas com excitações topologicamente triviais e não triviais. No entanto, na Ref. [11], o estudo do AFM na rede quadrada é feito considerando uma fase de líquido de spin como estado fundamental e utilizando os bósons de Schwinger. No artigo, os autores utilizam os mesmos vetores de DM que nós utilizamos, ou seja, do composto  $\text{YBaCu}_3\text{O}_6$ . Entretanto, no caso do líquido de spin, a



**Figura 5.8:** Comportamento experimental de  $\kappa_{xy}$  dividido em três regiões (figura retirada da Ref. [65]).

interação de DM destrói as excitações topológicas que já estavam presentes no sistema sem a interação de DM. A Fig. 5.9 mostra dois gráficos para  $\kappa_{xy}$  determinados na Ref. [11]: o painel da esquerda é o resultado da condutividade dos spinons topologicamente não triviais encontrados no sistema AFM na rede quadrada sem a utilização da interação de DM; veja que a condutividade nesse caso é muito maior quando comparada ao resultado mostrado no painel à direita, onde os spinons são topologicamente triviais.



**Figura 5.9:** Condutividade Hall térmica (5.11) para os spinons em uma fase de líquido de spin para um AFM na rede quadrada. O gráfico da esquerda mostra a condutividade Hall térmica para spinons topologicamente não triviais encontrados sem a interação de DM; o gráfico da direita mostra a condutividade Hall térmica para spinons topologicamente triviais encontrados na presença da interação DM e considerando os vetores DM do composto YBaCu<sub>3</sub>O<sub>6</sub> (retirado da Ref. [11]).

## Conclusões

Conseguimos por meio deste trabalho compreender inúmeras propriedades acerca da fase VBS de um sistema antiferromagnético na rede quadrada. Vimos que não há apenas uma maneira para a distribuição dos singletos na rede quadrada em um estado VBS, contudo consideramos no presente trabalho somente o arranjo colunar. Dentro desta distribuição, utilizando o formalismo dos operadores de ligação para descrever o sistema, em particular, procuramos caracterizar suas excitações elementares denominadas triplons, que estão associados aos três estados de tripleto. Além disso, vimos que esse sistema não apresenta modos de Goldstone, ou seja, nenhuma simetria é quebrada espontaneamente quando o estado fundamental VBS é formado. Dessa forma, os triplons são então caracterizados pela presença de uma energia de gap finita.

Vimos também que, mesmo considerando a interação spin-órbita via um termo de Dzyaloshinskii-Moriya incluído no modelo de Heisenberg original, não conseguimos quebrar completamente a degenerescência das três bandas de energia dos triplons. Esse fato nos levou a incluir um campo magnético externo no sistema. A partir disso, conseguimos verificar a natureza das excitações elementares e concluímos, por meio da análise das curvaturas de Berry das bandas de energia dos triplons, que a fase VBS do antiferromagneto na rede quadrada que estudamos apresenta triplons topologicamente triviais, isto é, os números de Chern associados às bandas de energia dos triplons são todos nulos. Restou verificar se teríamos uma condutividade Hall térmica finita, apesar dos triplons serem topologicamente triviais. Como visto no trabalho, verificamos que a condutividade Hall térmica é finita, porém menos intensa em valores absolutos caso tivéssemos um sistema topologicamente não trivial.

Vale ressaltar que, mesmo na ausência da interação DM e utilizando apenas um campo magnético externo, é possível quebrar a tripla degenerescência das bandas de energia dos triplons. Dessa forma, poderíamos ter realizado nossa investigação sobre a natureza topológica das excitações elementares de uma fase VBS na rede quadrada mesmo na ausência da interação Dzyaloshinskii-Moriya. Entretanto, como foi discutido no trabalho, a literatura mostra que a interação DM muitas vezes é a responsável por induzir excitações topologicamente não triviais e, por este motivo, decidimos manter a interação DM em nosso estudo.

Por fim, lembramos o leitor que o presente trabalho se apoiou em algumas aproximações numéricas e até mesmo analíticas. Por exemplo, para um estudo mais aprofundado do VBS na rede quadrada, seria interessante considerar interações entre os triplons, isto é, considerar os termos cúbicos e quárticos dos operadores  $t$ . Esses efeitos poderiam, em

princípio, acarretar mudanças significativas na condutividade Hall térmica. Veja também que o procedimento adotado neste trabalho para a investigação das características topológicas das excitações elementares é geral, ou seja, é possível utilizar esse procedimento para sistemas bosônicos realizados em redes de diversas geometrias.

# Referências Bibliográficas

- [1] Sachdev, S. Quantum magnetism and criticality. *Nature Physics* **4**, 173–185 (2008).
- [2] Lacroix, C., Mendels, P. & Mila, F. *Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory*, vol. 164 (Springer Science & Business Media, 2011).
- [3] Savary, L. & Balents, L. Quantum spin liquids: a review. *Reports on Progress in Physics* **80**, 016502 (2016).
- [4] Zhou, Y., Kanoda, K. & Ng, T.-K. Quantum spin liquid states. *Reviews of Modern Physics* **89**, 025003 (2017).
- [5] Romhányi, J., Penc, K. & Ganesh, R. Hall effect of triplons in a dimerized quantum magnet. *Nature communications* **6**, 1–6 (2015).
- [6] Kane, C. L. Topological band theory and the  $z_2$  invariant. In *Contemporary Concepts of Condensed Matter Science*, vol. 6, 3–34 (Elsevier, 2013).
- [7] Rachel, S. Interacting topological insulators: a review. *Reports on Progress in Physics* **81**, 116501 (2018).
- [8] Shankar, R. Topological insulators - a review. *arXiv preprint arXiv:1804.06471* (2018).
- [9] Shindou, R., Matsumoto, R., Murakami, S. & Ohe, J.-i. Topological chiral magnonic edge mode in a magnonic crystal. *Physical Review B* **87**, 174427 (2013).
- [10] Matsumoto, R., Shindou, R. & Murakami, S. Thermal hall effect of magnons in magnets with dipolar interaction. *Phys. Rev. B* **89**, 054420 (2014).
- [11] Samajdar, R., Chatterjee, S., Sachdev, S. & Scheurer, M. S. Thermal hall effect in square-lattice spin liquids: A schwinger boson mean-field study. *Phys. Rev. B* **99**, 165126 (2019).
- [12] Dzyaloshinsky, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of physics and chemistry of solids* **4**, 241–255 (1958).
- [13] Moriya, T. New mechanism of anisotropic superexchange interaction. *Physical Review Letters* **4**, 228 (1960).
- [14] Doretto, R. L. Plaquette valence-bond solid in the square-lattice  $J_1$ - $J_2$  antiferromagnet heisenberg model: A bond operator approach. *Phys. Rev. B* **89**, 104415 (2014).

- [15] Doretto, R. L. Mean-field theory of interacting triplons in a two-dimensional valence-bond solid: Stability and properties of many-triplon states. *Phys. Rev. B* **102**, 014415 (2020).
- [16] Gong, S.-S., Zhu, W., Sheng, D., Motrunich, O. I. & Fisher, M. P. Plaquette ordered phase and quantum phase diagram in the spin-1/2  $J_1$ - $J_2$  square heisenberg model. *Physical review letters* **113**, 027201 (2014).
- [17] Wang, L. & Sandvik, A. W. Critical level crossings and gapless spin liquid in the square-lattice spin-1/2  $J_1$ - $J_2$  heisenberg antiferromagnet. *Physical review letters* **121**, 107202 (2018).
- [18] Ferrari, F. & Becca, F. Gapless spin liquid and valence-bond solid in the  $J_1$ - $J_2$  heisenberg model on the square lattice: Insights from singlet and triplet excitations. *Physical Review B* **102**, 014417 (2020).
- [19] Nomura, Y. & Imada, M. Dirac-type nodal spin liquid revealed by refined quantum many-body solver using neural-network wave function, correlation ratio, and level spectroscopy. *Physical Review X* **11**, 031034 (2021).
- [20] Muzy, P., Salinas, S., Santana, A. & Tomé, T. Mario schönberg e a introdução do espaço de fock na física estatística clássica. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **27**, 447–462 (2005).
- [21] Sachdev, S. & Bhatt, R. Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum heisenberg antiferromagnets. *Physical Review B* **41**, 9323 (1990).
- [22] Sakurai, J. J. S. & Napolitano, J. J. *Modern Quantum Mechanics* (Pearson, 2014).
- [23] Kittel, C., McEuen, P. & McEuen, P. *Introduction to solid state physics*, vol. 8 (Wiley New York, 1996).
- [24] Chaikin, P. M., Lubensky, T. C. & Witten, T. A. *Principles of condensed matter physics*, vol. 10 (Cambridge university press Cambridge, 1995).
- [25] Cullity, B. D. & Graham, C. D. *Introduction to magnetic materials* (John Wiley & Sons, 2011).
- [26] Andrade, E. C. Transições de fases térmicas e teoria de campo médio. [https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5821732/mod\\_resource/content/1/mf.pdf](https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5821732/mod_resource/content/1/mf.pdf). Acessado em 13/02/2023.
- [27] Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. *Statistical Physics: Volume 5*, vol. 5 (Elsevier, 2013).

- [28] Chang, M.-C. & Niu, Q. Berry phase, hyperorbits, and the hofstadter spectrum: Semiclassical dynamics in magnetic bloch bands. *Physical Review B* **53**, 7010 (1996).
- [29] Berry, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45–57 (1984).
- [30] Brum, J. A. Estrutura de banda. [https://sites.ifi.unicamp.br/brum/files/2014/01/F888\\_JAB\\_1s2010\\_P3\\_cap8.pdf](https://sites.ifi.unicamp.br/brum/files/2014/01/F888_JAB_1s2010_P3_cap8.pdf). Acessado em 13/02/2023.
- [31] Katsura, H., Nagaosa, N. & Lee, P. A. Theory of the thermal hall effect in quantum magnets. *Physical review letters* **104**, 066403 (2010).
- [32] Onoda, S., Sugimoto, N. & Nagaosa, N. Quantum transport theory of anomalous electric, thermoelectric, and thermal hall effects in ferromagnets. *Physical review B* **77**, 165103 (2008).
- [33] Matsumoto, R. & Murakami, S. Theoretical prediction of a rotating magnon wave packet in ferromagnets. *Physical review letters* **106**, 197202 (2011).
- [34] Matsumoto, R. & Murakami, S. Rotational motion of magnons and the thermal hall effect. *Physical Review B* **84**, 184406 (2011).
- [35] Murakami, S. & Okamoto, A. Thermal hall effect of magnons. *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 011010 (2017).
- [36] Chang, M.-C. & Niu, Q. Berry phase, hyperorbits, and the hofstadter spectrum: Semiclassical dynamics in magnetic bloch bands. *Phys. Rev. B* **53**, 7010–7023 (1996).
- [37] Holstein, T. & Primakoff, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Physical Review* **58**, 1098 (1940).
- [38] Misguich, G. & Lhuillier, C. TWO-DIMENSIONAL QUANTUM ANTIFERROMAGNETS. In *Frustrated Spin Systems*, 229–306 (WORLD SCIENTIFIC, 2005). URL [https://doi.org/10.1142/2F9789812567819\\_0005](https://doi.org/10.1142/2F9789812567819_0005).
- [39] Henelius, P. & Sandvik, A. W. Sign problem in monte carlo simulations of frustrated quantum spin systems. *Physical Review B* **62**, 1102 (2000).
- [40] Merzbacher, E. *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, Inc., 1998).
- [41] Arfken, W. H. J., George B. & Harris, F. E. *Mathematical methods for physicists* (Elsevier Inc., 2013).

- [42] Nam, P. T., Napiórkowski, M. & Solovej, J. P. Diagonalization of bosonic quadratic hamiltonians by bogoliubov transformations. *Journal of Functional Analysis* **270**, 4340–4368 (2016).
- [43] Coldea, R. *et al.* Spin waves and electronic interactions in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . *Physical review letters* **86**, 5377 (2001).
- [44] Malki, M. & Schmidt, K. Magnetic chern bands and triplon hall effect in an extended shastry-sutherland model. *Physical Review B* **95**, 195137 (2017).
- [45] Joshi, D. G. & Schnyder, A. P. Topological quantum paramagnet in a quantum spin ladder. *Physical Review B* **96**, 220405 (2017).
- [46] McClarty, P. A. *et al.* Topological triplon modes and bound states in a shastry–sutherland magnet. *Nature Physics* **13**, 736–741 (2017).
- [47] Joshi, D. G. & Schnyder, A. P.  $\mathbb{Z}_2$  topological quantum paramagnet on a honeycomb bilayer. *Physical Review B* **100**, 020407 (2019).
- [48] Nawa, K. *et al.* Triplon band splitting and topologically protected edge states in the dimerized antiferromagnet. *Nature communications* **10**, 1–8 (2019).
- [49] Kim, S. K., Ochoa, H., Zarzuela, R. & Tserkovnyak, Y. Realization of the haldane-kane-mele model in a system of localized spins. *Physical review letters* **117**, 227201 (2016).
- [50] Owerre, S. Topological honeycomb magnon hall effect: A calculation of thermal hall conductivity of magnetic spin excitations. *Journal of Applied Physics* **120**, 043903 (2016).
- [51] Owerre, S. A first theoretical realization of honeycomb topological magnon insulator. *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 386001 (2016).
- [52] Joshi, D. G. Topological excitations in the ferromagnetic kitaev-heisenberg model. *Physical Review B* **98**, 060405 (2018).
- [53] Malki, M. & Uhrig, G. Topological magnon bands for magnonics. *Physical Review B* **99**, 174412 (2019).
- [54] Cheng, R., Okamoto, S. & Xiao, D. Spin nernst effect of magnons in collinear antiferromagnets. *Physical review letters* **117**, 217202 (2016).
- [55] Zyuzin, V. A. & Kovalev, A. A. Magnon spin nernst effect in antiferromagnets. *Physical review letters* **117**, 217203 (2016).

- [56] Laurell, P. & Fiete, G. A. Magnon thermal hall effect in kagome antiferromagnets with dzyaloshinskii-moriya interactions. *Physical Review B* **98**, 094419 (2018).
- [57] Kawano, M. & Hotta, C. Thermal hall effect and topological edge states in a square-lattice antiferromagnet. *Physical Review B* **99**, 054422 (2019).
- [58] Kitamine, N., Ochi, M. & Kuroki, K. Designing nickelate superconductors with  $d^8$  configuration exploiting mixed-anion strategy. *Phys. Rev. Res.* **2**, 042032 (2020).
- [59] Stilp, E. *et al.* Controlling the near-surface superfluid density in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  by photo-illumination. *Scientific reports* **4**, 1–6 (2014).
- [60] Coffey, D., Bedell, K. & Trugman, S. Effective spin hamiltonian for the CuO planes in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and metamagnetism. *Physical Review B* **42**, 6509 (1990).
- [61] Coffey, D., Rice, T. & Zhang, F. Dzyaloshinskii-moriya interaction in the cuprates. *Physical Review B* **44**, 10112 (1991).
- [62] Rybicki, D., Jurkutat, M., Reichardt, S., Kapusta, C. & Haase, J. Perspective on the phase diagram of cuprate high-temperature superconductors. *Nature communications* **7**, 11413 (2016).
- [63] Ideue, T. *et al.* Effect of lattice geometry on magnon hall effect in ferromagnetic insulators. *Physical Review B* **85**, 134411 (2012).
- [64] Kasahara, Y. *et al.* Majorana quantization and half-integer thermal quantum hall effect in a Kitaev spin liquid. *Nature* **559**, 227–231 (2018).
- [65] Yang, Y.-f., Zhang, G.-M. & Zhang, F.-C. Universal behavior of the thermal hall conductivity. *Phys. Rev. Lett.* **124**, 186602 (2020).
- [66] Colpa, J. Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **93**, 327–353 (1978).
- [67] Blaizot, J.-P. & Ripka, G. Quantum theory of finite systems, vol. 3 (1986).
- [68] McClarty, P. A. *et al.* Topological triplon modes and bound states in a Shastry–Sutherland magnet. *Nature Physics* **13**, 736–741 (2017).
- [69] Romhányi, J., Penc, K. & Ganesh, R. Hall effect of triplons in a dimerized quantum magnet. *Nature communications* **6**, 1–6 (2015).

## Apêndices

## Funções auxiliares do modelo $H_{12}$

Seguem abaixo as definições das funções  $\xi(\tau)$  do modelo (3.18),

$$\xi_2(\tau) = 2(J_1 - J_2)\delta_{\tau,2} - J_1\delta_{\tau,1} - J_2(\delta_{\tau,1+2} + \delta_{\tau,1-2}), \quad (\text{A.1})$$

$$\xi_3(\tau) = J_1\delta_{\tau,1} + J_2(\delta_{\tau,1+2} + \delta_{\tau,1-2}), \quad (\text{A.2})$$

$$\xi_4(\tau) = 2(J_1 + J_2)\delta_{\tau,2} + J_1\delta_{\tau,1} + J_2(\delta_{\tau,1+2} + \delta_{\tau,1-2}), \quad (\text{A.3})$$

onde  $\tau = 1$  e  $2$  correspondem aos vetores (3.3) e  $\delta_{\tau,\tau'}$  é a delta de Kronecker.

# Termos do hamiltoniano de Dzyaloshinskii-Moriya

Seguem abaixo os termos  $(\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_{i+2}^1)$  e  $(\mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+2}^2)$  contidos no modelo (4.5):

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_{i+2}^1) &= \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{4} (s_i^\dagger s_{i+2}^\dagger t_{i\beta} t_{i+2,\gamma} + h.c. \right. \\
&\quad \left. + s_i s_{i+2}^\dagger t_{i\beta}^\dagger t_{i+2,\gamma} + h.c.) \right] \hat{e}_\alpha \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{i}{4} \left[ (-s_i^\dagger t_{i\beta} - h.c.) \epsilon_{\gamma\mu\nu} t_{i+2,\mu}^\dagger t_{i+2,\nu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \epsilon_{\beta\mu\nu} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} (-s_{i+2}^\dagger t_{i+2,\gamma} - h.c.) \right] \right] \hat{e}_\alpha \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\beta\mu\nu} \epsilon_{\gamma\mu'\nu'} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} t_{i+2,\mu'}^\dagger t_{i+2,\nu'} \right] \hat{e}_\alpha,
\end{aligned} \tag{B.1}$$

e

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i^2 \times \mathbf{S}_{i+2}^2) &= \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{4} (s_i^\dagger s_{i+2}^\dagger t_{i\beta} t_{i+2,\gamma} + h.c. \right. \\
&\quad \left. + s_i s_{i+2}^\dagger t_{i\beta}^\dagger t_{i+2,\gamma} + h.c.) \right] \hat{e}_\alpha \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{i}{4} \left[ (s_i^\dagger t_{i\beta} + h.c.) \epsilon_{\gamma\mu\nu} t_{i+2,\mu}^\dagger t_{i+2,\nu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \epsilon_{\beta\mu\nu} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} (s_{i+2}^\dagger t_{i+2,\gamma} + h.c.) \right] \right] \hat{e}_\alpha \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\beta\mu\nu} \epsilon_{\gamma\mu'\nu'} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} t_{i+2,\mu'}^\dagger t_{i+2,\nu'} \right] \hat{e}_\alpha.
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Além disso, temos ainda as funções  $H_{DM}^3(1)$ ,  $H_{DM}^3(2)$ ,  $H_{DM}^4(1)$  e  $H_{DM}^4(2)$  para o modelo (4.5) que descrevem as componentes do hamiltoniano (4.8):

$$\begin{aligned}
H_{DM}^3(1) &= \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \sum_{i \in D} \frac{i \epsilon_{\alpha\beta\gamma}}{4} \left[ (s_i^\dagger t_{i\beta} + h.c.) \epsilon_{\gamma\mu\nu} t_{i+1,\mu}^\dagger t_{i+1,\nu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \epsilon_{\beta\mu\nu} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} (-s_{i+1}^\dagger t_{i+1,\gamma} - h.c.) \right] \right] \hat{e}_\alpha \cdot d\hat{e}_1,
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$H_{DM}^3(2) = 0 \cdot d\hat{e}_2, \tag{B.4}$$

$$H_{DM}^4(1) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \sum_{i \in D} -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\beta\mu\nu} \epsilon_{\gamma\mu'\nu'} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} t_{i+1,\mu'}^\dagger t_{i+1,\nu'} \right] \hat{e}_\alpha, \quad (\text{B.5})$$

e

$$H_{DM}^4(2) = \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \sum_{\beta,\gamma=1}^3 \sum_{i \in D} -\frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\beta\mu\nu} \epsilon_{\gamma\mu'\nu'} t_{i\mu}^\dagger t_{i\nu} t_{i+2,\mu'}^\dagger t_{i+2,\nu'} \right] \hat{e}_\alpha. \quad (\text{B.6})$$

# Detalhes da diagonalização do hamiltoniano bosônico

Nesta seção, mostraremos de forma sucinta o procedimento analítico utilizado para a diagonalização do hamiltoniano (4.22). Seguiremos o procedimento proposto nas Refs. [66, 67]. Uma vez que estamos diagonalizando um hamiltoniano bosônico  $\hat{H}_{\vec{k}}$  [Eq. (4.25)], precisamos inserir uma matriz do tipo  $\hat{I}_b$  de modo a diagonalizar a nova expressão dada por:

$$\hat{I}_b \hat{H}_{\vec{k}}, \quad (\text{C.1})$$

em que

$$\hat{I}_b = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

sendo  $\hat{I}$  a matriz identidade  $3 \times 3$ . Este tipo de problema tem diagonalização analítica, sendo que seus autovalores (positivos) são dados pelas expressões [14]:

$$\Omega_{\vec{k}}^1 = \left[ -\frac{1}{3}a_{2,\vec{k}} - \text{Re}(S_{\vec{k}}) - \sqrt{3}\text{Im}(S_{\vec{k}}) \right]^{1/2}, \quad (\text{C.3})$$

$$\Omega_{\vec{k}}^2 = \left[ -\frac{1}{3}a_{2,\vec{k}} - \text{Re}(S_{\vec{k}}) + \sqrt{3}\text{Im}(S_{\vec{k}}) \right]^{1/2}, \quad (\text{C.4})$$

$$\Omega_{\vec{k}}^3 = \left[ -\frac{1}{3}a_{2,\vec{k}} + 2\text{Re}(S_{\vec{k}}) \right]^{1/2}, \quad (\text{C.5})$$

em que,

$$S_{\vec{k}} = \left( R_{\vec{k}} + i\sqrt{D_{\vec{k}}} \right)^{1/3}, \quad (\text{C.6})$$

$$D_{\vec{k}} = -Q_{\vec{k}}^3 - R_{\vec{k}}^2, \quad (\text{C.7})$$

$$Q_{\vec{k}} = \frac{1}{9} \left( 3a_{1,\vec{k}} - a_{2,\vec{k}}^2 \right), \quad (\text{C.8})$$

e,

$$R_{\vec{k}} = \frac{1}{54} \left( 9a_{2,\vec{k}}a_{1,\vec{k}} - 27a_{0,\vec{k}} - 2a_{2,\vec{k}}^3 \right). \quad (\text{C.9})$$

Os coeficientes  $a_{i,\vec{k}}$  são dados por

$$a_{2,\vec{k}} = 3 (B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}) (B_{\vec{k}} + A_{\vec{k}}), \quad (\text{C.10})$$

$$a_{1,\vec{k}} = (B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}})^2 \left( -4 (D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2) + 3 (B_{\vec{k}} + A_{\vec{k}})^2 \right) \quad (\text{C.11})$$

e

$$a_{0,\vec{k}} = (B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}})^3 (B_{\vec{k}} + A_{\vec{k}}) \left( -4 (D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2) + (B_{\vec{k}} + A_{\vec{k}})^2 \right), \quad (\text{C.12})$$

na ausência do campo magnético externo  $B_z$  e

$$a_{2,\vec{k}} = 3B_{\vec{k}}^2 - 2B_z^2 - 3A_{\vec{k}}^2, \quad (\text{C.13})$$

$$a_{1,\vec{k}} = B_z^4 + (B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}})^2 \left( -4 (D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2) + 3 (B_{\vec{k}} + A_{\vec{k}})^2 \right) \quad (\text{C.14})$$

e

$$a_{0,\vec{k}} = (B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}) (B_{\vec{k}}^2 + B_z^2 - A_{\vec{k}}^2) (B_{\vec{k}} (B_{\vec{k}}^2 + B_z^2 - 4 (D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2)) + (B_{\vec{k}}^2 + B_z^2 + 4 (D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2)) A_{\vec{k}} - B_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^2 - A_{\vec{k}}^3), \quad (\text{C.15})$$

na presença do campo magnético externo  $B_z$ .

# Tratamento do termo bosônico linear

Para considerarmos o termo linear (4.6) proveniente da interação de Dzyaloshinskii-Moriya, seguimos o método discutido nas Refs. [68, 69].

Como discutido na Sec. 4.2, o termo local proveniente da interação DM é dado por

$$d [\mathbf{S}_i^1 \times \mathbf{S}_i^2] = d \left[ \sum_{\alpha=1}^3 \frac{i}{2} s_i^\dagger t_{i\alpha} + h.c. \right]. \quad (\text{D.1})$$

Incluindo o termo local proveniente do modelo (3.18), temos que

$$H_L = \sum_i -\frac{3}{4} J_1 s_i^\dagger s_i + \frac{1}{4} J_1 t_{ix}^\dagger t_{ix} + \frac{id}{2} s_i^\dagger t_{ix} - \frac{id}{2} t_{ix}^\dagger s_i, \quad (\text{D.2})$$

em que  $H_L$  significa o termo linear do hamiltoniano (4.20). Podemos ainda reescrevê-lo de forma matricial,

$$H_L = J_1 \sum_i \begin{pmatrix} s_i^\dagger & t_{ix}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{3}{4} & i\alpha \\ -i\alpha & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_i \\ t_{ix} \end{pmatrix} = J_1 \sum_i \Psi_i^\dagger H_i \Psi_i, \quad (\text{D.3})$$

em que a constante  $\alpha$  é definida como

$$\alpha = \frac{d}{2J_1}. \quad (\text{D.4})$$

Podemos diagonalizar  $H_L$  sem grandes problemas, obtendo

$$H_L = J_1 \sum_i \Psi_i^\dagger U^\dagger U H_i U^\dagger U \Psi_i, \quad (\text{D.5})$$

em que

$$U = \begin{pmatrix} \frac{\alpha\sqrt{2}}{(b^2-b)^{1/2}} & i\frac{1-b}{\sqrt{2}(b^2-b)^{1/2}} \\ i\frac{1-b}{(b^2-b)^{1/2}\sqrt{2}} & \frac{\alpha\sqrt{2}}{(b^2-b)^{1/2}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.6})$$

$$b = (1 + 4\alpha^2)^{1/2}, \quad (\text{D.7})$$

e

$$U \Psi_i = \tilde{\Psi}_i = \begin{pmatrix} \tilde{s}_i \\ \tilde{t}_{ix} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} s_i \\ t_{ix} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.8})$$

Ocorre que trabalhar com a expressão completa da matriz de transformação  $U$  é muito trabalhoso. Assim, vamos aproximar as expressões envolvendo  $b$  utilizando expansões até

ordem linear em  $\alpha$ , ou seja,

$$b^2 - b = 1 + 4\alpha^2 - (1 + 4\alpha^2)^{1/2} \approx 1 + 4\alpha^2 - (1 + 2\alpha^2) = 2\alpha^2, \quad (\text{D.9})$$

$$(b^2 - b)^{1/2} \approx \sqrt{2}\alpha, \quad (\text{D.10})$$

$$1 - b = 1 - (1 + 4\alpha^2)^{1/2} \approx 1 - (1 + 2\alpha^2) = -2\alpha^2. \quad (\text{D.11})$$

As expressões acima são válidas desde que  $\alpha \ll 1$ . Temos então a forma aproximada da matriz de transformação  $U$

$$U \approx \begin{pmatrix} 1 & -i\alpha \\ -i\alpha & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.12})$$

De acordo com a Eq. (D.8), os operadores  $s_i$  e  $t_{ix}$  em termos dos novos operadores  $\tilde{s}_i$ ,  $\tilde{s}_i^\dagger$ ,  $\tilde{t}_{ix}$  e  $\tilde{t}_{ix}^\dagger$  são escritos como

$$s_i = \tilde{s}_i + i\alpha\tilde{t}_{ix}, \quad (\text{D.13})$$

$$s_i^\dagger = \tilde{s}_i^\dagger - i\alpha\tilde{t}_{ix}^\dagger, \quad (\text{D.14})$$

$$t_{ix} = \tilde{t}_{ix} + i\alpha\tilde{s}_i, \quad (\text{D.15})$$

$$t_{ix}^\dagger = \tilde{t}_{ix}^\dagger - i\alpha\tilde{s}_i^\dagger. \quad (\text{D.16})$$

Devemos, agora, substituir estes novos operadores (D.13) - (D.16) nas expressões do hamiltoniano (4.20), que é dado por

$$H_{12+DM} = H_{12} + H_{DM}, \quad (\text{D.17})$$

em que  $H_{12}$  e  $H_{DM}$  dados pelas expressões (3.18) e (4.8), respectivamente. Entretanto, veja que, para o termo do hamiltoniano associado à interação DM, não há necessidade de calcular as correções, pois todas elas serão  $O(\alpha^2)$ , uma vez que qualquer termo deste hamiltoniano depende linearmente com parâmetro  $d$ : como discutido anteriormente, vamos desprezar termos  $O(\alpha^2)$ . Resta verificar as mudanças apenas nas componentes do

hamiltoniano  $H_{12}$  dadas pelas Eqs. (3.19) - (3.22), isto é

$$H_0 = -\frac{3}{4}J_1 \sum_i s_i^\dagger s_i, \quad (\text{D.18})$$

$$H_2 = \frac{J_1}{4} \sum_i t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} + \frac{1}{4} \sum_{i,\tau} \xi_2(\tau) (s_i s_{i+\tau}^\dagger t_{i\alpha}^\dagger t_{i+\tau,\alpha} + h.c. + s_i^\dagger s_{i+\tau}^\dagger t_{i\alpha} t_{i+\tau,\alpha} + h.c.), \quad (\text{D.19})$$

$$H_3 = \frac{i}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_{i,\tau} \xi_3(\tau) \left[ (s_i^\dagger t_{i\alpha} + t_{i\alpha}^\dagger s_i) t_{i+\tau,\beta}^\dagger t_{i+\tau,\gamma} - t_{i\beta}^\dagger t_{i\gamma} (s_{i+\tau}^\dagger t_{i+\tau,\alpha} + t_{i+\tau,\alpha}^\dagger s_{i+\tau}) \right], \quad (\text{D.20})$$

$$H_4 = -\frac{1}{4} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta'\gamma'} \sum_{i,\tau} \xi_4(\tau) t_{i\beta}^\dagger t_{i+\tau,\beta'}^\dagger t_{i+\tau,\gamma'} t_{i\gamma}, \quad (\text{D.21})$$

em que as funções  $\xi(\tau)$  são encontradas no Apêndice A.

Quando substituímos os novos operadores (D.13) - (D.16) na Eq. (D.2), encontramos

$$H_L = J_1 \sum_i -\frac{3}{4} \tilde{s}_i^\dagger \tilde{s}_i + \frac{1}{4} \tilde{t}_{ix}^\dagger \tilde{t}_{ix}, \quad (\text{D.22})$$

ou seja, não há correções em ordem linear em  $\alpha$ . Resultados similares são encontrados para os termos  $H_2$  e  $H_4$ . O único termo que fornece uma contribuição em ordem linear em  $\alpha$  é o termo  $H_3$ . Após a substituição das Eqs. (D.13) - (D.16) no hamiltoniano (D.20), encontramos os seguintes termos em ordem quadrática em  $t$ , que são considerados na aproximação harmônica:

$$\begin{aligned} H_3 = & \frac{1}{4} i(-i\alpha) \epsilon_{x\beta\gamma} \sum_{i,\tau} \xi_3(\tau) (\tilde{s}_i^\dagger \tilde{s}_{i+\tau}^\dagger \tilde{t}_{i,\gamma} \tilde{t}_{i+\tau,\beta} - \tilde{s}_i \tilde{s}_{i+\tau} \tilde{t}_{i,\beta}^\dagger \tilde{t}_{i+\tau,\gamma} \\ & + \tilde{s}_i \tilde{s}_{i+\tau}^\dagger \tilde{t}_{i,\gamma}^\dagger \tilde{t}_{i+\tau,\beta} - \tilde{s}_i^\dagger \tilde{s}_{i+\tau} \tilde{t}_{i,\beta} \tilde{t}_{i+\tau,\gamma}^\dagger - \tilde{s}_{i+\tau}^\dagger \tilde{s}_i \tilde{t}_{i+\tau,\gamma} \tilde{t}_{i,\beta} + \tilde{s}_{i+\tau} \tilde{s}_i \tilde{t}_{i+\tau,\beta}^\dagger \tilde{t}_{i,\gamma}^\dagger \\ & - \tilde{s}_{i+\tau} \tilde{s}_i^\dagger \tilde{t}_{i+\tau,\gamma}^\dagger \tilde{t}_{i,\beta} + \tilde{s}_{i+\tau}^\dagger \tilde{s}_i \tilde{t}_{i+\tau,\beta} \tilde{t}_{i,\gamma}^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Quando realizamos a mudança para o espaço de momento  $\vec{k}$  e fazemos todas as devidas considerações e aproximações que foram comentadas ao longo do trabalho, temos que  $H_3$  assume a forma

$$\begin{aligned} H_3(\vec{k}) = & \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (-i\alpha) \sum_{\tau} \xi_3(\tau) \sin(\vec{k} \cdot \tau) N_0 (t_{ky}^\dagger t_{kz} - t_{-kz} t_{-ky}^\dagger - t_{kz}^\dagger t_{ky} + t_{-ky} t_{-kz}^\dagger \\ & + t_{-ky} t_{kz} - t_{kz}^\dagger t_{-ky}^\dagger - t_{-kz} t_{ky} + t_{ky}^\dagger t_{-kz}^\dagger), \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

que pode, portanto, ser combinada com a Eq. (4.16), onde foi introduzida a função  $D_{\vec{k}}$  proveniente da interação DM. Sendo assim, para considerar a correção linear em  $\alpha$ ,  $D_{\vec{k}}$  se

torna

$$\begin{aligned}
 D_{\vec{k}} &= \frac{dN_0 \sin(2k_x)}{2} \rightarrow \frac{dN_0 \sin(2k_x)}{2} \\
 &+ \frac{dN_0}{2} [\sin(2k_x) + J_2(\sin(2k_x + k_y) + \sin(2k_x - k_y))].
 \end{aligned}
 \tag{D.25}$$

# Matriz do hamiltoniano de Dzyaloshinskii-Moriya com adiç3o do campo magn3tico externo $\vec{B}$

Segue abaixo a matriz completa  $\hat{H}'_{\vec{k}}$  que descreve o modelo (4.38). A matriz  $\hat{H}'_{\vec{k}}$  3 6  $\times$  6 e possui elementos  $H_{\vec{k}}^{ab}$  dados por:

$$H_{\vec{k}}^{11} = H_{\vec{k}}^{22} = H_{\vec{k}}^{33} = H_{\vec{k}}^{44} = H_{\vec{k}}^{55} = H_{\vec{k}}^{66} = A_{\vec{k}}, \quad (\text{E.1})$$

$$H_{\vec{k}}^{14} = H_{\vec{k}}^{25} = H_{\vec{k}}^{36} = H_{\vec{k}}^{41} = H_{\vec{k}}^{52} = H_{\vec{k}}^{63} = B_{\vec{k}}, \quad (\text{E.2})$$

$$H_{\vec{k}}^{15} = H_{\vec{k}}^{24} = H_{\vec{k}}^{42} = H_{\vec{k}}^{51} = 0, \quad (\text{E.3})$$

$$H_{\vec{k}}^{12} = H_{\vec{k}}^{54} = -iB_z, \quad (\text{E.4})$$

$$H_{\vec{k}}^{21} = H_{\vec{k}}^{45} = iB_z,$$

$$H_{\vec{k}}^{16} = H_{\vec{k}}^{43} = iC_{\vec{k}}, \quad (\text{E.5})$$

$$H_{\vec{k}}^{34} = H_{\vec{k}}^{61} = -iC_{\vec{k}},$$

$$H_{\vec{k}}^{35} = H_{\vec{k}}^{62} = iD_{\vec{k}}, \quad (\text{E.6})$$

$$H_{\vec{k}}^{26} = H_{\vec{k}}^{53} = -iD_{\vec{k}},$$

$$H_{\vec{k}}^{13} = -H_{\vec{k}}^{31} = i(C_{\vec{k}} + B_y), \quad (\text{E.7})$$

$$H_{\vec{k}}^{46} = -H_{\vec{k}}^{64} = i(C_{\vec{k}} - B_y),$$

e

$$H_{\vec{k}}^{23} = -H_{\vec{k}}^{32} = -i(D_{\vec{k}} + B_x), \quad (\text{E.8})$$

$$H_{\vec{k}}^{56} = -H_{\vec{k}}^{65} = -i(D_{\vec{k}} - B_x).$$

## E.0.1 Coeficientes de Bogoliubov

Para calcularmos a curvatura de Berry das bandas dos triplons, precisamos primeiramente calcular a matriz  $\hat{T}_{\vec{k}}$

$$\hat{T}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{U}_{\vec{k}} & \hat{C}_{\vec{k}} \\ \hat{V}_{\vec{k}} & \hat{X}_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.9})$$

em que as matrizes  $\hat{U}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{C}_{\vec{k}}$ ,  $\hat{V}_{\vec{k}}$  e  $\hat{X}_{\vec{k}}$  são do tipo  $3 \times 3$  e contém elementos rotulados por  $u^{ab}(\vec{k})$ ,  $c^{ab}(\vec{k})$ ,  $v^{ab}(\vec{k})$  e  $x^{ab}(\vec{k})$ , respectivamente, como exemplicado na matriz  $\hat{U}_{\vec{k}}$  abaixo

$$\hat{U}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} u^{11}(\vec{k}) & u^{12}(\vec{k}) & u^{13}(\vec{k}) \\ u^{21}(\vec{k}) & u^{22}(\vec{k}) & u^{23}(\vec{k}) \\ u^{31}(\vec{k}) & u^{32}(\vec{k}) & u^{33}(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (\text{E.10})$$

Primeiramente, é conveniente definir um conjunto parâmetros:

$$\begin{aligned} L_1 &= B_{\vec{k}}^2 + B_z^2 - A_{\vec{k}}^2, \\ L_2 &= D_{\vec{k}}^2 + C_{\vec{k}}^2, \\ L_3 &= B_{\vec{k}}^2 - B_z^2, \\ L_4 &= iB_z D_{\vec{k}}, \\ L_5 &= iB_z C_{\vec{k}}, \\ L_6 &= B_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

$$\begin{aligned} O_1 &= (-2B_{\vec{k}}L_2 + (L_1 + A_{\vec{k}}^2 + 2L_2)A_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}^3), \\ O_2 &= (-B_{\vec{k}}L_2 + (L_3 + L_2)A_{\vec{k}} - A_{\vec{k}}^3), \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

$$\begin{aligned} R_x &= -A_{\vec{k}} + \Omega_{\vec{k}}^x, \\ S_x &= A_{\vec{k}} + \Omega_{\vec{k}}^x, \\ F_x &= L_1 O_1 - L_1^2 \Omega_{\vec{k}}^x + 2O_2 (\Omega_{\vec{k}}^x)^2 + 2(-L_3 + A_{\vec{k}}^2) (\Omega_{\vec{k}}^x)^3 + A_{\vec{k}} (\Omega_{\vec{k}}^x)^4 - (\Omega_{\vec{k}}^x)^5, \\ G_x &= L_1 O_1 + L_1^2 \Omega_{\vec{k}}^x + 2O_2 (\Omega_{\vec{k}}^x)^2 + 2(L_3 - A_{\vec{k}}^2) (\Omega_{\vec{k}}^x)^3 + A_{\vec{k}} (\Omega_{\vec{k}}^x)^4 + (\Omega_{\vec{k}}^x)^5, \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

com  $x = 1, 2, 3$  e  $\Omega_{\vec{k}}^x$  sendo as expressões (C.3), (C.4) e (C.5) encontradas no Apêndice C. Além disso, é interessante introduzir um conjunto de funções auxiliares.

$$\begin{aligned} Au_{1,4,7} &= i(B_{\vec{k}} + R_x)(B_{\vec{k}}^3 C_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^2(L_4 - C_{\vec{k}} S_x) + (L_4 + C_{\vec{k}} R_x)(B_z^2 - S_x^2) \\ &\quad + B_{\vec{k}}(B_z^2 C_{\vec{k}} + 2L_4 \Omega_{\vec{k}}^x + C_{\vec{k}} R_x S_x))/F_x, \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

$$\begin{aligned} Au_{2,5,8} &= (-iL_6(D_{\vec{k}}L_6 - L_5)L_1 - B_z(2B_{\vec{k}}L_4 + 3B_{\vec{k}}^2C_{\vec{k}} + B_z^2C_{\vec{k}} - 2L_4A_{\vec{k}} \\ &\quad - 4B_{\vec{k}}C_{\vec{k}}A_{\vec{k}} + C_{\vec{k}}A_{\vec{k}}^2)\Omega_{\vec{k}}^x + (-iB_z^2D_{\vec{k}} + 2iD_{\vec{k}}L_6A_{\vec{k}} - B_zC_{\vec{k}}L_6)(\Omega_{\vec{k}}^x)^2 \\ &\quad + B_zC_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{k}}^x)^3 + iD_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{k}}^x)^4)/F_x, \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

$$\begin{aligned} Au_{3,6,9} &= (-L_1(B_{\vec{k}}^2 + 2L_2A_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}(B_z^2 - 2L_2 - A_{\vec{k}}^2)) + 2(-B_{\vec{k}}^3 - L_2A_{\vec{k}} \\ &\quad + B_{\vec{k}}(B_z^2 + A_{\vec{k}}^2 + L_2))(\Omega_{\vec{k}}^x)^2 - B_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{k}}^x)^4)/F_x, \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

seguido das funções  $A_v$

$$Av_{1,4,7} = i(B_{\vec{k}} + R_x)(B_{\vec{k}}^3 C_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^2(-L_4 + C_{\vec{k}} R_x) - i(B_z - R_x)(B_z + R_x)(B_z D_{\vec{k}} - iC_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}(B_z^2 C_{\vec{k}} + 2L_4 \Omega_{\vec{k}}^x + C_{\vec{k}} R_x S_x))/F_x, \quad (\text{E.17})$$

$$Av_{2,5,8} = -i(B_{\vec{k}} + R_x)(B_{\vec{k}}^3 D_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^2(L_5 + D_{\vec{k}} R_x) + i(B_z - R_x)(B_z + R_x)(B_z C_{\vec{k}} + iD_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}(B_z^2 D_{\vec{k}} - 2L_5 \Omega_{\vec{k}}^x + D_{\vec{k}} R_x S_x))/F_x, \quad (\text{E.18})$$

$A_c$

$$Ac_{1,4,7} = (iB_{\vec{k}}^4 C_{\vec{k}} - B_{\vec{k}}^3(B_z D_{\vec{k}} + 2iC_{\vec{k}} A_{\vec{k}}) + (B_z - R_x)(B_z + R_x)S_x(B_z D_{\vec{k}} + iC_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}^2 B_z(L_5 + D_{\vec{k}}(A_{\vec{k}} + 3\Omega_{\vec{k}}^x)) + B_{\vec{k}}(-B_z^3 D_{\vec{k}} - 2iB_z^2 C_{\vec{k}} S_x + 2iC_{\vec{k}} A_{\vec{k}}(-R_x)S_x + B_z D_{\vec{k}}(A_{\vec{k}}^2 - 4A_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}}^x - (\Omega_{\vec{k}}^x)^2)))/G_x, \quad (\text{E.19})$$

$$Ac_{2,5,8} = (-iB_{\vec{k}}^4 D_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^3(-B_z C_{\vec{k}} + 2iD_{\vec{k}} A_{\vec{k}}) + (B_z - R_x)(B_z + R_x)S_x(B_z C_{\vec{k}} - iD_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}^2 B_z(-L_4 + C_{\vec{k}}(A_{\vec{k}} + 3\Omega_{\vec{k}}^x)) + B_{\vec{k}}(-B_z^3 C_{\vec{k}} + 2iB_z^2 D_{\vec{k}} S_x - 2iD_{\vec{k}} A_{\vec{k}}(-R_x)S_x + B_z C_{\vec{k}}(A_{\vec{k}}^2 - 4A_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}}^x - (\Omega_{\vec{k}}^x)^2)))/G_x, \quad (\text{E.20})$$

$$Ac_{3,6,9} = (-L_1(B_{\vec{k}}^3 + 2L_2 A_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}(B_z^2 - 2L_2 - A_{\vec{k}}^2)) + 2(-B_{\vec{k}}^3 - L_2 A_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}(B_z^2 + A_{\vec{k}}^2 + L_2))(\Omega_{\vec{k}}^x)^2 - B_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{k}}^x)^4)/G_x, \quad (\text{E.21})$$

e finalmente  $A_x$

$$Ax_{1,4,7} = i(B_{\vec{k}} - S_x)(B_{\vec{k}}^3 C_{\vec{k}} + (B_z - S_x)(B_z + S_x)(-L_4 + C_{\vec{k}} R_x) + B_{\vec{k}}^2(-L_4 - C_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}(B_z^2 C_{\vec{k}} - 2L_4 \Omega_{\vec{k}}^x + C_{\vec{k}} R_x S_x))/G_x, \quad (\text{E.22})$$

$$Ax_{2,5,8} = -i(B_{\vec{k}} - S_x)(B_{\vec{k}}^3 D_{\vec{k}} + (B_z - S_x)(B_z + S_x)(L_5 + D_{\vec{k}} R_x) + B_{\vec{k}}^2(L_5 - D_{\vec{k}} S_x) + B_{\vec{k}}(B_z^2 D_{\vec{k}} + 2L_5 \Omega_{\vec{k}}^x + D_{\vec{k}} R_x S_x))/G_x. \quad (\text{E.23})$$

Podemos, portanto, escrever os coeficientes de Bogoliubov da transformação canônica. Os coeficientes  $v^{ab}(\vec{k})$  são escritos como

$$v^{31}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Au_1|^2 - |Av_1|^2 + |Au_2|^2 - |Av_2|^2 - 1 + |Au_3|^2)} \right]}, \quad (\text{E.24})$$

$$v^{32}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Au_4|^2 - |Av_4|^2 + |Au_5|^2 - |Av_5|^2 - 1 + |Au_6|^2)} \right]}, \quad (\text{E.25})$$

$$v^{33}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Au_7|^2 - |Av_7|^2 + |Au_8|^2 - |Av_8|^2 - 1 + |Au_9|^2)} \right]}, \quad (\text{E.26})$$

$$\begin{aligned} v^{11}(\vec{k}) &= v^{31}(\vec{k})Av_1; & v^{21}(\vec{k}) &= v^{31}(\vec{k})Av_2; \\ v^{12}(\vec{k}) &= v^{32}(\vec{k})Av_4; & v^{22}(\vec{k}) &= v^{32}(\vec{k})Av_5; \\ v^{13}(\vec{k}) &= v^{33}(\vec{k})Av_7; & v^{23}(\vec{k}) &= v^{33}(\vec{k})Av_8; \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

seguido pelos coeficientes  $u^{ab}(\vec{k})$

$$\begin{aligned} u^{11}(\vec{k}) &= v^{31}(\vec{k})Au_1; & u^{21}(\vec{k}) &= v^{31}(\vec{k})Au_2; & u^{31}(\vec{k}) &= v^{31}(\vec{k})Au_3; \\ u^{12}(\vec{k}) &= v^{32}(\vec{k})Au_4; & u^{22}(\vec{k}) &= v^{32}(\vec{k})Au_5; & u^{32}(\vec{k}) &= v^{32}(\vec{k})Au_6; \\ u^{13}(\vec{k}) &= v^{33}(\vec{k})Au_7; & u^{23}(\vec{k}) &= v^{33}(\vec{k})Au_8; & u^{33}(\vec{k}) &= v^{33}(\vec{k})Au_9; \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

Da mesma forma, encontramos os coeficientes  $x^{ab}(\vec{k})$

$$x^{31}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Ax_1|^2 - |Ac_1|^2 + |Ax_2|^2 - |Ac_2|^2 + 1 - |Ac_3|^2)} \right]} \quad (\text{E.29})$$

$$x^{32}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Ax_4|^2 - |Ac_4|^2 + |Ax_5|^2 - |Ac_5|^2 + 1 - |Ac_6|^2)} \right]} \quad (\text{E.30})$$

$$x^{33}(\vec{k}) = \sqrt{\left[ \frac{1}{(|Ax_7|^2 - |Ac_7|^2 + |Ax_8|^2 - |Ac_8|^2 + 1 - |Ac_9|^2)} \right]} \quad (\text{E.31})$$

$$\begin{aligned} x^{11}(\vec{k}) &= x^{31}(\vec{k})Ax_1; & x^{21}(\vec{k}) &= x^{31}(\vec{k})Ax_2; \\ x^{12}(\vec{k}) &= x^{32}(\vec{k})Ax_4; & x^{22}(\vec{k}) &= x^{32}(\vec{k})Ax_5; \\ x^{13}(\vec{k}) &= x^{33}(\vec{k})Ax_7; & x^{23}(\vec{k}) &= x^{33}(\vec{k})Ax_8; \end{aligned} \quad (\text{E.32})$$

e  $c^{ab}(\vec{k})$

$$\begin{aligned} c^{11}(\vec{k}) &= x^{31}(\vec{k})Ac_1; & c^{21}(\vec{k}) &= x^{31}(\vec{k})Ac_2; & c^{31}(\vec{k}) &= x^{31}(\vec{k})Ac_3; \\ c^{12}(\vec{k}) &= x^{32}(\vec{k})Ac_4; & c^{22}(\vec{k}) &= x^{32}(\vec{k})Ac_5; & c^{32}(\vec{k}) &= x^{32}(\vec{k})Ac_6; \\ c^{13}(\vec{k}) &= x^{33}(\vec{k})Ac_7; & c^{23}(\vec{k}) &= x^{33}(\vec{k})Ac_8; & c^{33}(\vec{k}) &= x^{33}(\vec{k})Ac_9; \end{aligned} \quad (\text{E.33})$$