


MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO PARA UM CRISTAL SEMI-INFINITO

CARLOS ANTONIO QUEIROZ

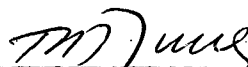
ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

"MESTRE EM CIÊNCIAS"

ESPECIALIDADE EM FÍSICO-QUÍMICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO.




PROF. WAGNER FIGUEIREDO, Dr.
ORIENTADOR



PROF. ROSENDO AUGUSTO YUNES, Dr.
COORDENADOR

BANCA EXAMINADORA:



PROF. WAGNER FIGUEIREDO, Dr.



PROF. VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS, Dr.



PROF^a SILVIA SELZER, Dr^a

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

MODELO DE HEISENBERG COM ANISOTROPIA UNIAXIAL DE ÍON ÚNICO NUM
CRISTAL SEMI-INFINITO.

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA OBTE
ÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS.

CARLOS ANTONIO QUEIROZ

FLORIANÓPOLIS
SANTA CATARINA - BRASIL
NOVEMBRO - 1985

Aos meus filhos Jonathan ,
Franklin e Daniel, e a Lia.

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Santa Catarina,

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico,

Ao Departamento de Física da UFSC,

À Secretaria de Educação do Estado de Santa Catarina, e em especial aos funcionários da UNAP,

Ao professor Wagner Figueiredo pelo seu dedicado trabalho de orientação,

À Maria da Graça Hoeller e Jadir Carminatti,

Ao José Cupertino da Silva Netto,

Ao Elpídio Manoel Corrêia,

À Silvia Selzer e Noberto Majlis pelas valiosas discussões

Aos funcionários do NPD/UFSC e ao acadêmico Paulo R. Costa pela colaboração no trabalho de computação,

Aos colegas do Curso de Pós-Graduação em Físico-Química da UFSC,

Aos professores do Curso de Pós-Graduação em Físico-Química da UFSC e a todos que colaboraram neste trabalho.

R E S U M O

Neste trabalho consideramos um modelo de Heisenberg semi-infinito com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples. Distinguimos a superfície livre dos demais planos de íons magnéticos, tomando-se uma anisotropia uniaxial de íon único na superfície (D_s) diferente da anisotropia nos outros planos (D). Utilizando a técnica das funções de Green determinamos a variação da magnetização por plano com a temperatura e a relação de dispersão dos magnons para diversos valores da temperatura e da razão D_s/D . Em particular, o valor crítico dessa razão é determinado. Acima desta razão crítica, é possível de se ter o plano da superfície ferromagnética, enquanto que os outros planos já se encontram na fase paramagnética, ou seja, a temperatura crítica de superfície torna-se maior que a temperatura de volume.

A B S T R A C T

In this work we consider a semi-infinite Heisenberg model with exchange interactions between nearest and next-nearest neighbors in a simple cubic lattice. We distinguish the free surface from the other layers of magnetic ions, by choosing a single ion uniaxial anisotropy in the surface (D_s) different from the anisotropy in the other layers (D). Using the Green function formalism, we determined the behavior of magnetization as a function of the temperature for each layer, as well as the spectrum of localized magnons for several values of ratio D_s/D for surface magnetization. Above this critical ratio, we can have a ferromagnetic surface layer while the other layers are already in the paramagnetic phase. In this situation the critical temperature of surface becomes larger than the critical temperature of the bulk.

S U M Á R I O

	PÁG.
Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de Figuras	ix
CAPÍTULO 1 - Introdução	01
CAPÍTULO 2 - Funções de Bloch para o Sistema Semi-Infinito.	04
2.1 - Introdução	04
2.2 - Funções de Bloch para uma superfície livre	05
2.3 - Estados Eletrônicos Superficiais	07
CAPÍTULO 3 - Funções de Green para um Cristal Ferromagnético Infinito	12
3.1 - Introdução	12
3.2 - Método das Funções de Green.	12
3.3 - Aplicação das Funções de Green para um Cristal Ferromagnético.	19
CAPÍTULO 4 - Aplicação do Método das Funções de Green para um Sistema Ferromagnético Semi-Infinito	34
4.1 - Introdução	34
4.2 - Formalismo das Funções de Green para o Sistema Semi-Infinito	36
4.3 - Cálculo da Magnetização Superficial.	43
4.4 - Propriedades das Funções de Green.	59
4.5 - Interpretação do parâmetro ξ	62
CAPÍTULO 5 - Efeitos da Anisotropia Uniaxial de Ion Único na Magnetização e nas Ondas de Spin num Cristal Ferromagnético Semi-Infinito	72
5.1 - Introdução	72
5.2 - Magnetização Superficial Acima da Temperatura Crítica de Volume (T_V^C)	73

CAPÍTULO 6 - Conclusões	88
APENDICE A - Pontos Especiais	91
BIBLIOGRAFIA	96

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

	PÁG.
FIGURA 1 - Secção da Estrutura de Banda de uma Rede Linear de Parâmetro \underline{a}	10
FIGURA 2 - Representação gráfica da função $\theta(x)$	15
FIGURA 3 - Magnetização \mathcal{G}_v , em função de τ , para alguns valores de ξ_v . $S = 1/2$, $dv = 0.0$	29
FIGURA 4 - Temperatura Crítica τ_v^c em função do parâmetro ξ_v . $S = 1/2$; $dv = 0.0$	30
FIGURA 5 - Magnetização \mathcal{G}_v em função de τ , para $S = 1.0$; $\xi_v = 0.0$ e alguns valores de dv	31
FIGURA 6 - Temperatura crítica τ_v^c em função do parâmetro dv ; $\xi_v = 0.0$; $S = 1.0$	32
FIGURA 7 - Esquema da estrutura cúbica simples mostrando as possíveis interações assumidas no modelo.....	35
FIGURA 8 - Magnetização do primeiro plano \mathcal{G}_0 , em função da temperatura reduzida, para alguns valores do parâmetro ξ_v . $S = 1.0$; $dv = 0.0$	68
FIGURA 9 - Magnetização \mathcal{G}_v , \mathcal{G}_0 e \mathcal{G}_1 em função de τ . $\xi_v = 1.8$; $S = 1/2$; $dv = 0.0$	69

FIGURA 10 - Relação de dispersão dos magnons de superfície.
 Para vários valores de τ . $d_v = 0.2$; $d_s = 0.2..$ 70

FIGURA 11 - Relação de dispersão dos modos de excitações de volume e superfície para três valores de d_s . $d_v = 0.2$; $\tau = 1.36$; $\tau < \tau_v^c$ 71

FIGURA 12 - Temperatura crítica reduzida do primeiro plano em função do parâmetro crítico d_s^c 82

FIGURA 13 - Parâmetro d_s^c em função de d_v 83

FIGURA 14 - Magnetização G_0 em função de τ para diversos valores do parâmetro d_s . $d_v = 0.2$; $S = 1.0$; $E_v = 0.0.$ 84

FIGURA 15 - Magnetização G_x em função de τ . $d_v = 0.2$; $d_s = 2.0$; $S = 1.0$ 85

FIGURA 16 - Relação de dispersão dos modos de excitações de superfície para alguns valores de τ ; $d_v = 0.2$; $d_s = 1.0$ 86

FIGURA 17 - Relação de dispersão dos modos de excitações de superfície para alguns valores de ~~d_c, τ~~ $\rightarrow \tau_v^c$ 87

CAPÍTULO 1

1 - INTRODUÇÃO

Na investigação das propriedades físicas de um cristal geralmente admite-se o modelo do cristal infinito. Esta hipótese é admissível em cristais onde as propriedades superficiais são desprezíveis comparadas com as de volume. Nas últimas décadas as propriedades magnéticas em superfícies e em filmes tem sido amplamente estudadas⁽¹⁰⁾, tornando a relação superfície-volume comparáveis. Além disto a presença de superfícies delimitadoras nas amostras é um fato real e precisamos muitas vezes saber separar as contribuições da superfície e do volume na determinação de certas propriedades físicas.

No presente trabalho apresentamos o modelo de um cristal ferromagnético, isolante e semi-infinito, descrito pelo Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropias, dado pela Eq. (3.21). Levamos em conta interações de intercâmbio entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples, um termo de campo cristalino, correspondente à anisotropia uniaxial de íon único, assim como um campo magnético externo aplicado paralelamente à superfície livre.

As constantes de intercâmbio e anisotropia são tomadas de tal forma que as interações na superfície sejam distintas das de volume. Assim, para as interações de intercâmbio na superfície tomamos o parâmetro $J''^{1,2}$, correspondente às interações entre primeiros e segundos vizinhos e D_s para o parâmetro de anisotropia. As interações entre a superfície e o plano imediatamente abaixo são tomadas na forma $J_1^{1,2}$, enquanto a anisotropia é simplesmente representada pelo parâmetro D , para todos os outros íons do cristal a partir do segundo plano. Essencialmente a partir do segundo plano os parâmetros de intercâmbio são uniformes e isotrópicos, dados por

$J^{1,2}$, ou seja, a partir do segundo plano as propriedades magnéticas do cristal são idênticas às daquelas de um cristal infinito.

Dependendo da relação existente entre os parâmetros de intercâmbio da superfície e do volume, podemos estudar o comportamento da magnetização espontânea da superfície em função da temperatura e comparar com a magnetização correspondente do volume.

Neste trabalho estudamos as possíveis modificações no perfil da magnetização de superfície, temperatura crítica e no espectro das excitações elementares dos magnons, em função da relação entre as anisotropias de volume e superfície. Utilizamos o método das funções de Green^(1,2), com o desacoplamento RPA⁽²⁷⁾, e consideramos a aproximação de que a partir da terceira camada a magnetização seja igual à magnetização de volume. Calculamos autoconsistentemente a magnetização dos dois primeiros planos em função da temperatura e da magnetização de volume.

Encontramos na literatura vários trabalhos relativos ao estudo do magnetismo em superfícies^(16,24). Selzer⁽⁵⁾ e Selzer e N. Majlis^(15,17) desenvolveram um modelo para tratar o magnetismo em superfícies, para qualquer valor de spin onde levaram em conta interações de intercâmbio anisotrópicas entre primeiros vizinhos. Neste trabalho utilizamos o formalismo das funções de Green para tratar o modelo de Heisenberg com anisotropias do tipo uniaxiais, e nossos resultados para a magnetização superficial são qualitativamente semelhantes aos desses autores.

Medidas experimentais relativas à magnetização de superfícies, só recentemente começaram a ser realizadas. A primeira observação experimental deste fenômeno foi realizada por C. Rau⁽³¹⁾ em filmes finos policristalinos de Gadolínio. Utilizando a técnica de difração de elétrons de baixa energia com spin polarizado, Weller e colaboradores⁽³²⁾, verificaram que para uma amostra de Gadolínio sem contaminação, a temperatura crítica de superfície está 22 K acima do ponto de Curie do volume.

No capítulo 2 apresentamos as modificações das funções de Bloch do modelo do cristal infinito para o semi-infinito, numa tentativa de justificar a presença de estados localizados no cristal semi-infinito. Através de um exemplo, baseado na aproximação do elétron quase livre, calculamos as funções de onda e os autovalores de energia dos estados eletrônicos de um cristal semi-infinito.

No capítulo 3 apresentamos o método das funções de Green e as aplicamos no estudo das propriedades magnéticas de um cristal descrito pelo modelo de Heisenberg com anisotropia, válido para qualquer valor de spin numa rede cúbica simples.

No capítulo 4 aplicamos o método das funções de Green para um cristal ferromagnético semi-infinito. Levando-se em conta que a partir do terceiro plano a magnetização por íon seja idêntica a de um cristal infinito, calculamos de uma forma autoconsistente a magnetização da superfície em função da temperatura, e as relações de dispersão dos magnons de volume e de superfície numa determinada direção cristalina.

No capítulo 5, consideramos o efeito da anisotropia uniaxial de íon único, explorando o comportamento da magnetização de superfície e volume em função da relação dos parâmetros de anisotropia de volume e superfície. Desta forma obtemos alguns resultados interessantes dependendo das escolhas destes parâmetros. Por exemplo é possível termos uma camada superficial paramagnética, enquanto o volume seja ferromagnético, como também a situação oposta, na qual a camada superficial é ferromagnética com um substrato paramagnético. Nesta última situação obtemos temperaturas críticas de transição da superfície (T_S^C) apreciavelmente acima das temperaturas críticas do volume (T_V^C). A relação T_S^C/T_V^C , depende igualmente da relação entre os parâmetros de anisotropia do sistema. Apresentamos neste caso a relação de dispersão dos magnons de superfície.

Finalmente, no capítulo 6 analisamos os resultados obtidos neste trabalho e indicamos possíveis linhas de pesquisa neste sistema.

CAPÍTULO 2

FUNÇÕES DE BLOCH PARA UM SISTEMA SEMI-INFINITO

2.1 - INTRODUÇÃO

Ao estudarmos as propriedades termodinâmicas de um cristal normalmente assumimos que a rede cristalina seja infinita, assegurando-se desta forma a simetria translacional da rede. Tal hipótese é aceitável quando estamos interessados em estudar as propriedades de volume e os efeitos de superfície são desprezados. Esta aproximação pode ser justificada levando-se em conta que num cristal macroscópico típico existem 10^{24} átomos, sendo que apenas 10^{16} estão localizados na superfície. Quando consideramos amostras suficientemente pequenas é que os estados de energia superficiais tornam-se relevantes.

A partir dos anos sessenta surgiu um grande interesse no estudo dos efeitos de superfície em Física do Estado Sólido. A crescente necessidade de se reduzir os tamanhos dos sistemas, inclusive magnéticos, implicou no aumento da relação superfície-volume de forma significativa, modificando-se de forma substancial as propriedades dos sistemas considerados⁽⁵⁾.

Nos experimentos, a presença de superfícies delimitadoras nas amostras é um fato inevitável. Uma tentativa para descrevermos as propriedades de superfície é considerarmos um cristal semi-infinito com uma superfície livre, sendo assim necessário correções na teoria das excitações elementares desenvolvida para os sistemas infinitos⁽⁵⁾.

Neste capítulo apresentaremos as possíveis modificações dos auto-estados e energias do sistema infinito adaptadas para um sistema semi-infinito.

2.2 - FUNÇÕES DE BLOCH PARA UMA SUPERFÍCIE LIVRE

O teorema de Bloch afirma que os auto-estados do Hamiltoniano⁽⁵⁾

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) , \quad (2.1)$$

onde $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ para todo \vec{R} da rede de Bravais, pode ser escolhido como tendo a forma de uma onda plana vezes uma função com a periodicidade da rede de Bravais

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) . \quad (2.2a)$$

Ao considerarmos um cristal semi-infinito, há uma quebra da simetria translacional na direção perpendicular ao plano da superfície. A função de onda de uma excitação elementar deve levar em conta a simetria de translação, expressa matematicamente pela Eq. (2.2a) que é válida para um cristal infinito. Na equação acima não exigimos que o vetor de onda \vec{k} seja real. Esta restrição, para valores reais de \vec{k} emerge da aplicação da condição periódica de Born Von-Karman apropriada para um cristal infinito. Neste caso a amplitude da função de onda da excitação se mantém limitada, ou seja

$$|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})| = |u_{\vec{k}}(\vec{r})| . \quad (2.2b)$$

Ao considerarmos um cristal semi-infinito já não teremos propagação ao longo da direção perpendicular à superfície, mas mesmo assim consideraremos funções do tipo das de Bloch, adequadas às condições de contorno com uma superfície livre. Teremos portanto:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}_{\parallel}} e^{i(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) + B_{\vec{k}_{\parallel}} e^{-i(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}), \quad (2.3)$$

onde $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + \vec{r}_{\perp}$ e $\vec{k} = \vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}$ dependem da escolha dos eixos no cristal. Se \vec{r}_{\perp} está na direção y , normal à superfície livre, a função exponencial será $e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{i\vec{k}_{\perp} \cdot y}$ de modo que se y cresce em direção ao interior do cristal, \vec{k}_{\perp} já não precisa ser mais real.

Se, por exemplo, $k_{\perp} = iq$, $q > 0$, a função de onda será decrescente, satisfazendo a condição assintótica para y tendendo ao infinito, própria de um estado localizado na superfície. Se $\Psi \rightarrow 0$ quando $y \rightarrow \infty$, teremos $B_{\vec{k}_{\parallel}} = 0$. Portanto, a função de onda de um estado localizado na superfície é expressa por:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}_{\parallel}} e^{i(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}). \quad (2.4)$$

Existem então soluções com dois tipos de comportamento para um valor fixo de \vec{k}_{\parallel} :

1º) Há uma infinidade de ondas estacionárias na direção perpendicular à superfície com frequências que formam uma distribuição contínua. Como veremos posteriormente, no capítulo 3, os limites do espectro contínuo e a relação de dispersão $E(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}_{\perp})$ são as mesmas que na ausência de superfície, isto é, para o cristal infinito.

2º) Dependendo dos parâmetros que caracterizam a superfície, existem ou não soluções que na direção perpendicular se comportam como ondas com uma amplitude que decai exponencialmente em direção ao interior do cristal. As frequências destas soluções formam um espectro discreto e ficam fora do intervalo contínuo (para \vec{k}_{\parallel} fixo) das ondas estacionárias. As duas situações citadas aci

ma serão ilustradas graficamente nos capítulos 4 e 5.

No sistema considerado neste trabalho, as excitações elementares que estudamos são as ondas de desvio de spin relativas ao estado fundamental do cristal ferromagnético.

2.3 - ESTADOS ELETRÔNICOS SUPERFICIAIS ⁽¹³⁾

Ilustraremos a discussão apresentada anteriormente, considerando explicitamente a influência de uma superfície no espectro de energia dos elétrons. Tomaremos um potencial periódico no cristal que se estende sobre o semi-espço $y < 0$ do sistema de coordenadas cartesianas. no semi-espço $y > 0$ (vãcuo) o potencial será constante, V_0 . A superfície assim representa uma abrupta transição entre a rede periódica e o vãcuo. Nós levaremos em conta as seguintes hipóteses:

a) admitiremos que o potencial da rede seja pequeno de tal forma que poderemos usar a aproximação do elétron quase livre.

b) consideraremos apenas o problema em uma dimensão, ou seja, na direção perpendicular à superfície. Desta forma, o potencial periódico satisfaz a relação:

$$V(y) = \begin{cases} V_0 & \text{para } y > 0 \\ V(y+na) & \text{se } y < 0 \end{cases}, \quad (2.5)$$

onde n é um número inteiro e a é a constante de rede.

Temos portanto que resolver a seguinte equação de Schrödinger em uma dimensão:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) \right] \Psi(y) = E \Psi(y) , \quad (2.6)$$

separadamente para as regiões $y > 0$ e $y < 0$.

Para o vácuo vale a seguinte solução:

$$\Psi = A \exp \left[-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} y \right] , \quad (2.7)$$

onde A é uma constante de normalização.

Para as soluções no interior do cristal, $y < 0$, expandimos o potencial periódico numa série de vetores da rede recíproca unidimensional (g):

$$V(y) = \sum_{g \neq 0} V_g e^{igy} , \quad (2.8a)$$

Escrevemos para a função de onda igualmente que

$$\Psi_k(y) = e^{iky} \sum_g u_{k-g} e^{-igy} , \quad (2.8b)$$

e levando-se essas duas últimas equações na equação de Schrödinger, obtemos⁽¹⁴⁾

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (k-g)^2 - E(k) \right] u_{k-g} + \sum_{g'} V_{g'-g} u_{k-g'} = 0 . \quad (2.8c)$$

Notamos que as equações acima permitem-nos determinar os coeficientes u_{k-g} e os níveis de energia E , para cada valor de k .

Consideremos dois níveis de elétrons livres que estão separados por uma energia da ordem de V , suposta muito pequena, porém muito separados dos outros níveis relativamente ao valor de V . Por exemplo, se $k = \frac{\pi}{a}$, é fácil verificar que os níveis de elétrons livres para $E(k)$ e $E(k-g)$ | $g = \frac{2\pi}{a}$ são muito próximos. Neste caso, consideramos na Eq. (2.8b) apenas $g = 0$ e $g = \frac{2\pi}{a}$, e escrevemos a função de onda na forma,

$$\Psi'_k(y) = u_k \exp(iky) + u_{k-\frac{2\pi}{a}} \exp\left[i\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)y\right], \quad (2.9)$$

onde u_k e $u_{k-\frac{2\pi}{a}}$ são dois parâmetros a serem determinados. Neste caso o sistema ^a de equação se reduz a:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - E(k)\right] u_k + V \frac{2\pi}{a} u_{k-\frac{2\pi}{a}} = 0, \quad (2.10)$$

$$V \frac{-2\pi}{a} u_k + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 - E(k)\right] u_{k-\frac{2\pi}{a}} = 0.$$

Tomando-se $k = \frac{\pi}{a} + \epsilon$ e $\gamma = \frac{\hbar^2 \pi \epsilon}{ma |V|}$ é fácil mostrar que obtemos a seguinte solução:

$$\Psi = B \left[\exp\left(i \frac{\pi}{a} y\right) + \frac{|V|}{V} \left(-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 + 1}\right) \exp\left(-i \frac{\pi}{a} y\right) \right] \exp(i\epsilon y) \quad (2.11a)$$

e

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} + \varepsilon \right)^2 \pm |V| \left[(\gamma^2 + 1)^{1/2} \mp \gamma \right], \quad (2.11b)$$

onde B é uma constante de normalização.

Para ε real a Eq. (2.11b) dará as seguintes bandas de energia mostradas na figura abaixo.

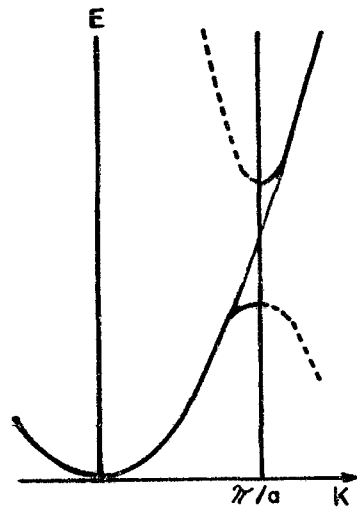


Figura (1) - Secção da estrutura de banda de uma rede linear de parâmetro a, na aproximação do elétron quase livre.

Além dessas soluções, típicas de um sistema infinito, determinaremos agora as soluções localizadas na superfície. Como a Eq. (2.11a) é uma solução no semi-espço $y < 0$, o parâmetro ε pode ser tomado também como sendo imaginário. Para $\varepsilon = -iq$, q real e positivo, teremos soluções que decrescem exponencialmente à medida que penetramos no interior do cristal. Sendo $\gamma = -i \frac{\hbar^2 \pi}{ma |V|}$, $q = i \text{sen}(2\delta)$, teremos que:

$$\Psi = C \left\{ \exp \left[i \left(\frac{\pi}{a} \cdot y \pm \delta \right) \right] \pm \frac{|V|}{V} \exp \left[-i \left(\frac{\pi}{a} \cdot y \pm \delta \right) \right] \right\} \exp(qy), \quad (2.12)$$

onde C é uma constante de normalização. A energia associada a esta solução será:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - q^2 \right] \pm |V| \left[1 - \left(\frac{\hbar^2 \pi q}{m a |V|} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.13)$$

Vemos que E será real se $0 \leq q \leq q_{\max} = \frac{m a |V|}{\hbar^2 \pi}$. Para $q = 0$, obtemos a solução:

$$\Psi = C \left[\exp \left(i \frac{\pi}{a} y \right) \pm \frac{|V|}{V} \exp \left(-i \frac{\pi}{a} y \right) \right] \propto \begin{cases} \cos \left(\frac{\pi}{a} y \right) & \text{para } V > 0 \\ \sin \left(\frac{\pi}{a} y \right) & \text{para } V < 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

que corresponderá às duas bandas de energia encontradas anteriormente.

Podemos assim resumir os resultados anteriores:

As soluções da equação de Schrödinger, Eq. (2.6), com k real, correspondem às soluções usuais da teoria de bandas; soluções são também possíveis para k imaginário que decrescem com o aumento da distância a partir da superfície. Os valores da energia, conforme a Eq. (2.13), estão situados na região do gap de energia entre as bandas, cuja largura é $2|V|$. Isso representa um estado no qual o elétron está localizado próximo à superfície do cristal semi-infinito.

CAPÍTULO 3

FUNÇÕES DE GREEN PARA UM CRISTAL FERROMAGNÉTICO INFINITO

3.1 - INTRODUÇÃO

Apresentamos neste capítulo o método das funções de Green aplicado a um cristal ferromagnético infinito. Inicialmente mostramos o formalismo de uma forma geral, independentemente do problema tratado; assim cada problema fica caracterizado pela escolha adequada dos operadores e seu Hamiltoniano.

Em seu trabalho de revisão Zubarev⁽¹⁾ apresenta aplicações do método das funções de Green na teoria dos processos irreversíveis, gases perfeitos quânticos, supercondutividade, interação elétron-fônon e ferromagnetismo. Utilizamos neste capítulo as mesmas aproximações desenvolvidas nos trabalhos de Bogoliubov e Tyablikov^(1,4) e a hipótese de que o valor médio da componente z do spin no cristal seja independente da posição. Partindo do Hamiltoniano de Heisenberg para um sistema de spins num cristal infinito, determinamos a magnetização espontânea em função da temperatura.

Neste capítulo resolvemos o problema para spin $1/2$ levando em consideração as contribuições devido às interações de intercâmbio entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples. Incluímos uma anisotropia uniaxial de íon único^(22,23) no Hamiltoniano, para $S = 1$. Estendemos os resultados para qualquer valor de spin, analogamente ao trabalho de Tahir-Kheli e D. Ter Haar⁽⁶⁾.

3.2 - MÉTODO DAS FUNÇÕES DE GREEN

Para um operador A sua média térmica é definida por:

$$\langle A \rangle = \text{Tr} (\rho A) , \quad (3.1)$$

sendo que, no equilíbrio térmico, o operador densidade é dado por:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} , \quad (3.2)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura absoluta e $\beta = (k_B T)^{-1}$. Na expressão acima Z é a função partição canônica definida por.

$$Z = \text{Tr} \left\{ \exp(-\beta H) \right\} . \quad (3.3)$$

Como estamos interessados na média térmica de operadores para um sistema de muitas partículas, é útil introduzir uma função mais geral, a função correlação temporal, para dois operadores A e B :

$$F_{BA}(t, t') = \langle B(t') A(t) \rangle \quad (3.4a)$$

e

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle , \quad (3.4b)$$

onde $A(t)$ e $B(t')$ são operadores dependentes do tempo na representação de Heisenberg,

$$A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt} \quad (3.5a)$$

e

$$B(t') = e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'} . \quad (3.5b)$$

Levando-se em conta a propriedade de que o traço é invariante sob permutações cíclicas é fácil mostrar que

$$\langle A(t) B(t') \rangle = (Z)^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} A(0) e^{-iH(t-t')} B(0) e^{iH(t-t')} \right\}, \quad (3.6)$$

ou seja

$$F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t - t'). \quad (3.7)$$

Notamos que as funções definidas pelas Eqs. (3.4) dependem somente da diferença temporal. Observamos que se $t = t'$, teremos:

$$F_{AB}(t, t') = F_{AB}(0) = \langle A(0) B(0) \rangle = \langle A(t) B(t) \rangle, \quad (3.8)$$

o que se reduz à média estatística usual, no equilíbrio térmico. O cálculo das funções de correlação é convenientemente realizado em termos das funções de Green.

As funções de Green^(1,2) têm sido largamente utilizadas na teoria de campo quântico, e nos últimos anos muitas aplicações têm sido realizadas em Física Estatística. Definimos a função de Green retardada, dependente da temperatura e de dois tempos para os operadores A e B por

$$G_r(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -i \theta(t - t') \langle [A(t); B(t')] \rangle \quad (3.9a)$$

onde $[A(t), B(t')]$ representa o comutador dos operadores A e B na representação de Heisenberg; $\theta(t - t')$ é a chamada função de Heaviside, representada a seguir, cujo valor é zero para $t < t'$ e 1 pa

ra $t > t'$.

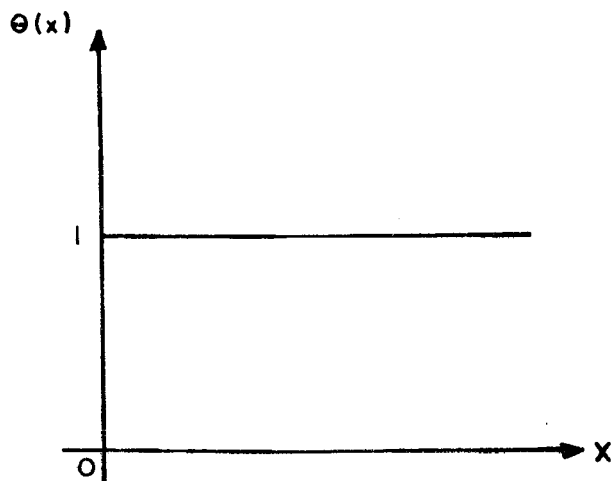


Figura 2 - Representação gráfica da função $\theta(x)$.

Analogamente, definimos a função de Green avançada ,

$$G_a(t, t') = i \theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')] \rangle . \quad (3.9b)$$

Nas equações seguintes abandonaremos os subscritos r e a em todas as equações que são igualmente válidas para as funções retardada e avançada. Para encontrarmos as funções de Green necessitamos de suas equações de movimento. Utilizando a equação de Heisenberg

$$i \hbar \frac{dA}{dt} = [A, H] ,$$

obtemos que

$$i \hbar \frac{d}{dt} G(t, t') = \hbar \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle\langle [A(t), H]; B(t') \rangle\rangle . \quad (3.10)$$

Da mesma forma que as funções de correlação definidas anteriormente, as funções de Green $G(t, t')$ também dependem somente da diferença de

tempos. Assim sendo, podemos introduzir a transformada de Fourier em relação ao tempo das funções de Green:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t-t') e^{iE(t-t')} d(t-t') \quad , \quad (3.11a)$$

$$G(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} G(E) e^{-i(t-t')} dE \quad . \quad (3.11b)$$

Utilizando as Eqs. (3.11) podemos transformar a equação de movimento em

$$E \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B] \rangle + \frac{\langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle_E}{\hbar} \quad . \quad (3.12)$$

Notamos que o último termo da Eq. (3.12) é em geral uma função de Green de maior ordem. Então para encontrarmos $G(E)$ devemos resolver uma cadeia infinita de equações. Para resolvermos as Eqs. (3.12) usualmente recorre-se a alguma aproximação para desacoplar essas equações. Adotaremos a aproximação "Random Phase Approximation" (RPA)⁽²⁷⁾. Conhecida a função de Green $G(E)$ podemos retornar e calcular as funções de correlação de interesse.

Para obtermos as relações entre estas várias funções, introduziremos a transformada de Fourier da função correlação,

$F_{BA}(t - t')$:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F_{BA}(t-t') e^{i\omega(t-t')} d(t-t') \quad (3.13a)$$

$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (3.13b)$$

onde $J(\omega)$ é a chamada função Densidade Espectral e está relacionada com a transformada de Fourier da função de Green. Considerando um conjunto completo de autofunções do Hamiltoniano,

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad ,$$

onde

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad ,$$

e representando-se

$$\langle m | A(0) | n \rangle = A_{mn} \quad ,$$

é possível mostrar que

$$F_{BA} = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} B_{nm} A_{mn} e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} \quad (3.14a)$$

e

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} B_{nm} A_{mn} \delta(\omega - E_n + E_m) \quad (3.14b)$$

Para obtermos a transformada de Fourier de F_{AB} , procedemos de maneira análoga como nas Eqs. (3.14). Temos então que:

$$F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (3.15)$$

Podemos agora relacionar a transformada de Fourier das funções de Green com $J(\omega)$. Levando-se em conta as Eqs. (3.9) e (3.11), obtemos:

$$G_r(E) = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} e^{iEt} \Theta(t) J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) dt \quad (3.16)$$

Lembrando-se da definição da função de Heaviside, e introduzindo o fator $\exp(-\epsilon t)$, ($\epsilon \rightarrow 0^+$), para assegurar a convergência da integral quando $t \rightarrow \infty$, achamos que

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega + i\epsilon} d\omega. \quad (3.17a)$$

De forma análoga obtemos para função de Green avançada, a expressão

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega - i\epsilon} d\omega. \quad (3.17b)$$

Se considerarmos a variável E como sendo complexa, reduzimos as duas formas para uma única função analítica $G(E)$, ou seja,

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega} d\omega = \begin{cases} G_r(E) & \text{se } \text{Im } E > 0, \\ G_a(E) & \text{se } \text{Im } E < 0. \end{cases} \quad (3.17c)$$

As funções $G_r(E)$ e $G_a(E)$ são analíticas nos semi-planos superior e inferior do plano complexo, respectivamente. A continuação analítica de $G(E)$ tem singularidades ao longo do eixo real. Utilizando a seguinte representação para função delta de Dirac,

$$2\pi i \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right), \quad (3.18)$$

a descontinuidade de $G(E)$ no eixo real pode ser relacionada com a função Densidade espectral $J(\omega)$, através da seguinte expressão:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon) \right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} - \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} \right] = i J(E) (e^{\beta E} - 1), \quad (3.19)$$

ou seja,

$$J(\omega) = \frac{i}{(e^{\beta\omega} - 1)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) \right\}. \quad (3.20)$$

Obtida a função $J(\omega)$ podemos calcular as médias estatísticas dos operadores de interesse, substituindo a equação acima na equação (3.13b).

3.3 - APLICAÇÃO DAS FUNÇÕES DE GREEN PARA UM CRISTAL FERROMAGNÉTICO

Consideremos o seguinte Hamiltoniano de spins numa rede cúbica simples.

$$H = - \sum_{\vec{i} \neq \vec{j}} J^1(\vec{i}-\vec{j}) \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{j}} - \sum_{\vec{i} \neq \vec{k}} J^2(\vec{i}-\vec{k}) \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{k}} - g\mu_B H_0 \sum_{\vec{i}} S_{\vec{i}}^z - D \sum_{\vec{i}} (S_{\vec{i}}^z)^2, \quad (3.21)$$

onde

$J^1(\vec{i}-\vec{j})$ é o parâmetro de intercâmbio devido às interações entre spins vizinhos mais próximos,

$J^2(\vec{i}-\vec{k})$ é o parâmetro de intercâmbio devido às interações entre spins segundos vizinhos,

H_0 representa o campo magnético externo aplicado ao sistema na direção z,

g é o fator de Landé,

μ_B é o magneton de Bohr,

D representa a anisotropia uniaxial de íon único e,

$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ representa os vetores que posicionam os spins na rede.

Nas expressões seguintes definimos os operadores $S_{\vec{i}}^+$ e $S_{\vec{i}}^-$ e as relações de comutação entre os operadores que serão utilizadas em nosso cálculo:

$$S_{\vec{i}}^{\pm} = S_{\vec{i}}^x \pm i S_{\vec{i}}^y, \quad (3.22a)$$

$$[S_{\vec{i}}^{\pm}, S_{\vec{j}}^z] = (\mp) S_{\vec{i}}^{\pm} \delta_{\vec{i}-\vec{j}}, \quad (3.22b)$$

$$[S_{\vec{i}}^+, S_{\vec{j}}^-] = 2 S_{\vec{i}}^z \delta_{\vec{i}-\vec{j}}. \quad (3.22c)$$

Em termos dos operadores $S_{\vec{i}}^+$, $S_{\vec{i}}^-$ e $S_{\vec{i}}^z$ o Hamiltoniano

pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{\vec{l} \neq \vec{j}} J^1(\vec{l}-\vec{j}) [S_{\vec{l}}^- S_{\vec{j}}^+ + S_{\vec{l}}^z S_{\vec{j}}^z] - \sum_{\vec{l} \neq \vec{k}} J^2(\vec{l}-\vec{k}) [S_{\vec{l}}^- S_{\vec{k}}^+ + \\ & + S_{\vec{l}}^z S_{\vec{k}}^z] - \sum_{\vec{l}} D (S_{\vec{l}}^z)^2 - g\mu_B H_0 \sum_{\vec{l}} (S_{\vec{l}}^z). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Definindo-se os operadores $A = S_{\vec{l}}^+$ e $B = S_{\vec{m}}^-$, e introduzindo-os na Eq. (3.12), teremos

$$E \langle\langle S_{\vec{l}}^+; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{l}}^+, S_{\vec{m}}^-] \rangle + \langle\langle [S_{\vec{l}}^+, \mathcal{H}]; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E. \quad (3.24)$$

Desenvolvendo os comutadores do segundo membro e introduzindo o desacoplamento RPA obtemos:

$$\begin{aligned} \{E - g\mu_B H_0 - 2D\langle S^z \rangle - 2\langle S^z \rangle \sum_{\vec{j}} J^1(\vec{l}-\vec{j}) - 2\langle S^z \rangle \sum_{\vec{k}} J^2(\vec{l}- \\ - \vec{k})\} G_{\vec{l}\vec{m}}(E) + 2\langle S^z \rangle \left\{ \sum_{\vec{j}} J^1(\vec{l}-\vec{j}) G_{\vec{j}\vec{m}}(E) + \sum_{\vec{k}} J^2(\vec{l}-\vec{k}) G_{\vec{k}\vec{m}}(E) \right\} = \\ = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{l}}^+, S_{\vec{m}}^-] \rangle. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Na equação acima $G_{\vec{l}\vec{m}}(E) = \langle\langle S_{\vec{l}}^+, S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E$, e assumimos que

$$\langle S^z \rangle = \langle S_{\vec{l}}^z \rangle. \quad (3.26a)$$

para qualquer vetor $\vec{\lambda}$. O desacoplamento RPA é tomado na forma

$$\langle\langle S_{\vec{k}}^{\gamma} S_{\vec{\lambda}}^{+}; S_{\vec{m}}^{-} \rangle\rangle_E = \langle S_{\vec{k}}^{\gamma} \rangle \langle\langle S_{\vec{\lambda}}^{+}; S_{\vec{m}}^{-} \rangle\rangle_E. \quad (3.26b)$$

Embora existam desacoplamentos mais sofisticados, como por exemplo, o desacoplamento de Callen⁽²⁷⁾, os resultados obtidos para a magnetização são essencialmente os mesmos, exceto na região de temperaturas muito baixas⁽³⁰⁾.

Podemos agora introduzir a transformada de Fourier para a função de Green, pois nosso cristal apresenta simetria translacional,

$$G_{\vec{\lambda}\vec{m}}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{\lambda}-\vec{m})}, \quad (3.27a)$$

onde $G_{\vec{k}}(E)$ é a transformada de Fourier da função de Green.

A soma é efetuada sobre todos os vetores \vec{k} dentro da primeira Zona de Brillouin e N representa o número de células unitárias do cristal. Lembrando-se que

$$\delta_{\vec{\lambda}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{\lambda}-\vec{m})}, \quad (3.27b)$$

da Eq. (3.25) obtemos

$$\left\{ E - [g\mu_B H_0 + 2\langle S^{\gamma} \rangle (D + \tilde{J}^1(0) + \tilde{J}^2(0) - \tilde{J}^1(\vec{k}) - \tilde{J}^2(\vec{k}))] \right\} G_{\vec{k}}(E) = \frac{\langle S^{\gamma} \rangle}{\Pi}, \quad (3.28a)$$

onde

$$\tilde{J}^1(\vec{k}) = z_1 J^1 \gamma_1(\vec{k}), \quad (3.28b)$$

$$\tilde{J}^2(\vec{k}) = z_2 J^2 \gamma_2(\vec{k}), \quad (3.28c)$$

sendo que

$$\gamma_1 = \frac{1}{z_1} \sum_{\vec{j}-\vec{l}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{j}-\vec{l})} \quad e \quad \gamma_2 = \frac{1}{z_2} \sum_{\vec{k}-\vec{l}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{k}-\vec{l})} \quad (3.28d)$$

representam respectivamente os fatores de estrutura para os z_1 primeiros e z_2 segundos vizinhos. Podemos então escrever que:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{1}{(E - E_{\vec{k}})} \frac{\langle S^z \rangle}{\pi}, \quad (3.29a)$$

onde

$$E_{\vec{k}} = g\mu_B H_0 + 2\langle S^z \rangle \left[D + z_1 J^1 (1 - \gamma_1) + z_2 J^2 (1 - \gamma_2) \right]. \quad (3.29b)$$

Devemos notar que os valores de $E_{\vec{k}}$ representam as energias de excitação do sistema descrito pelo Hamiltoniano, Eq. (3.21), pois eles são os polos da função de Green⁽²⁾.

É fácil então de se determinar a função Densidade Espectral e as funções de correlação de interesse. Portanto, temos que:

$$\bar{J}(\omega) = \frac{i}{(e^{\beta\omega} - 1)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} - \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon} \right\}, \quad (3.30)$$

e

$$\langle (S_l^- S_l^+) \rangle = 2 \langle S_l^z \rangle \Phi(S), \quad (3.31a)$$

onde definimos

$$\Phi(S) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(e^{\beta E_{\vec{k}}} - 1 \right)^{-1}. \quad (3.31b)$$

Sabemos que

$$(S_l^-)(S_l^+) = \left[S(S+1) - (S_l^z)^2 \right], \quad (3.32a)$$

e que

$$\prod_{\substack{r=+S \\ r=-S}} (S^z - r) = 0. \quad (3.32b)$$

Para o caso particular de $S = 1/2$, obtemos

$$\langle (S_l^-)(S_l^+) \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_l^z \rangle \quad (3.32c)$$

e finalmente a magnetização média por sítio é dada por

$$\langle S^z \rangle = \frac{1/2}{[1 + 2\Phi(1/2)]}. \quad (3.33)$$

Devemos lembrar que para spin $1/2$, na expressão de $E_{\vec{k}}$, definida anteriormente, o termo D deve ser colocado igual a zero, pois a anisotropia uniaxial de íon único não contribui para a energia de um sistema de spins $1/2$.

No caso de spin $S \neq 1/2$, a Eq. (3.32c) não pode ser utilizada, sendo assim necessário generalizarmos o formalismo para se calcular a magnetização por sítio. Seguindo o procedimento proposto por Tahir-Kheli e Ter Haar⁽⁶⁾, definimos os operadores $A = S_{\vec{l}}^+$ e $B = (S_{\vec{m}}^-)^n (S_{\vec{m}}^+)^{n-1}$, que levados na Eq. (3.12), e com o mesmo procedimento utilizado para $S = 1/2$ permitem escrever que

$$\{E - E_{\vec{k}}\} \tilde{G}_{\vec{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{l}}^+, (S_{\vec{l}}^-)^n (S_{\vec{l}}^+)^{n-1}] \rangle, \quad (3.34a)$$

onde

$$\langle \langle S_{\vec{l}}^+ ; (S_{\vec{m}}^-)^n (S_{\vec{m}}^+)^{n-1} \rangle \rangle_E = G_{\vec{l}\vec{m}}^n(E), \quad (3.34b)$$

e que

$$\langle (S_{\vec{l}}^-)^n (S_{\vec{l}}^+)^n \rangle = \langle [S_{\vec{l}}^+, (S_{\vec{l}}^-)^n (S_{\vec{l}}^+)^{n-1}] \rangle \Phi(S), \quad (3.34c)$$

onde $E_{\vec{k}}$ e $\Phi(S)$ apresentam as mesmas expressões definidas anteriormente.

Para se calcular a magnetização média por sítio, faz-se necessário desenvolver os dois membros da equação anterior. Após algumas manipulações algébricas, envolvendo as relações de comutação, é possível mostrar que:

$$(S_x^-)^n (S_x^+)^n = \prod_{p=1}^n [S(S+1) - (n-p)(n-p-1) - (2n-2p-1)S_x^z - (S_x^z)^2] \quad (3.35a)$$

e que

$$[S_x^+, (S_x^-)^n (S_x^+)^{n-1}] = \left\{ 2nS_x^z + (n^2 - n) \right\} \prod_{p=1}^{n-1} \left\{ S(S+1) - (n-p)(n-p-1) - (2n-2p-1)S_x^z - (S_x^z)^2 \right\} \quad (3.35b)$$

As três últimas equações, juntamente com a equação

$$\prod_{r=-S}^{r=+S} (S_x^z - r) = 0 \quad (3.35c)$$

determinam um conjunto de $n = 2S$ equações linearmente independentes nas variáveis $S^z, (S^z)^2, \dots, (S^z)^{2S}$. Desta forma, podemos determinar o valor de $\langle S^z \rangle$ para qualquer valor de spin. Hewson e Ter-Haar⁽¹¹⁾ e Callen⁽²⁷⁾ apresentam a seguinte forma explícita, válida para qualquer valor de spin:

$$\langle S_x^z \rangle = \frac{[S - \Phi(S)][1 + \Phi(S)]^{2S+1} + [S+1 + \Phi(S)][\Phi(S)]^{2S+1}}{[1 + \Phi(S)]^{2S+1} - [\Phi(S)]^{2S+1}}, \quad (3.36)$$

Na expressão acima $\Phi(S)$ depende de $\langle S^z \rangle$ de tal forma que essa equação deve ser resolvida autoconsistentemente para cada valor da temperatura e dos parâmetros do Hamiltoniano.

Colocando-se $H_0 = 0$, podemos determinar a magnetiza-

ção espontânea em função da temperatura. As somas sobre os vetores \vec{k} foram realizadas utilizando-se o método dos Pontos Especiais. No Apêndice(A) descrevemos brevemente esse método, e apresentamos os pontos utilizados para uma rede cúbica simples e para uma rede quadrada, que serão utilizados neste e no próximo capítulo, respectivamente.

Antes de apresentarmos os resultados obtidos para a magnetização espontânea, vamos calcular a temperatura a partir da qual a magnetização espontânea é nula, denominada temperatura crítica.

Se $H_0 = 0$, a Eq. (3.29b) torna-se

$$E_{\vec{k}} = 2 \langle S^z \rangle \left[D + \gamma_1 J^1 (1 - \gamma_1(\vec{k})) + \gamma_2 J^2 (1 - \gamma_2(\vec{k})) \right] \quad (3.37)$$

e juntamente com a Eq. (3.31b), podemos escrever que

$$1 + 2 \Phi(s) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \cotg h \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2} \right)$$

No limite em que $T \rightarrow T_c$ (temperatura crítica) temos que $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$; logo expandindo-se a expressão anterior, teremos:

$$1 + 2 \Phi(s) = \frac{K_B T}{\langle S^z \rangle} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[D + \gamma_1 J^1 \eta_1(\vec{k}) + \gamma_2 J^2 \eta_2(\vec{k}) \right]^{-1}, \quad (3.38b)$$

onde

$$\eta_1(\vec{k}) = 1 - \gamma_1(\vec{k}) \quad \text{e} \quad \eta_2(\vec{k}) = 1 - \gamma_2(\vec{k}) \quad (3.38c)$$

Quando $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$, $\phi \rightarrow \infty$, então expandindo-se a Eq. (3.36) tiramos a seguinte expressão para a magnetização por sítio:

$$\langle S^z \rangle = \frac{S(S+1)}{3\phi}, \quad (3.39)$$

Portanto, as duas últimas equações nos fornecem a seguinte expressão para a temperatura crítica:

$$\tau_c = \frac{2S(S+1)}{3} \cdot \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [d_v + \eta_1(\vec{k}) + \epsilon_v \eta_2(\vec{k})]^{-1}} \quad (3.40)$$

onde definimos as grandezas adimensionais,

$$\tau_c = \frac{k_B T_c}{z_1 J^1}, \quad \epsilon_v = \frac{z_2 J^2}{z_1 J^1} \quad \text{e} \quad d_v = \frac{D}{z_1 J^1} \quad (3.41)$$

Para uma rede cúbica simples de parâmetro a , com $z_1 = 6$ primeiros vizinhos e $z_2 = 12$ segundos vizinhos é fácil verificar que

$$\eta_1(\vec{k}) = 1 - \frac{1}{3} (\cos(aK_x) + \cos(aK_y) + \cos(aK_z)) \quad (3.42)$$

e

$$\eta_2(\vec{k}) = 1 - \frac{1}{3} (\cos(aK_x)\cos(aK_y) + \cos(aK_x)\cos(aK_z) + \cos(aK_y)\cos(aK_z)). \quad (3.43)$$

Na Fig. (3) apresentamos o gráfico da magnetização

espontânea relativa $\zeta_V = \langle S^z \rangle / S$ para diversos valores do parâmetro $\epsilon_V = \frac{z_2 J^2}{z_1 J^1}$ no caso de spin 1/2. Para esse mesmo sistema exibimos na Fig. (4) o gráfico da temperatura crítica em função de ϵ_V .

Na Fig.(5) mostramos o gráfico da magnetização espontânea em função da temperatura para diversos valores da anisotropia uniaxial relativa $d_V = \frac{D}{z_1 J^1}$, no caso em que $S = 1$. Na Fig. (6) apresentamos o comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro d_V . Nestes dois últimos gráficos estamos considerando apenas a interação de intercâmbio entre primeiros vizinhos.

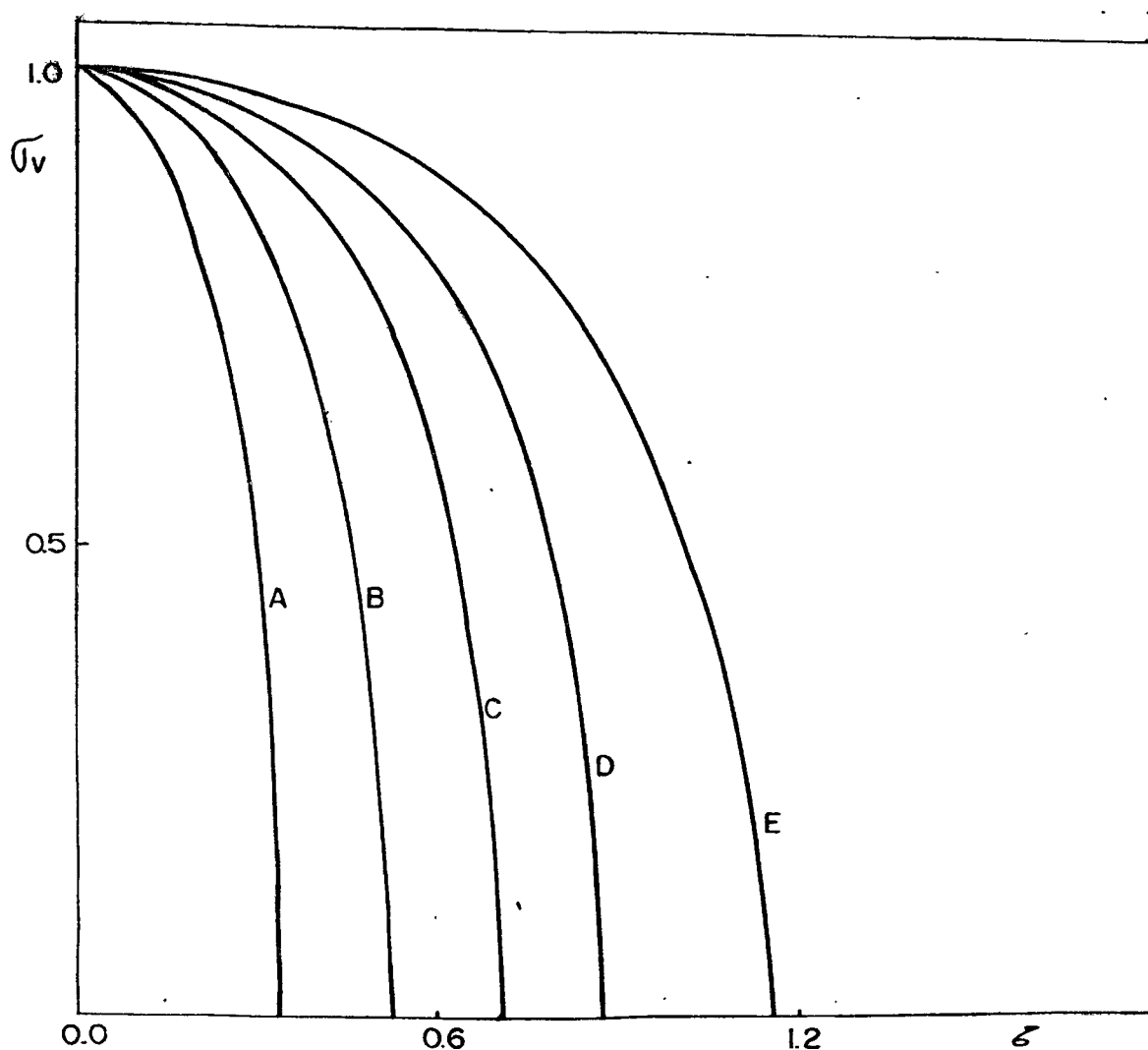


Figura 3 - Magnetização relativa $\zeta_V = \langle S^z \rangle / S$, em função da temperatura reduzida $\tau = k_B T / z_1 J^1$. A: $\epsilon_V = 0.0$;
 B: $\epsilon_V = 0.4$; C: $\epsilon_V = 0.8$; D: $\epsilon_V = 1.2$; E: $\epsilon_V = 1.8$.

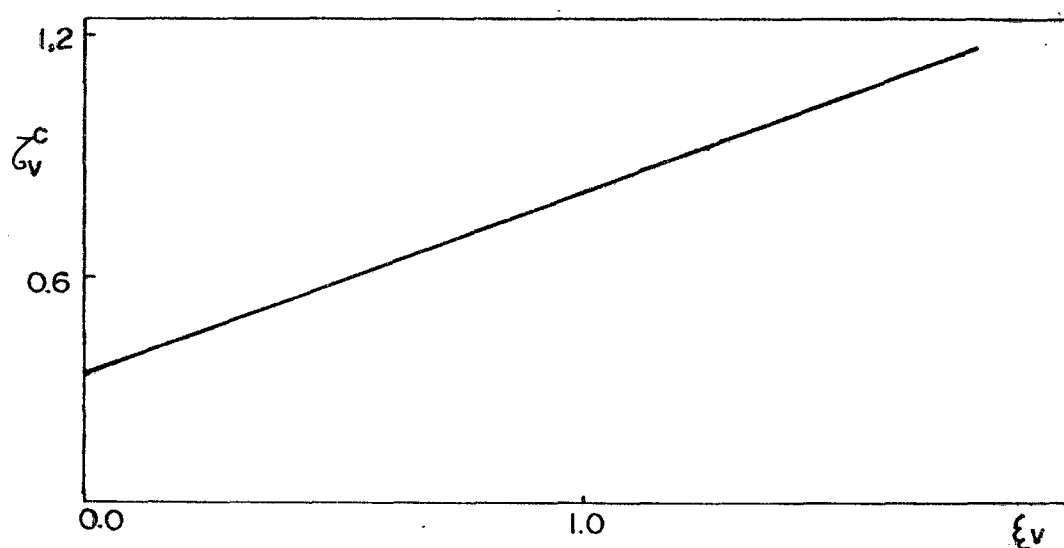


Figura 4 - Temperatura crítica $z_v^c = k_B T_v^c / z_1 J^1$, em função do parâmetro $\xi_v = z_2 J^2 / z_1 J^1$; $S = 1/2$; $d_v = 0$.

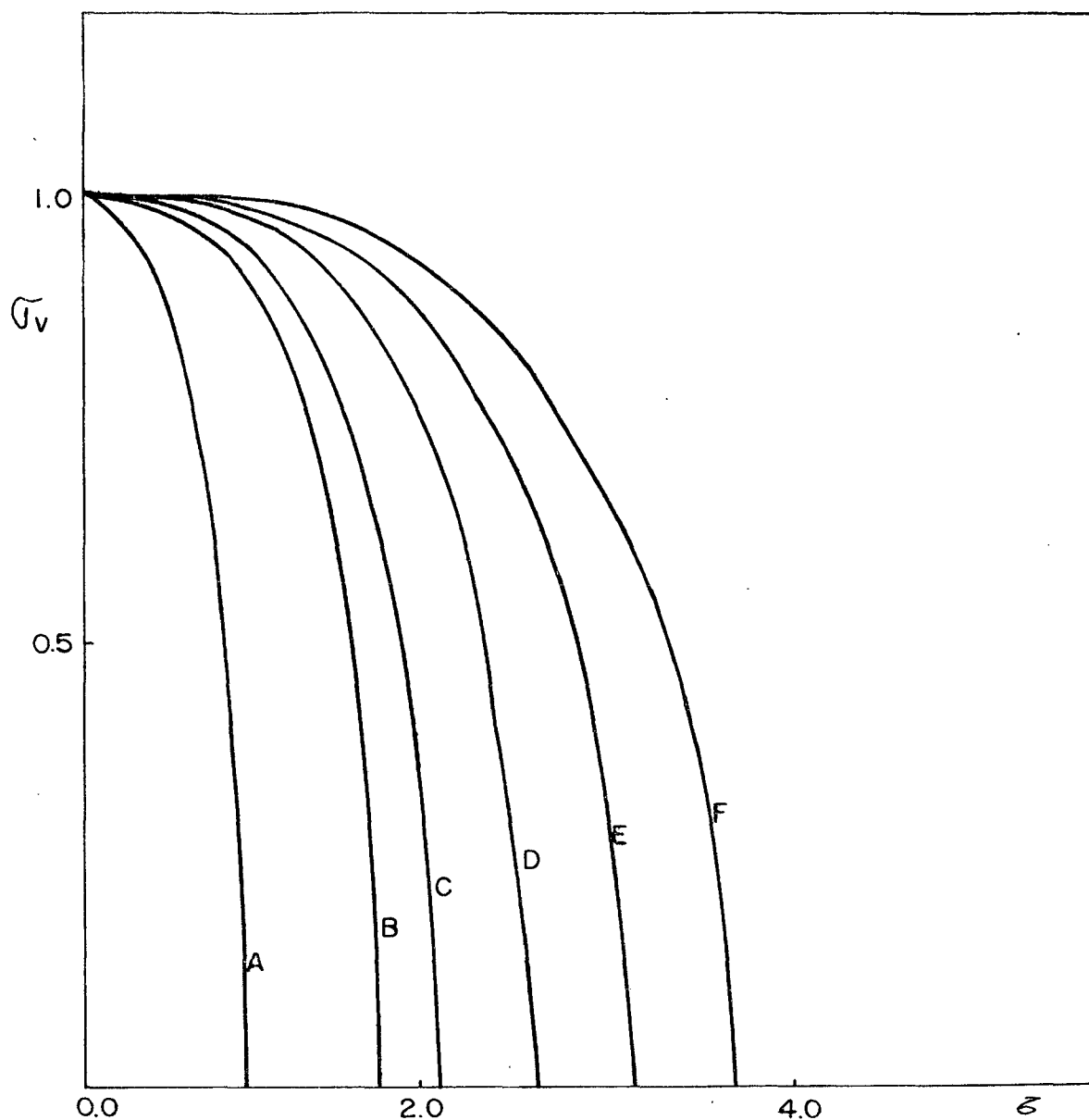


Figura 5 - Magnetização relativa $G_V = \langle S^z \rangle / S$ em função da temperatura reduzida $\tau = k_B T / z_1 J_1$. A: $d_V = 0.0$; B: $d_V = 0.4$; C: $d_V = 0.6$; D: $d_V = 1.0$; E: $d_V = 1.4$; F: $d_V = 1.8$; $S = 1.0$; $\epsilon_V = 0.0$. $d_V = \frac{D}{z_1 J_1}$, $\xi_V = \frac{z_2 J_2}{z_1 J_1}$.

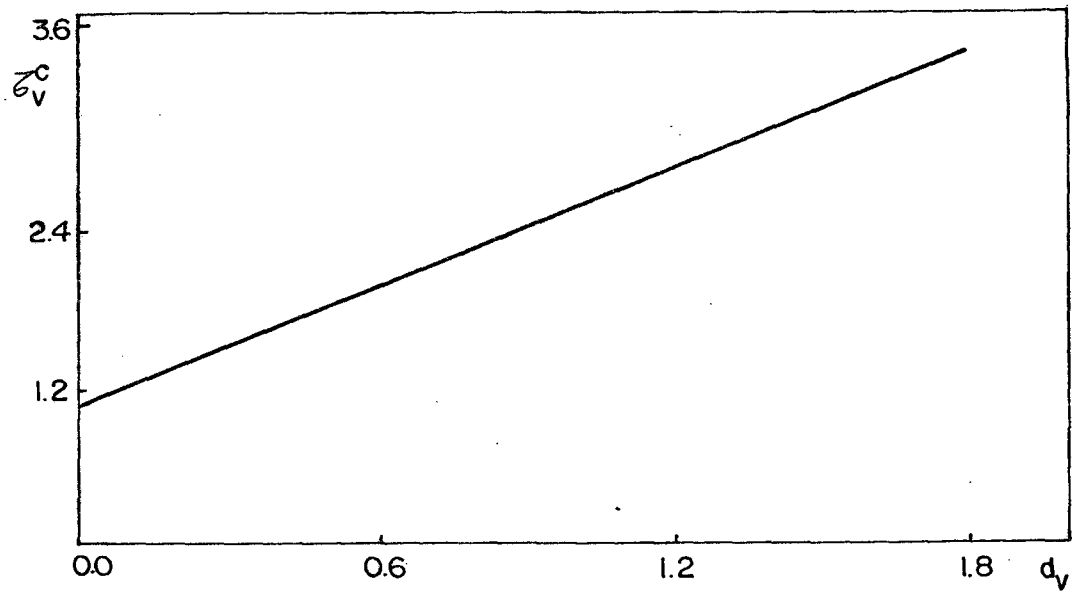


Figura 6 - Temperatura crítica reduzida $z_c^c = \frac{k_B T_c}{z_1 J^1}$, em função do parâmetro $d_v = D/z_1 J^1$, $S = 1$; $\xi_v = 0.0$;

Devemos observar que os resultados encontrados para a magnetização por íon \sqrt{v} , e para a temperatura crítica estão de acordo com outros trabalhos encontrados na literatura^(6,25,27).

Embora não tenhamos encontrado na literatura cálculos da magnetização em função da temperatura incluindo segundos vizinhos, o resultado por nós obtido parece razoável, visto que a presença destas interações aumenta o acoplamento de intercâmbio efetivo entre os spins, ocasionando um aumento na temperatura de transição.

Entretanto, devido ao desacoplamento RPA por nós empregado, a previsão da temperatura crítica deixa de ser razoável para altos valores da razão $\frac{D}{z_1 J_1}$. Isto pode ser visto no trabalho de Devlin⁽²¹⁾, onde é prevista uma temperatura crítica finita mesmo para $D \rightarrow \infty$. Nesse trabalho, embora a interação de intercâmbio seja tratada na aproximação RPA, o termo de anisotropia uniaxial de íon único é tratado exatamente. Para valores não muito grandes do parâmetro $d_v = \frac{D}{z_1 J_1}$, os resultados de Devlin se reduzem àqueles obtidos com o desacoplamento RPA no termo D.

Os resultados deste capítulo serão utilizados no capítulo seguinte na determinação da magnetização de superfície de um cristal isolante, representado pelo Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia de íon único.

CAPÍTULO 4

APLICAÇÃO DO MÉTODO DAS FUNÇÕES DE GREEN PARA UM SISTEMA FERROMAGNÉTICO SEMI-INFINITO

4.1 - Introdução

Consideramos neste capítulo o modelo de um cristal semi-infinito, ferromagnético, que ocupa um semi-espaco com uma superfície livre, garantindo desta forma a simetria de translação nos planos paralelos à superfície. Calcularemos a magnetização por plano assumindo uma estrutura cúbica simples. Aplicaremos o método desenvolvido no capítulo anterior, dentro da aproximação RPA.

Assumiremos os seguintes termos de interação em nosso modelo, Fig.(7): interação de intercâmbio isotrópicas entre os primeiros e segundos vizinhos situados na superfície ($J_{11}^{1,2}$); interações de intercâmbio isotrópicas entre os íons da superfície do segundo plano ($J^{1,2}$); as interações de intercâmbio entre os pares de íon situados nos demais planos são também consideradas isotrópicas ($J^{1,2}$). Admitiremos ainda uma anisotropia uniaxial de íon único igual a D_s no plano da superfície e D para os íons situados nos demais planos. A superfície será localizada no plano (010) e a orientação dos spins será predominantemente paralela à superfície, evitando-se os campos desmagnetizantes.

Assumiremos que a partir do terceiro plano ($l = 2$) a magnetização atinge o seu valor de volume. Obtemos um sistema de equações acopladas para os valores da magnetização em cada plano ($\langle S_l^z \rangle$) em função da temperatura e dos parâmetros do problema.

Finalmente determinaremos os espectros de energia para os magnons localizados e de volume.

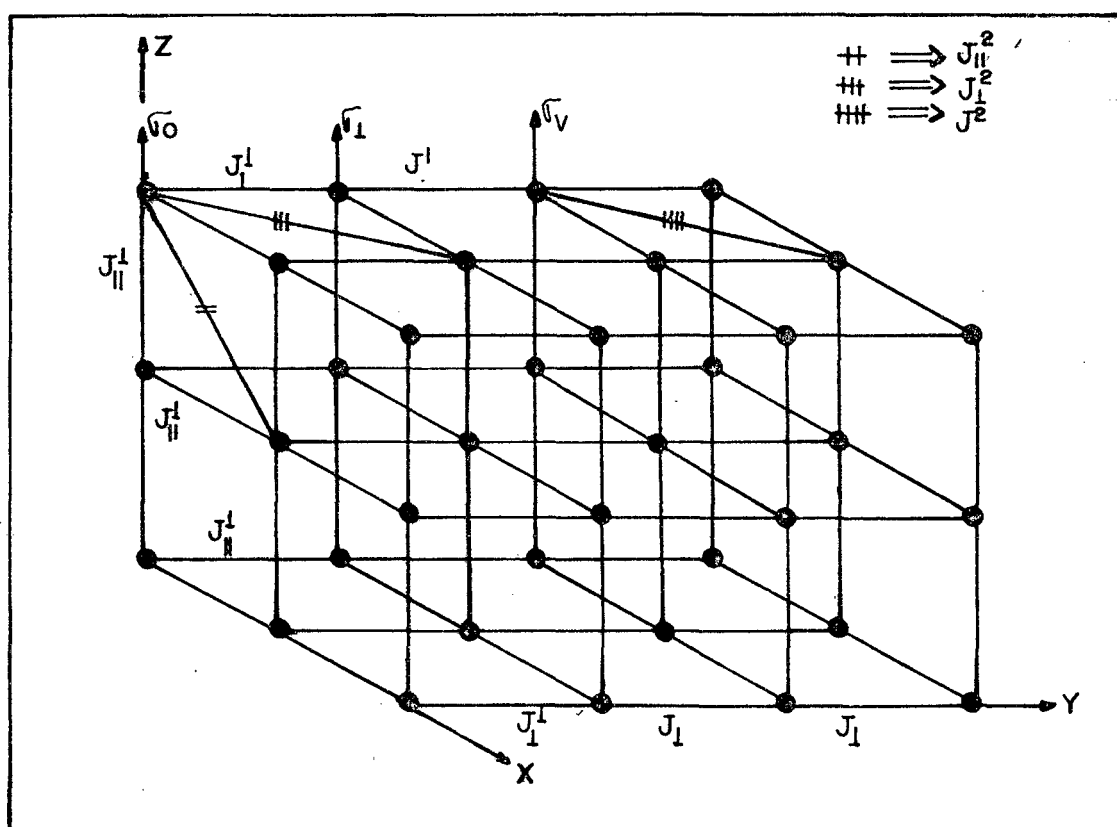


Figura 7 - Esquema da estrutura cúbica simples. A superfície é paralela ao plano (X , Z) .

4.2 - Formalismo das Funções de Green para um Ferromagneto Semi-Infinito.

Levando-se em conta o Hamiltoniano descrito pela Eq. (3.21), juntamente com as Eqs. (3.24) obtemos para $S = 1/2$ que

$$\left\{ \omega - g\mu_B H_0 - 2\tilde{D}\langle S_l^z \rangle - 2 \sum_{\vec{j}} J^1(\vec{l}-\vec{j}) \langle S_j^z \rangle - 2 \sum_{\vec{k}} J^2(\vec{l}-\vec{k}) \langle S_k^z \rangle \right\} G_{\vec{l}\vec{m}}^-(\omega) + 2 \langle S_l^z \rangle \left\{ \sum_{\vec{j}} J^1(\vec{l}-\vec{j}) G_{\vec{j}\vec{m}}^-(\omega) + \sum_{\vec{k}} J^2(\vec{l}-\vec{k}) G_{\vec{k}\vec{m}}^-(\omega) \right\} = \langle S_l^z \rangle / \pi \delta_{(4.1)}$$

$$\text{onde } \tilde{D} = \begin{cases} D_s, & \text{se } l=0 \\ D, & \text{se } l \neq 0 \end{cases}$$

onde as seguintes aproximações foram utilizadas:

$$\langle\langle S_{\vec{k}}^z S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_{\omega} \approx \langle S_{\vec{k}}^z \rangle \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_{\omega}, \quad (4.2a)$$

que é a aproximação RPA e

$$\langle S_{\vec{l}}^z \rangle = \langle S_{\lambda_{\parallel}, \lambda_{\perp}} \rangle = \langle S_{\vec{l}}^z \rangle, \quad (4.2b)$$

onde estamos assumindo que a magnetização média por íon é a mesma para todos os íons situados num mesmo plano.

Agora não temos mais a simetria translacional em três dimensões que assumimos para o cristal infinito, visto no capítulo 3. No caso do modelo de um cristal semi-infinito a simetria de translação bidimensional é garantida, permitindo-nos expressar a função de Green $G_{\vec{f}\vec{g}}^{\rightarrow\rightarrow}(\omega)$, e a constante de intercâmbio $J_{\vec{f}\vec{g}}^{\rightarrow\rightarrow}$ em termos de suas componentes de Fourier paralelas ao plano da superfície,

ou seja:

$$G_{\vec{f}\vec{g}}(\omega) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_{//}} \tilde{G}_{fg}(\vec{K}_{//}, \omega) \exp[i\vec{K}_{//} \cdot (\vec{f}_{//} - \vec{g}_{//})], \quad (4.3a)$$

$$J_{\vec{f}\vec{g}}(\omega) = J_{\vec{f}_{//} - \vec{g}_{//}, fg} = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_{//}} J_{fg}(\vec{K}_{//}) \exp[i\vec{K}_{//} \cdot (\vec{f}_{//} - \vec{g}_{//})]. \quad (4.3b)$$

onde N_s é o número de átomos na superfície. Levando-se essas últimas expressões na Eq.(4.1) é possível mostrar que:

$$\begin{aligned} & \{ \omega - g\mu_B H_0 - 2\tilde{D}\langle S_x^z \rangle - 2 \sum_j J_{xj}(0) \langle S_j^z \rangle - \\ & - 2 \sum_k J_{lk}^2(0) \langle S_k^z \rangle \} \tilde{G}_{lm}(\vec{K}_{//}, \omega) + 2 \langle S_l^z \rangle \{ \sum_j J_{lj}^1(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{jm}(\vec{K}_{//}, \omega) + \\ & + \sum_k J_{lk}^2(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{km}(\vec{K}_{//}, \omega) \} = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\hbar} \tilde{\delta}_{lm}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

As Eqs.(4.4) podem ser escritas na seguinte forma matricial

$$[\tilde{\Omega} \cdot \tilde{G}]_{lm} = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\hbar} \tilde{\delta}_{lm}, \quad (4.5a)$$

onde

$$\bar{\Omega}_{li} = (\omega 1 - \mathcal{H}^{\text{eff}})_{li} = \omega \delta_{li} - \mathcal{H}_{li}^{\text{eff}}, \quad \text{OK} \quad (4.5b)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{li}^{\text{eff}} = & \left[(g \mu_B H_0 + 2\tilde{D} \langle S_l^z \rangle + 2 \sum_j J_{ij}^1(0) \langle S_j^z \rangle + 2 \sum_k J_{ik}^2(0) \langle S_k^z \rangle) \delta_{li} - \right. \\ & \left. - 2 \langle S_l^z \rangle \left(\sum_j J_{lj}^1(\bar{K}_{//}) \delta_{ji} + \sum_k J_{lk}^2(\bar{K}_{//}, \omega) \delta_{ki} \right) \right]. \quad \text{OK} \quad (4.5c) \end{aligned}$$

Uma outra alternativa é obtermos equações análogas às Eqs.(4.5) em termos de variáveis reduzidas, definidas abaixo:

$$\Omega \cdot \tilde{g} = \frac{\sigma}{2\pi}, \quad \text{OK} \quad (4.6a)$$

onde

$$\begin{aligned} \Omega_{li}(\bar{K}_{//}, \nu) = & \frac{1}{\alpha} \left\{ \left[\nu - (h + \tilde{d} \sigma_l + \sum_j \varepsilon_{ij}^1(0) \sigma_j + \sum_k \varepsilon_{ik}^2(0) \sigma_k) \right] \delta_{li} + \right. \\ & \left. + \sigma_l \left(\sum_j \varepsilon_{lj}^1(\bar{K}_{//}) \delta_{ji} + \sum_k \varepsilon_{lk}^2(\bar{K}_{//}) \delta_{ki} \right) \right\} \quad \text{OK} \quad (4.6b) \end{aligned}$$

e

$$\varepsilon_{ij}(\bar{K}_{//}) = \gamma \varepsilon_{ij}^{\gamma}(\bar{K}_{//}), \quad \text{OK} \quad (4.6c)$$

sendo $\gamma(\vec{K}_{//})$ o fator de estrutura apropriado para cada uma das interações e z o número de vizinhos correspondente. Na expressão anterior os índices que aparecem designam o conjunto de planos (010). Por exemplo, $l = 0$ representa o plano da superfície, $l = 1$ o segundo plano, etc...

As seguintes variáveis reduzidas foram introduzidas:

$$\gamma = \frac{\omega}{2J^1 \langle S_V^z \rangle}, \quad h = \frac{g\mu_B H_0}{2J^1 \langle S_V \rangle}, \quad G_l = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\langle S_V^z \rangle}$$

$$E_{k,l}^{1,2} = \frac{J_{k,l}^{1,2}}{J^1}, \quad \tilde{g}_{im} = J^1 \tilde{G}_{im}, \quad \tilde{D} = \frac{\tilde{D}}{J^1} \quad (4.7)$$

$$\tilde{D} = \begin{cases} D_s & \text{se } l=0 \\ D & \text{se } l \neq 0 \end{cases}, \quad \alpha = 1 + z \epsilon \gamma(\vec{K}_{//}).$$

As grandezas $\langle S_V^z \rangle$, J^1 e J^2 são as mesmas introduzidas no capítulo anterior.

Abaixo apresentamos explicitamente os fatores de estrutura de interesse para uma rede cúbica simples:

Para as interações entre primeiros vizinhos no plano ($z = 4$), e interações entre segundos vizinhos interplanos ($z = 4$) temos que

$$\gamma(\vec{K}_{//}) = \frac{1}{2} [\cos(aK_x) + \cos(aK_z)] \quad (4.8a)$$

No caso de segundos vizinhos dentro do mesmo plano ($z = 4$) temos que

$$\gamma'(\vec{K}_{//}) = [\cos(aK_x) \cos(aK_z)] \quad (4.8b)$$

sendo \underline{a} , o parâmetro da rede.

Estamos admitindo que,

$$G_l = 1 \quad \text{se } l \geq 2$$

e (4.9)

$$E_{ij}^{1,2} = 0 \quad \text{se } |i-j| > 1.$$

Escrevendo-se explicitamente os elementos $E_{ij}^{1,2}(\vec{k}_{||})$ da Eq.(4.6c) teremos

$$E_{ij}^1(\vec{k}_{||}) = \begin{cases} \gamma \gamma(\vec{k}_{||}) \cdot \begin{cases} E_{||}^1, & i=j=0 \\ 1, & i=j \neq 0 \end{cases} \\ E_{\perp}^1 \text{ se } i \neq j \text{ e } (i,j) = (0,1) \text{ ou } (1,0) \\ 1 \text{ se } i \neq j \text{ e } i, j \geq 1 \end{cases}$$

$$E_{ij}^2(\vec{k}_{||}) = \gamma \gamma(\vec{k}_{||}) \cdot \begin{cases} E_{||}^2 \text{ se } i=j=0 \\ E \text{ se } i=j \neq 0 \end{cases} \quad (4.10a)$$

$$E_{ij}^2(\vec{k}_{||}) = \gamma \gamma(\vec{k}_{||}) \cdot \begin{cases} E_{\perp}^2 \text{ se } i \neq j \text{ e } (i,j) = \begin{cases} (0,1) \\ \text{ou} \\ (1,0) \end{cases} \\ E \text{ se } i \neq j \text{ e } i, j \geq 1 \end{cases}$$

onde definimos que:

$$E_{||}^{1,2} = \frac{J_{||}^{1,2}}{J^1}, \quad E_{\perp}^{1,2} = \frac{J_{\perp}^{1,2}}{J^1} \quad \text{e} \quad \tilde{d} = \frac{\tilde{D}}{J^1} \quad (4.10b)$$

Podemos agora escrever explicitamente os elementos de matriz Ω a partir das considerações anteriores. Os elementos não diagonais são dados por:

$$\Omega_{ij} = \beta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } |i-j| > 1 \\ 1 & \text{se } i \geq 2, j \geq 1 \text{ e } |i-j| = 1 \\ \sigma_1 & \text{se } i=1 \text{ e } j=2 \\ \frac{[\varepsilon_1^1 + \zeta \varepsilon_1^2 \gamma(\bar{k}_{//})]}{\alpha} \cdot \begin{cases} \sigma_1 & \text{se } (i,j) = (1,0) \\ \sigma_0 & \text{se } (i,j) = (0,1) \end{cases} \end{cases} \quad (4.11a)$$

Analogamente, temos os seguintes elementos diagonais:

$$\Omega_{33} = \frac{1}{\alpha} \left\{ v-h-d-2-\zeta(1+3\varepsilon) + \zeta [\gamma(\bar{k}_{//}) + \varepsilon \gamma'(\bar{k}_{//})] \right\} \cdot \quad (4.11b)$$

Definindo-se o parâmetro,

$$2t = \frac{1}{\alpha} \left\{ v-h-d-2-\zeta(1+3\varepsilon) + \zeta [\gamma(\bar{k}_{//}) + \varepsilon \gamma'(\bar{k}_{//})] \right\}, \quad (4.11c)$$

podemos escrever então que

$$\Omega_{33} = 2t \cdot \quad (4.11d)$$

Temos ainda que

$$\Omega_{22} = 2t + \alpha_{22}, \quad (4.11e)$$

onde

$$\alpha_{22} = \frac{(1-\sigma_1)(1+\gamma\varepsilon)}{\alpha} \quad (4.11f)$$

e

$$\Omega_{11} = 2t + \alpha_{11} \quad , \quad (4.11g)$$

sendo

$$\begin{aligned} \alpha_{11} = \frac{1}{\alpha} \left\{ 1 + (1-\sigma_1) \left[\gamma + d - \gamma \gamma(\bar{K}_{11}) - \gamma \varepsilon \gamma'(\bar{K}_{11}) \right] + \right. \\ \left. + \gamma \varepsilon (2 - \sigma_1) - \sigma_0 (\varepsilon_{\perp}^1 + \gamma \varepsilon_{\perp}^2) \right\} \quad (4.11h) \end{aligned}$$

e, finalmente,

$$\Omega_{00} = 2t + \alpha_{00} \quad , \quad (4.11i)$$

com

$$\begin{aligned} \alpha_{00} = \frac{1}{\alpha} \left\{ 2 + \gamma \left[(1 + 3\varepsilon) - (\varepsilon_{11}^1 + \varepsilon_{11}^2) \sigma_0 - \gamma(\bar{K}_{11}) \cdot (1 - \varepsilon_{11}^1 \sigma_0) - \right. \right. \\ \left. \left. - \gamma'(\bar{K}_{11}) (\varepsilon - \varepsilon_{11}^2 \sigma_0) \right] + (d - d_s \sigma_0) - (\varepsilon_{\perp}^1 + \gamma \varepsilon_{\perp}^2) \sigma_1 \right\} \quad (4.11j) \end{aligned}$$

A matriz fica então na forma:

$$\Omega = \begin{pmatrix} 2t + \alpha_{00} & \beta_{01} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \beta_{10} & 2t + \alpha_{11} & \beta_{12} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \beta_{21} & 2t + \alpha_{22} & 1 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 1 & 2t & 1 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2t & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

4.3 - Cálculo da Magnetização Superficial

Conforme vimos no capítulo anterior, a função de correlação entre dois operadores pode ser expressa em termos da função densidade espectral:

$$\langle B(t') A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (4.13)$$

Definindo-se

$$B(t') = S_{\bar{m}}^{-}(t') \quad e \quad A(t) = S_{\bar{l}}^{+}(t) \quad , \quad (4.14)$$

temos que

$$\langle S_{\vec{m}}^-(t') S_{\vec{l}}^+(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega . \quad (4.15a)$$

Fazendo-se $t = t'$, temos no equilíbrio térmico

$$\langle S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^+ \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) d\omega . \quad (4.15b)$$

Vimos ainda que

$$J(\omega) = \frac{i}{(e^{\beta\omega} - 1)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G_{\vec{l}\vec{m}}^r(\omega + i\varepsilon) - G_{\vec{l}\vec{m}}^a(\omega - i\varepsilon) \right\} \quad (4.16a)$$

Utilizando-se as seguintes representações para as funções de Green⁽¹⁾:

$$G^r(E) = \frac{1}{2\pi i} P \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\beta\omega} - 1) J(\omega) \frac{d\omega}{(E - \omega)} - \frac{i}{2} (e^{\beta E} - 1) J(E) , \quad (4.16b)$$

e

$$G^a(E) = \frac{1}{2\pi i} P \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\beta\omega} - 1) J(\omega) \frac{d\omega}{(E - \omega)} - \frac{i}{2} (e^{\beta E} - 1) J(E) , \quad (4.16c)$$

temos que

$$G^r(E) - G^a(E) = -i(e^{\beta E} - 1) J(E) \quad (4.16d)$$

e

$$2\text{Im } G^r(E) = -(e^{\beta E} - 1) J(E) \quad (4.16e)$$

então

$$G^r(\omega+i\varepsilon) - G^a(\omega-i\varepsilon) = 2i \text{Im } G^r(\omega+i\varepsilon) \quad (4.16f)$$

Substituindo-se a última relação na Eq.(4.16 a) temos que

$$J(\omega) = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\text{Im } G_{\lambda\bar{m}}^r(\omega+i\varepsilon)}{(e^{\beta\omega} - 1)} \quad (4.16g)$$

Finalmente obtemos

$$\langle S_{\lambda}^{-} S_{\lambda}^{+} \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im} (G_{\lambda\bar{\lambda}}^r(\omega+i\varepsilon))}{(e^{\beta\omega} - 1)} d\omega \quad (4.17a)$$

Porém,

$$G_{\vec{l}\vec{m}}^-(\omega) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_{//}} G_{lm}(\vec{K}_{//}, \omega) e^{i\vec{K}_{//}(\vec{l}_{//} - \vec{m}_{//})}, \quad (4.17b)$$

logo

$$\langle S_{\vec{l}}^- S_{\vec{l}}^+ \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im} \left[\frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_{//}} G_{ll}^r(\vec{K}_{//}, \omega + i\varepsilon) \right] d\omega. \quad (4.17c)$$

Podemos relacionar a função de correlação da equação anterior com $\langle S_{\vec{l}}^z \rangle$, obtendo desta forma um conjunto de equações a copladas para as magnetizações dos diferentes planos.

Levando-se em conta as relações de comutação⁽³⁾ para os operadores de spin, obtem-se:

$$S_{\vec{l}}^- S_{\vec{l}}^+ = S(S+1) - S_{\vec{l}}^z - (S_{\vec{l}}^z)^2. \quad (4.18a)$$

Lembramos ainda que a seguinte indentidade é válida para qualquer valor de S:

$$\prod_{r=-S}^{r=+S} (S_{\vec{l}}^z - r) = 0. \quad (4.18b)$$

No caso particular de $S = 1/2$, obtemos a seguinte equação:

$$\langle S_{\vec{l}}^- S_{\vec{l}}^+ \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_{\vec{l}}^z \rangle . \quad (4.18c)$$

Levando-se esse resultado na Eq.(4.17 c) e lembrando que $\langle S_{\vec{l}}^z \rangle = \langle S_{\vec{l}}^z \rangle$

$$\frac{1}{2} - \langle S_{\vec{l}}^z \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im} \left[\frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_{//}} G_{ll}^r(\vec{k}_{//}, \omega + i\varepsilon) \right] d\omega \quad (4.18d)$$

Para uma estrutura cúbica simples com parâmetro de rede a podemos escrever que:

$$\langle S_{\vec{l}}^- S_{\vec{l}}^+ \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int \frac{d^2 \vec{k}_{//} \text{Im} [G_{ll}^r(\vec{k}_{//}, \omega + i\varepsilon)]}{(e^{\beta\omega} - 1)} , \quad (4.18e)$$

ou ainda

$$\frac{1}{2} - \langle S_{\vec{l}}^z \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int \frac{d^2 \vec{k}_{//} \text{Im} [G_{ll}^r(\vec{k}_{//}, \omega + i\varepsilon)]}{(e^{\beta\omega} - 1)} . \quad (4.18f)$$

Da Eq.(4.5 a) tiramos que

$$\frac{1}{2} - \langle S_{\vec{l}}^z \rangle = -2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int \frac{d^2 \vec{k}_{//} \text{Im} \{ \Omega^{-1}(\vec{k}_{//}, \omega + i\varepsilon) \}}{(e^{\beta\omega} - 1)} \cdot \frac{\langle S_{\vec{l}}^z \rangle}{\pi} \quad (4.18g)$$

Definindo-se a função

$$\bar{\Phi}_l(s) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int \frac{d^2 \vec{k}_\parallel \operatorname{Im} \{ \Omega^{-1}(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon) \}}{(e^{\beta\omega} - 1)} \Big|_{ll}, \quad (4.18h)$$

a magnetização no plano l , é dada pela expressão abaixo, válida para $S = 1/2$:

$$\langle S_l^z \rangle = \frac{1/2}{1 + 2\bar{\Phi}_l(s)} \quad (4.18i)$$

No caso em que o spin é diferente de $1/2$, podemos seguir o mesmo procedimento apresentado no capítulo anterior, e obtemos a seguinte expressão para a magnetização por íon do plano l :

$$\langle S_l^z \rangle = \frac{[S - \bar{\Phi}_l(s)] [1 + \bar{\Phi}_l(s)]^{2S+1} + [S + 1 + \bar{\Phi}_l(s)] [\bar{\Phi}_l(s)]^{2S+1}}{[1 + \bar{\Phi}_l(s)]^{2S+1} - [\bar{\Phi}_l(s)]^{2S+1}}, \quad (4.19)$$

onde $\bar{\Phi}_l(s)$ é ainda definido pela Eq.(4.18 h).

Precisamos determinar agora o elemento de matriz Ω_{ll}^{-1} , que aparece nas expressões de $\bar{\Phi}_l(s)$. Partindo-se da definição de matriz inversa,

$$(\Omega^{-1})_{im} = \frac{\operatorname{Adj} \Omega_{lm}}{\operatorname{Det} \Omega}, \quad (4.20)$$

e chamando-se $D_N = \text{Det } \Omega$, D_{N-p} ao determinante da matriz Ω , retirando-se as primeiras p filas e colunas, temos as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{aligned}
 D_N &= (2t + \alpha_{00}) D_{N-1} - \beta_{01} \beta_{10} D_{N-2}, \\
 D_{N-1} &= (2t + \alpha_{11}) D_{N-2} - \beta_{12} \beta_{21}, \\
 D_{N-2} &= (2t + \alpha_{22}) D_{N-3} - D_{N-4}, \\
 D_{N-3} &= (2t) D_{N-4} - D_{N-5}, \\
 &\dots \\
 D_{N-p} &= (2t) D_{N-(p+1)} - D_{N-(p+2)}, \text{ se } p > 2.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Para $p > 2$ os determinantes D_{N-p} tem a forma não perturbada

$$\begin{vmatrix}
 2t & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\
 1 & 2t & 1 & 0 & 0 & \cdot \\
 0 & 1 & 2t & 1 & 0 & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot
 \end{vmatrix} \tag{4.22}$$

e são na realidade os polinômios de Tchebishev de 2ª espécie⁽²⁸⁾.

Temos então para $p > 2$,

$$D_{N-p}(t) = U_{N-p}(t) \tag{4.23a}$$

Esses polinômios podem ser escritos na seguinte forma:

$$U_n(t) = \frac{\text{sen}[(n+1) \arccos(t)]}{\text{sen}[\arccos(t)]} \quad (4.23b)$$

e as raízes reais desse polinômio de grau n estão localizadas no intervalo $[-1, +1]$. Temos então que

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{\text{Adj } \Omega_{00}}{\text{Det } \Omega} \quad , (4.24a)$$

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{D_{N-1}}{D_N} = \frac{1}{\frac{D_N}{D_{N-1}}} \quad , (4.24b)$$

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{1}{(2t + \alpha_{00}) - \frac{\beta_{10} \beta_{01}}{(2t + \alpha_{11}) \frac{D_{N-2}}{D_{N-2}} - \beta_{12} \beta_{21} \frac{D_{N-3}}{D_{N-2}}} \quad , (4.24c)$$

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{1}{2t + \alpha_{00} - \frac{\beta_{10} \beta_{01}}{2t + \alpha_{11} - \frac{\beta_{12} \beta_{21}}{(2t + \alpha_{22}) - \frac{D_{N-4}}{D_{N-3}}}} \quad (4.24d)$$

Para $p > 2$, definimos o parâmetro

$$\xi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_{N-(p+1)}(t)}{D_{N-p}(t)}, \quad (4.25a)$$

Como

$$D_{N-(p)} = 2t D_{N-(p+1)} - D_{N-(p+2)}, \quad (4.25b)$$

então

$$\xi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2t \frac{D_{N-(p+1)}}{D_{N-(p+1)}} - \frac{D_{N-(p+2)}}{D_{N-(p+1)}}}. \quad (4.25c)$$

Portanto, podemos escrever que

$$\xi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2t - \frac{1}{2t - \frac{1}{2t - \frac{1}{\ddots - \frac{D_{N-(p+N+1)}}{D_{N-(p+N)}}}}}}}, \quad (4.25d)$$

ou seja,

$$\xi = \frac{1}{2t - \xi}, \quad (4.25e)$$

que é equivalente a

$$\xi^2 - 2t\xi + 1 = 0 \quad (4.25f)$$

ou

$$\xi + \xi^{-1} = 2t \quad (4.25g)$$

Finalmente podemos escrever que

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{1}{(2t + \alpha_{00}) - \frac{\beta_{10} \beta_{01}}{(2t + \alpha_{11}) - \frac{\beta_{12} \beta_{21}}{(2t + \alpha_{22}) - \xi}}} \quad (4.26)$$

Analogamente, o elemento de matriz $(\Omega^{-1})_{11}$ é dado pela seguinte expressão:

$$(\Omega^{-1})_{11} = \frac{1}{(2t + \alpha_{11}) - \frac{\beta_{01} \beta_{10}}{(2t + \alpha_{00}) - \frac{\beta_{12} \beta_{21}}{(2t + \alpha_{22}) - \xi}}} \quad (4.27)$$

A partir das equações anteriores, os elementos de matriz $(\Omega^{-1})_{ll}$, podem ser expressos na seguinte forma geral:

$$(\Omega^{-1})_{ll} = \frac{N_l(\xi)}{D(\xi)}, \quad (4.28)$$

onde

$$D(\xi) = 1 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + a_3 \xi^3 + a_4 \xi^4 + a_5 \xi^5, \quad (4.29a)$$

$$N_0(\xi) = \xi \left[(\xi^2 + 1 + \alpha_{11} \xi)(1 + \alpha_{22} \xi) - \beta_{12} \beta_{21} \xi^2 \right] \quad (4.29b)$$

e

$$N_1(\xi) = \xi (1 + \alpha_{00} \xi + \xi^2)(1 + \alpha_{22} \xi), \quad (4.29c)$$

Os coeficientes a_i , $i = 0$ a 5 , são dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} a_0 &= 1 \\ a_1 &= (\alpha_{00} + \alpha_{11} + \alpha_{22}) \\ a_2 &= (2 + \alpha_{00} \alpha_{11} + \alpha_{11}(\alpha_{00} + \alpha_{22}) - \beta_{10} \beta_{01} - \beta_{12} \beta_{21}), \\ a_3 &= \alpha_{00} + \alpha_{11} + 2\alpha_{22} + \alpha_{00} \alpha_{11} \alpha_{22} - \beta_{12} \beta_{21} \alpha_{00} - \beta_{10} \beta_{01} \alpha_{22}, \\ a_4 &= 1 + \alpha_{22} (\alpha_{00} + \alpha_{11}) - \beta_{12} \beta_{21}, \\ a_5 &= \alpha_{22}. \end{aligned} \quad (4.29d)$$

As equações (4.6) e (4.28) mostram que os polos da função de Green são dados pelas raízes do polinômio $D(\xi)$. A fração continuada $\xi(t)$, definida pela Eq.(4.25 d) apresenta as seguintes raízes, para t real e $|t| < 1$:

$$\xi(t) = t \pm i(1-t^2)^{1/2} \quad (4.30)$$

Neste caso as raízes são complexas no intervalo $|t| < 1$. A função $\xi(t)$, e em consequência $\Omega_{ll}^{-1}(\xi)$, tem um corte para $|t| \leq 1$. Precisamos desta forma considerar a continuação analítica⁽⁵⁾ para t e ξ complexos. Para garantir que $J(w)$ seja positivo é necessário, de acordo com a Eq.(4.15b), que $\text{Im } G^\Omega$ seja negativo. Portanto, devemos escolher a solução correspondente ao ramo inferior.

Se $|t| > 1$, pode-se mostrar que a fração continuada definida pela Eq.(4.25 d), converge à raiz real que tem menor valor absoluto⁽¹⁹⁾, implicando então que $|\xi| < 1$. Como veremos adiante, nesse intervalo da variável t , os zeros de $D(\xi)$ correspondem às frequências dos magnons localizados na superfície.

Para $|t| < 1$, podemos escrever que $t = -\cos(K_y a)$, e levando-se esta expressão na Eq. (4.11c) verificamos que a relação de dispersão obtida é a mesma que a relação de dispersão do sistema infinito, dada no capítulo 3.

A magnetização por spin no plano \perp , para qualquer valor de S , é dada pela Eq.(4.19) . .

Estas equações devem ser resolvidas autoconsistentemente para cada valor de $\langle S_\lambda^z \rangle$. Em nosso problema, a partir do terceiro plano ($l=2$) consideramos que $\langle S_\lambda^z \rangle = \langle S_V^z \rangle$, onde $\langle S_V^z \rangle$ representa a magnetização de volume. Temos portanto que resolver um sistema de duas equações acopladas para $\langle S_0^z \rangle$ e $\langle S_1^z \rangle$, conhecida a magnetização de volume para cada valor da temperatura. O cálculo da magnetização de volume já foi considerado no capítulo 3.

Na expressão de $\Phi_l(s)$, dada pela Eq.(4.18 h), temos que calcular a seguinte integral:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(-\frac{a^2}{2\pi^3} \right) \int d\vec{k}_\parallel \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega \operatorname{Im}[\Omega_{ll}^{-1}(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon)]}{(e^{\beta\omega} - 1)} \right] \quad (4.31)$$

Lembrando que Ω_{ll}^{-1} tem um corte para $|t| \leq 1$, e eventualmente polos isolados para $|t| > 1$, caso existam raízes $\{\alpha\}$ do polinômio $D(\{t\})$, é conveniente separar a integral acima em três intervalos, ou seja,

$$\Phi_l(s) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(-\frac{a^2}{2\pi^3} \right) \int d\vec{k}_\parallel \left[\int_{-\infty}^{-1} d\omega q(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon) + \int_{-1}^{+1} d\omega q(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon) + \int_1^{+\infty} d\omega q(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon) \right], \quad (4.32)$$

sendo

$$q(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon) = \frac{[\Omega^{-1}(\vec{k}_\parallel, \omega + i\varepsilon)]_{ll}}{(e^{\beta\omega} - 1)}$$

Sabemos que para calcularmos o valor da magnetização por íon do plano l , $\langle S_l^z \rangle$, precisamos determinar a função $\Phi_l(S)$, Eq. (4.18 h), que depende dos elementos de matriz $\Omega_{ll}^{-1}(\vec{K}_l, \omega)$. Entretanto, no desenvolvimento efetuado anteriormente obtivemos esses elementos em função das variáveis reduzidas definidas pelas Eqs. (4.7). Vamos então escrever a função Ω_{ll}^{-1} na forma desejada. Levando-se em conta que

$$\Omega_{ll}(\vec{K}_l, \omega) = 2J^1 \langle S_v^z \rangle \Omega_{ll}(\vec{K}_l, \nu), \quad (4.33)$$

com

$$\omega = 2J^1 \langle S_v^z \rangle \nu \quad (4.34)$$

então

$$\Phi_l(S) = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \left(\frac{q}{2\pi} \right)^2 \left[\frac{d^2 \vec{K}_l}{\alpha (e^{\beta \omega(\nu)} - 1)} \text{Im} [\Omega^{-1}(\vec{K}_l, \nu + i\epsilon)]_{ll} \right] \quad (4.35)$$

Para cada valor de \vec{K}_l , podemos escrever de acordo com a Eq. (4.11c) que

$$2\alpha dt = d\nu \quad (4.36)$$

então

$$\Phi_{\ell}(\xi) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{2}{\pi} \int d\vec{k} \left(\frac{g}{2\pi} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\text{Im}[\Omega^{-1}(\vec{k}_{//}, t+i\varepsilon)]_{\ell\ell}}{(e^{\beta\omega(t)} - 1)} \right].$$

(4.37)

É possível de se mostrar que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im}[\Omega^{-1}(\xi(t+i\varepsilon))]_{\ell\ell} = \pi \sum_{\alpha} \frac{N_{\ell}(\xi_{\alpha})}{D'(\xi_{\alpha})} \delta(\xi - \xi_{\alpha})$$

(4.38)

onde ξ_{α} são as raízes do polinômio $D(\xi)$ e $D'(\xi)$ é a derivada do polinômio $D(\xi)$ calculada no ponto ξ . Lembrando que

$$2t = \xi + \xi^{-1}, \quad (4.39)$$

podemos escrever que

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_l(s) = & \left(-\frac{2}{\pi}\right) \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \int d\vec{k}_\nu \left[\frac{1}{2} \int_0^1 d\xi \left(\frac{1-\xi^2}{\xi^2} \right) \frac{\text{Im} [\Omega^{-1}(\vec{k}_\nu, \xi(t+i\varepsilon))]_{ll}}{(e^{\beta\omega} - 1)} \right. \right. \\ & + \left. \frac{1}{2} \int_{-1}^0 d\xi \left(\frac{1-\xi^2}{\xi^2} \right) \frac{\text{Im} [\Omega^{-1}(\vec{k}_\nu, \xi(t+i\varepsilon))]_{ll}}{(e^{\beta\omega} - 1)} + \left. \int_{-1}^{+1} dt \frac{\text{Im} [\Omega^{-1}(\vec{k}_\nu, t+i\varepsilon)]_{ll}}{(e^{\beta\omega} - 1)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.40a)$$

que com a Eq.(4.39) se reduz à seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_l(s) = & -\left(\frac{2}{\pi}\right) \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d\vec{k}_\nu \left[\int_{-1}^1 dt \frac{\text{Im} [\Omega^{-1}(\vec{k}_\nu, t+i\varepsilon)]_{ll}}{(e^{\beta\omega} - 1)} + \right. \\ & \left. + \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{N_l(\xi_{\alpha})}{D'(\xi_{\alpha})} \cdot \frac{(1 - \xi_{\alpha}^2)}{\xi_{\alpha}^2 (e^{\beta\omega(\xi_{\alpha})} - 1)} \right] \end{aligned} \quad (4.40b)$$

Assim para calcularmos a magnetização relativa por íon em cada plano basta resolver o sistema de equação dado abaixo:

$$\sigma_l = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\langle S_V^z \rangle} \quad (4.41)$$

sendo que $\langle S_l^z \rangle$ é dada pela Eq. (3.36).

4.4 - Propriedades das Funções de Green ⁽⁵⁾

Vamos estudar a equação homogênea de autovalores as sociada à Eq. (4.6a),

$$(h^{\text{eff}} - \nu) |X\rangle = 0 . \quad (4.42)$$

Fica evidente que $|X\rangle$ é um auto estado do Hamiltoniano efetivo, e que ν é o autovalor correspondente. Levando-se em conta que os au tovalores de h^{eff} são reais, é fácil verificar que a matriz

$$g(\nu) = \frac{\alpha}{2\pi} \sum_n \frac{|X_n\rangle \langle X_n|}{(\nu - \nu_n)} G , \quad (4.43)$$

satisfaz à Eq.(4.6a) desde que os autovetores $\{|X_n\rangle\}$ forme um sistema ortonormal completo. ou seja,

$$\sum_n |X_n\rangle \langle X_n| = 1 . \quad (4.44)$$

Substituindo a Eq. (4.43) na Eq. (4.42) temos que

$$\frac{1}{\alpha} [(\nu - h^{\text{eff}})] \frac{\alpha}{2\pi} \sum_n \frac{|X_n\rangle \langle X_n| G}{(\nu - \nu_n)} = \frac{G}{2\pi} \sum_n \frac{(\nu - \nu_n)}{(\nu - \nu_n)} = \frac{G}{2\pi} . \quad (4.45)$$

Portanto, a função de Green dada pela Eq.(4.43) satisfaz à Eq.(4.6a).
Desta forma, os polos da função de Green são os autovalores da energia.

gia do Hamiltoniano efetivo.

Vamos mostrar agora que os elementos g_{lm} da matriz \tilde{g} , são proporcionais às transformadas de Fourier das amplitudes de probabilidade de se achar a excitação $|X\rangle$ localizada no ponto l , no instante t , se no ponto m a amplitude era 1, no instante zero. Para verificar isto, vamos considerar a equação de movimento para $|X(t)\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |X(t)\rangle = h^{\text{eff}} |X(t)\rangle, \quad (4.46)$$

cuja solução pode ser escrita na forma,

$$|X(t)\rangle = e^{-i h^{\text{eff}} t / \hbar} |X(0)\rangle \quad (4.47)$$

O vetor $|X(t)\rangle$ pode ser pensado como sendo uma matriz coluna, cujos elementos são dados por $\langle l | X(t) \rangle$, ou seja, $\langle l | X(t) \rangle$ representa a projeção do vetor $|X(t)\rangle$ no plano l da rede. Podemos então escrever que:

$$\langle l | X(t) \rangle = \sum_n \langle l | X_n \rangle \langle X_n | e^{-i h^{\text{eff}} t / \hbar} | X(0) \rangle, \quad (4.48)$$

onde usamos o fato que os autovetores de h^{eff} formam um conjunto ortogonal completo. Desta forma temos que:

$$\langle l | X(t) \rangle = \sum_n \langle l | X_n \rangle e^{-i \nu_n t} \langle X_n | X(0) \rangle. \quad (4.49)$$

Como no instante $t = 0$ a excitação está localizada no plano m com amplitude 1, podemos escrever que $|X(0)\rangle = |m\rangle$, ou seja,

$$\langle l|X(t)\rangle = \sum_n e^{-i\nu_n t} \langle l|X_n\rangle \langle X_n|m\rangle. \quad (4.50)$$

A transformada de Fourier da amplitude de probabilidade $\langle l|X(t)\rangle$ será então

$$\mathcal{F}\{\langle l|X(t)\rangle\} = \sum_n \langle l|X_n\rangle \langle X_n|m\rangle \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} e^{-i\nu_n t} e^{i(\nu+i\varepsilon)t} dt, \quad (4.51)$$

onde o fator ε foi introduzido para garantir a convergência da integral para $t > 0$. Portanto, temos que

$$\mathcal{F}\{\langle l|X(t)\rangle\} = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{\langle l|X_n\rangle \langle m|X_n\rangle^*}{\nu - \nu_n + i\varepsilon}. \quad (4.52)$$

Escrevendo-se os elementos de matriz da Eq.(4.43) temos que:

$$g(\nu+i\varepsilon)_{lm} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\alpha}{2\pi} \sum_n \langle l|X_n\rangle \langle X_n|m\rangle \frac{G_m}{\nu - \nu_n + i\varepsilon} \quad (4.53)$$

ou ainda

$$g(\nu+i\varepsilon)_{lm} = \frac{\alpha}{2\pi} G_m \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_n \frac{\langle l|X_n\rangle \langle m|X_n\rangle^*}{\nu - \nu_n + i\varepsilon}. \quad (4.54)$$

Comparando-se as equações (4.52) e (4.54) , vemos que os elementos de matriz g_{lm} são proporcionais às transformadas de Fourier das amplitudes de probabilidade de se achar a excitação $|X(t)\rangle$ localizada no plano l da rede.

4.5 - Interpretação do Parâmetro ξ ⁽⁵⁾

Procuraremos dar um significado físico para o parâmetro ξ . Considerando um elemento não diagonal da Eq.(4.5a) temos que:

$$(\Omega \tilde{g})_{lm} = 0 \quad \text{se } l \neq m \quad (4.55)$$

ou seja, $\sum_i \Omega_{li} g_{im} = 0$. Escrevendo-se explicitamente esta soma temos então

$$-\Omega_{l,l-1} g_{l-1,m} + \Omega_{ll} g_{lm} + \Omega_{l,l+1} g_{l+1,m} = 0 \quad (4.56)$$

Para $l > 3$ as equações são as não perturbadas. Neste caso podemos escrever imediatamente que

$$g_{l-1,m} + 2t g_{l,m} + g_{l+1,m} = 0 \quad (4.57)$$

Definindo-se que

$$g_{lm} = a X_l, \quad (4.58)$$

com m fixo e a uma constante de proporcionalidade independente de l , temos então que:

$$X_{l-1} + 2t X_l + X_{l+1} = 0, \quad (4.59)$$

cujas soluções podem se escritas na forma

$$X_l = A \rho^l, \quad (4.60)$$

e satisfazem à seguinte equação:

$$(\rho + \rho^{-1}) + 2t = 0. \quad (4.61)$$

Se tomarmos $\rho = -\xi$, a equação acima é idêntica à Eq.(4.25 f), derivada anteriormente para a fração continuada $\xi(t)$.

Para se compreender o significado físico do parâmetro ξ , e conseqüentemente dos X_l , basta observar que os parâmetros X_l podem ser identificados com as projeções no plano l dos autovetores $|X_n\rangle$ do Hamiltoniano efetivo, h^{eff} . Escrevendo que $\langle l | X_n \rangle = X_l^{(n)}$, a Eq.(4.54) pode ser escrita na seguinte forma:

$$g(\nu+i\varepsilon)_{lm} = \frac{\alpha G_m}{2\pi} \sum_n \frac{X_l^{(n)} X_m^{*(n)}}{\nu - \nu_n + i\varepsilon} \quad (4.62)$$

No caso particular em que $\nu \rightarrow \nu_k$ podemos escrever que:

$$g(\nu+i\varepsilon)_{lm} = \frac{\alpha G_m}{i 2\pi \varepsilon} X_l^{(k)} X_m^{*(k)} + \frac{\alpha G_m}{2\pi} \sum_{n \neq k} \frac{X_l^{(n)} X_m^{*(n)}}{\nu_k - \nu_n + i\varepsilon} \quad (4.63)$$

Tomando-se o limite $\varepsilon \rightarrow 0^+$ podemos desprezar o segundo termo, e teremos para um valor fixo de m que:

$$g_{lm}(\nu_k) \sim X_l^{(k)} \quad (4.64)$$

Como vimos anteriormente, podemos fazer a identificação

$$X_l^{(k)} \sim \rho_k^l \sim (-\xi_k)^l, \quad (4.65)$$

ou seja, os elementos $g_{lm}(\nu_k)$ podem ser expressos na forma

$$g_{lm}(\nu_k) = b (\xi_k)^l \quad (4.66)$$

onde a constante b independe de l .

Como os elementos $g_{lm}(\nu)$ estão relacionados com a transformada de Fourier da amplitude da excitação $|X(t)\rangle$ num ponto.

do plano l , temos que considerar o seguinte :

Para $|\xi| = 1$ ($|t| \leq 1$), a amplitude será independente de l , como podemos observar na Eq. (4.65). Nesse caso, esses valores de t correspondem aos modos de volume, já que a amplitude da excitação é constante em todo o cristal semi-infinito. Observamos que se $|\xi| < 1$, a Eq. (4.65) mostra que estas amplitudes decrescem à medida que vamos tomando planos cada vez mais distantes da superfície. Estes modos são denominados modos localizados, pois as excitações estão localizadas apenas próximo da superfície livre do cristal.

A relação de dispersão para os modos superficiais é dada pela expressão:

$$v_s = \alpha (\xi_s + \xi_s^{-1}) + h + d + \gamma (1 + 3\varepsilon) - \gamma [\gamma(\vec{k}_s) + \varepsilon \gamma'(\vec{k}_s)], \quad (4.67)$$

onde $|\xi_s(t)| < 1$, ou seja, válida apenas para os valores de t tal que $|t| > 1$. Esses valores de ξ_s são as raízes de $D(\xi)$, dada pela Eq. (4.29 a).

Mostramos a seguir os resultados obtidos para as magnetizações relativas dos dois primeiros planos em função da temperatura, as relações de dispersão dos modos de volume e de superfície, para $T < T_V^C$, sendo T_V^C a temperatura crítica de volume.

Na Fig. (8) apresentamos o comportamento da magnetização espontânea do primeiro plano (σ_0) para alguns valores selecionados do parâmetro ξ_v . É fácil observar que um aumento no valor de ξ_v corresponde igualmente a um acréscimo na temperatura crítica de superfície é idêntica a de volume, isto é, não podemos ter neste caso uma superfície ordenada sobre um volume paramagnético.

Na Fig.(9) mostramos a variação das magnetizações de volume (σ_v), do primeiro plano (σ_0) e do segundo plano (σ_1) em função da temperatura para $\xi_v = 1.8$. Observamos que devido à presença da superfície livre, e conseqüentemente da quebra de simetria translacional do cristal, as magnetizações espontâneas de superfície e de volume apresentam diferentes valores para uma mesma temperatura. Podemos justificar este fato, levando-se em conta que o campo efetivo que atua nos spins da superfície é menor que aquele que atua nos spins localizados nas camadas mais internas. Isto faz com que a magnetização da superfície livre seja menor que a de volume a uma dada temperatura. Apesar disto, os valores das temperaturas críticas de volume e superfície convergem para um mesmo valor.

Na Fig.(10) apresentamos as relações de dispersão dos modos de volume e superfície para diversos valores da temperatura reduzida. Neste caso os parâmetros de anisotropia de volume e superfície são tomados iguais. Notamos que com o aumento da temperatura, ocorre um deslocamento no espectro de superfície no sentido de se afastar da região do contínuo. Outro aspecto interessante é que para temperaturas próximas da temperatura crítica observamos o surgimento de dois ramos diferentes, embora nesta aproximação seja possível o aparecimento de até cinco ramos diferentes numa determinada temperatura.

Finalmente, é mostrado na Fig.(11) as relações de dispersão para diversos valores do parâmetro de anisotropia de superfície. Notamos que a frequência dos modos localizados aumenta à medida que tomamos valores crescentes do parâmetro d_s . Portanto, quando os valores de d_s são suficientemente grandes, a excitação dos modos de superfície ocorre somente depois que os modos de volume já tenham sido excitados. Ao contrário, para valores do parâmetro d_s relativamente pequenos comparados aos de volume, verifica-se que os

modos localizados são mais facilmente excitados que os correspondentes de contínuo.

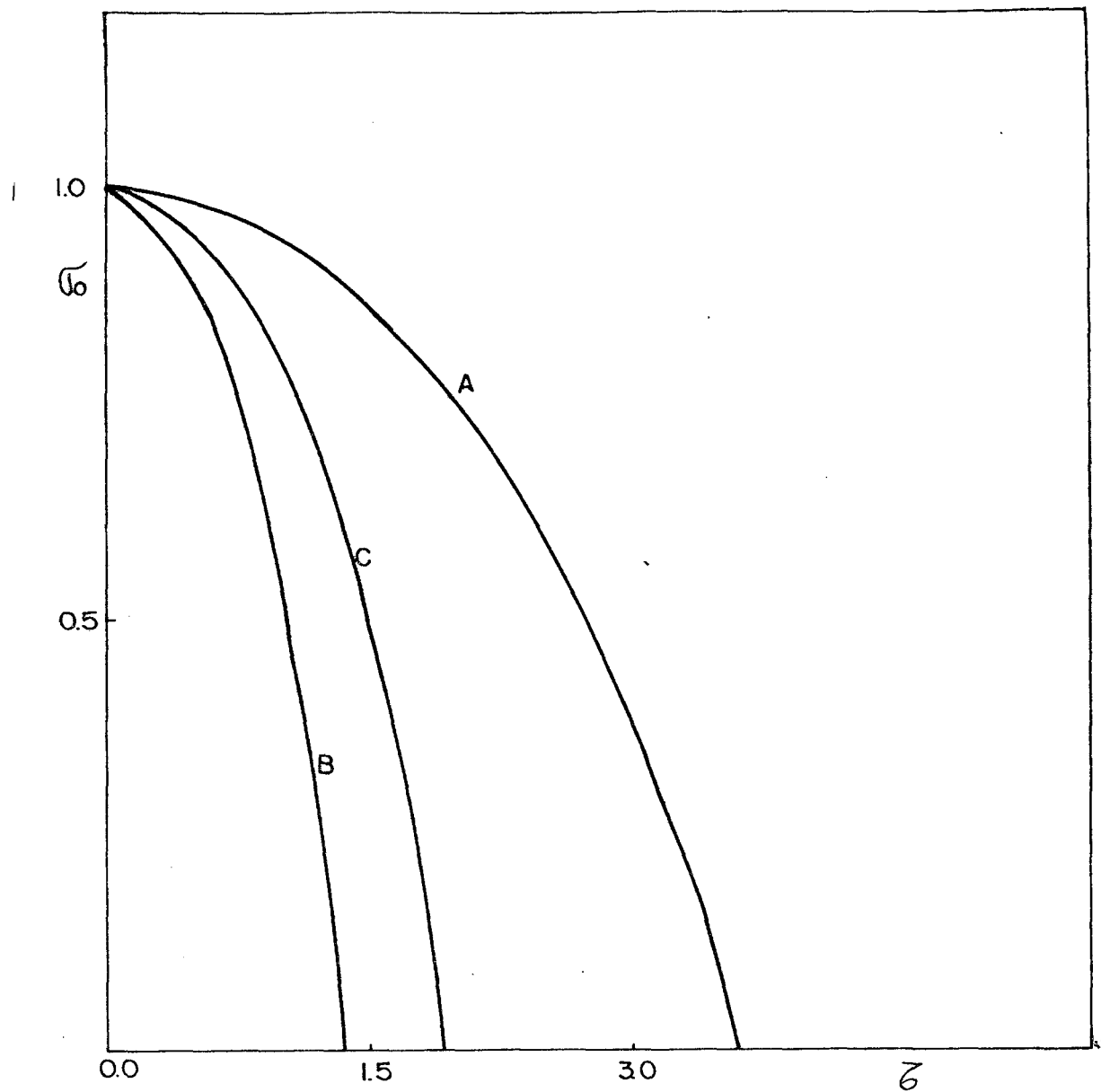


FIGURA 8 - Magnetização relativa, $\sigma_0 = \langle S_0^z \rangle / S$; em função da temperatura reduzida, τ ; $S=1/2$; $d_v = 0.0$; A: $\xi_v = 1.8$; B: $\xi_v = 0.2$; C: $\xi_v = 0.6$; $\xi_v = \frac{z_2 J_2}{z_1 J_1}$; $\tau = K_B \cdot T / z_1 J_1$.

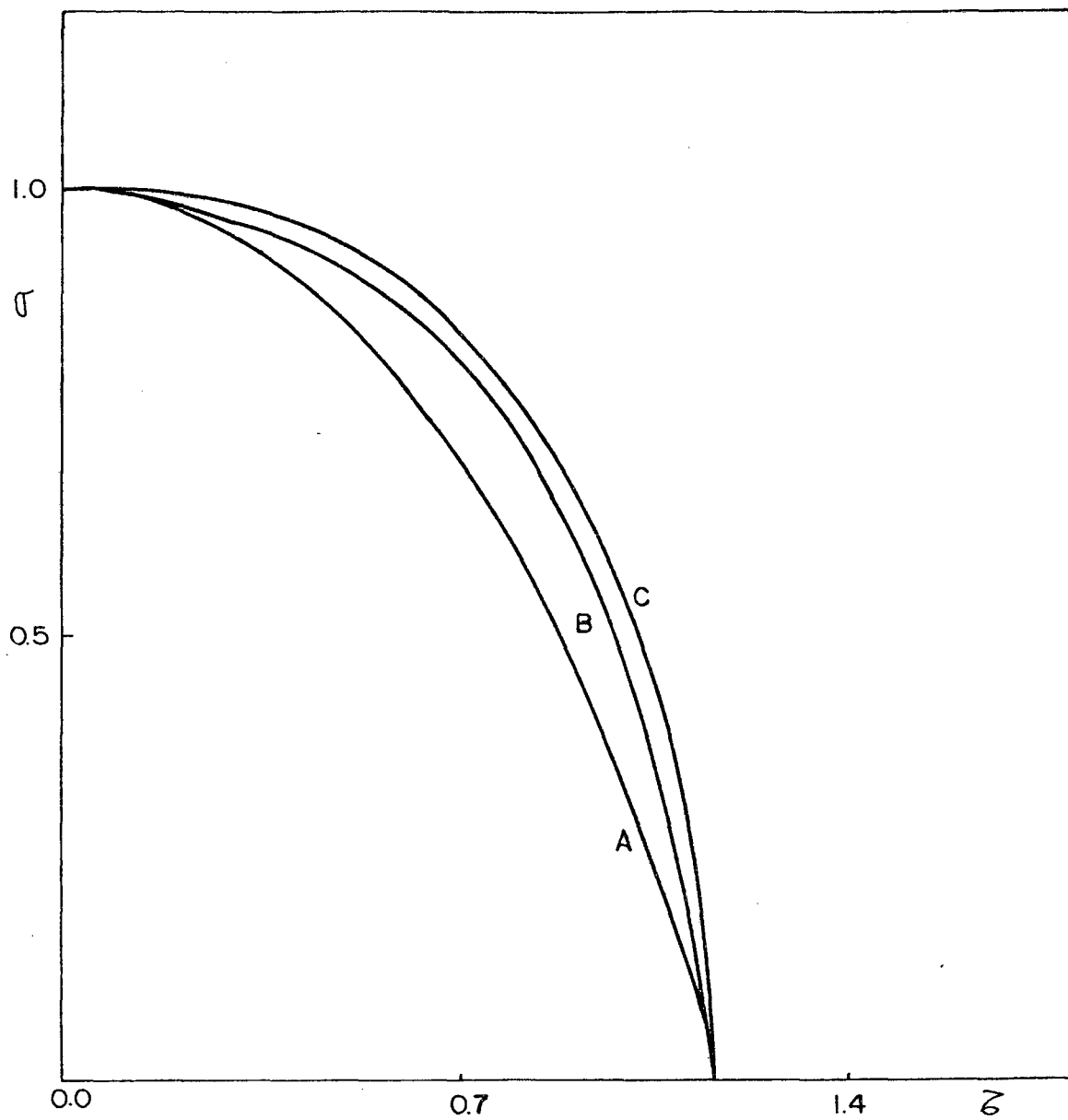


FIGURA 9 - Magnetização relativa em função da temperatura reduzida. A: σ_0 ; B: σ_1 ; C: σ_V ; $\xi_V = 1.8$; $d_V = 0.0$; $S = 1/2$.

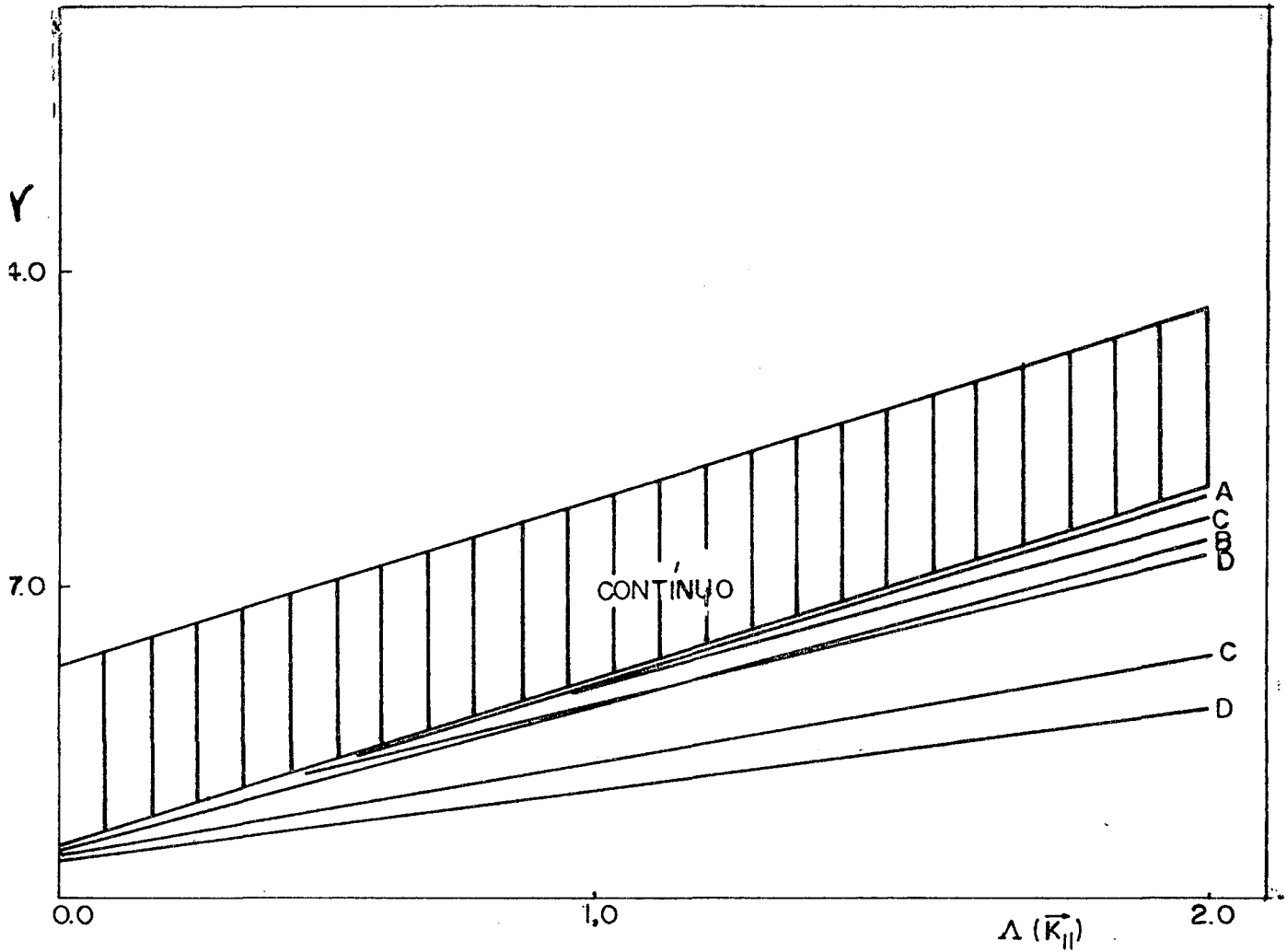


FIGURA 10 - Relação de dispersão dos magnons de superfície.

Para $S = 1.0$; $d_V = 0.2$; $\tau_V^c = 1.36$; $d_S = 0.20$.

A : $\bar{C} = 0.69$; B : $\bar{C} = 0.97$; C : $\bar{C} = 1.26$; D : $\bar{C} = 1.34$;

$$\Lambda(\vec{K}_{||}) = \left[1 - \frac{1}{2} \left(\cos(K_x a) + \cos(K_z a) \right) \right]:$$

$$V = \frac{w}{2 J \langle S_V^z \rangle}$$

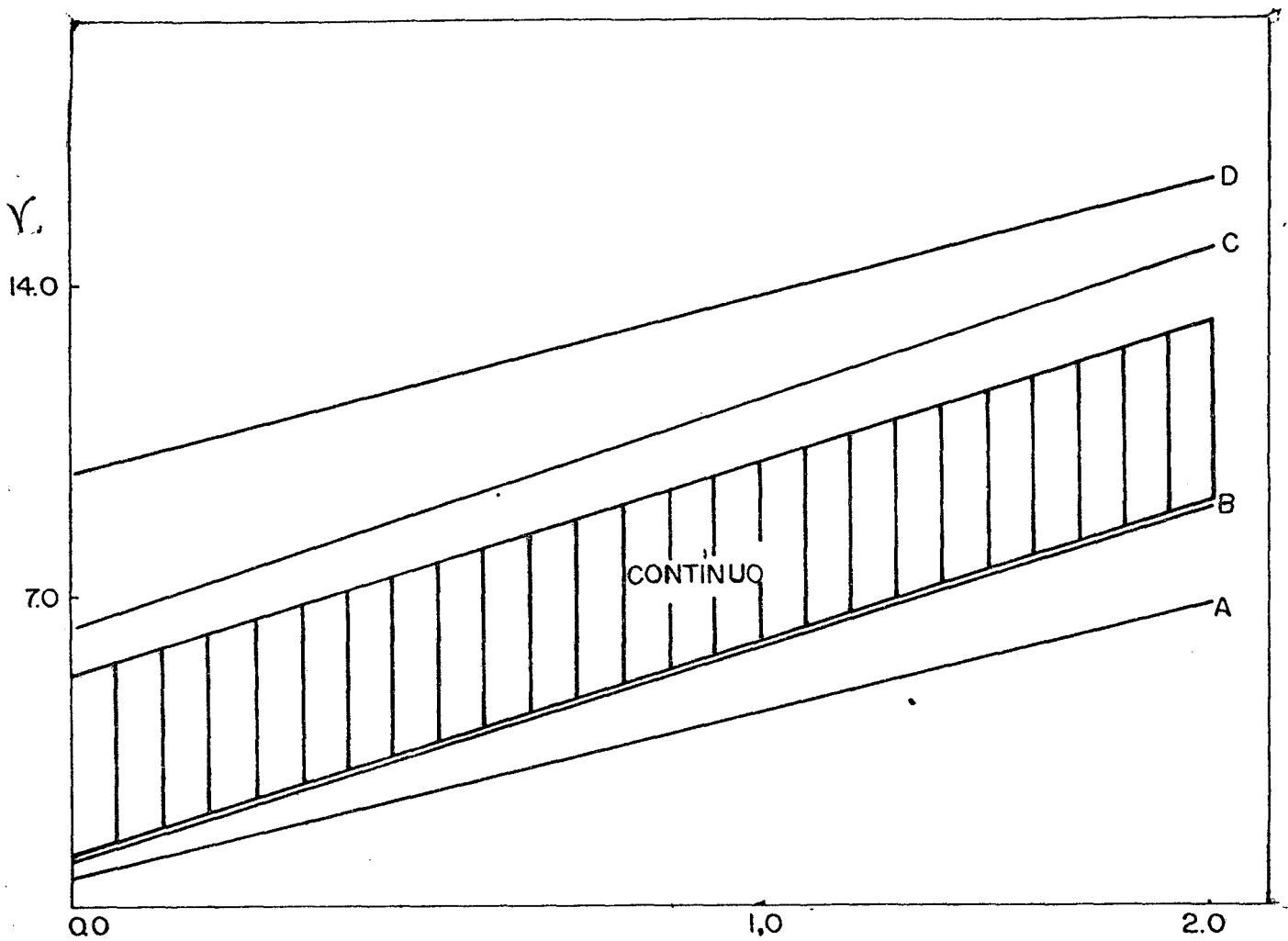


FIGURA 11 - Relação de dispersão dos magnons de superfície.

Para $S = 1.0$; $d_V = 0.2$; $\zeta_V^c = 1.36$; $\zeta = 0.69$;

A : $d_S = 0.02$; B : $d_S = 0.2$; C : $d_S = 0.75$;

D : $d_S = 1.0$; $V = \frac{w}{2J_z^4 S^2}$

$$\Delta(\vec{K}_u) = \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\cos(K_x a) + \cos(K_z a) \right] \right\}$$

CAPÍTULO 5

EFEITOS DA ANISOTROPIA UNIAXIAL DE ÍON ÚNICO NA MAGNETIZAÇÃO E NAS ONDAS DE SPIN NUM CRISTAL FERROMAGNÉTICO SEMI-INFINITO

5.1 - Introdução

No capítulo anterior observamos a dependência das magnetizações superficiais \mathcal{G}_0 e \mathcal{G}_1 em função da temperatura a partir da escolha dos parâmetros de intercâmbio e anisotropia do sistema. Selzer e Majlis⁽¹⁵⁾ verificaram que $\mathcal{G}_0 \rightarrow 0$ quando $J_{\perp} \rightarrow 0$, em todas as temperaturas finitas. Assim sendo é possível de se obter, através de uma escolha conveniente de parâmetros, uma região próxima à superfície que seja paramagnética, enquanto o volume é ferromagnético. Obviamente é possível de se realizar o oposto, isto é, o filme superficial ferromagnético e o volume paramagnético.

No presente capítulo pretendemos mostrar o efeito da anisotropia uniaxial de íon único \tilde{d} , sendo que teremos $\tilde{d} = d_s$ para $\lambda = 0$ e $d = d_v$ para $\lambda \neq 0$, lembrando que λ representa o índice de plano utilizado no capítulo anterior. Quando $d_s > d_v$ é possível de se obter um filme superficial ferromagnético, acima da temperatura crítica de volume (T_v^c), isto é, \mathcal{G}_0 e \mathcal{G}_1 são diferentes de zero para $T > T_v^c$. Fixado o valor de d_v podemos encontrar um valor de d_s crítico (d_s^c), que satisfaz à condição $T(d_s^c) = T_v^c$. Portanto, se $d_s > d_s^c$, teremos que \mathcal{G}_0 e \mathcal{G}_1 não são necessariamente nulos para $T > T_v^c$. Desta forma, podemos obter a dependência de \mathcal{G}_0 e \mathcal{G}_1 em função da temperatura, na região compreendida entre T_v^c e T_s^c , sendo T_s^c a temperatura crítica do filme.

5.2 - Magnetização Superficial Acima da Temperatura Crítica de Volume (T_V^C).

A Eq. (4.1) diz que

$$\begin{aligned} & [\omega - (g\mu_B H_0 + 2\tilde{D}\langle S_\ell^z \rangle + 2\sum_j J_{\ell j}^1(0)\langle S_j^z \rangle + 2\sum_k J_{\ell k}^2(0)\langle S_{kz} \rangle)] \tilde{G}_{\ell m}(\vec{K}_{//}, \omega) + \\ & + 2\langle S_\ell^z \rangle \left[\sum_j J_{\ell j}^1(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{jm}(\vec{K}_{//}, \omega) + \sum_k J_{\ell k}^2(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{km}(\vec{K}_{//}, \omega) \right] = \frac{1}{2\pi} \langle C \rangle, \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde C é o resultado do comutador:

$$C = [S_\ell^+, (S_\ell^-)^n (S_\ell^+)^{n-1}] \quad (5.2)$$

De maneira análoga ao capítulo anterior definimos as seguintes variáveis reduzidas:

$$\nu = \frac{\omega}{2J^1}, \quad h = \frac{g\mu_B H_0}{2J^1}, \quad \tilde{d} = \frac{\tilde{D}}{J^1}, \quad \varepsilon_{\ell k}^{1,2} = \frac{J_{\ell k}^{1,2}}{J^1} \quad e$$

$$\sigma_\ell = \langle S_\ell^z \rangle. \quad (5.3)$$

Observamos que neste caso não dividimos por $\langle S_V^z \rangle$ como no capítulo anterior, pois estamos justamente interessados nas soluções não triviais da magnetização de superfície acima da temperatura crítica de volume. Temos então

$$\begin{aligned} & [\nu - (h + \tilde{d}\sigma_\ell + \sum_j \varepsilon_{\ell j}^1(0)\sigma_j + \sum_k \varepsilon_{\ell k}^2(0)\sigma_k)] \tilde{G}_{\ell m}(\vec{K}_{//}, \nu) + \\ & + \sigma_\ell \left[\sum_j \varepsilon_{\ell j}^1(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{jm}(\vec{K}_{//}, \nu) + \sum_k \varepsilon_{\ell k}^2(\vec{K}_{//}) \tilde{G}_{km}(\vec{K}_{//}, \nu) \right] = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle C \rangle}{2J^1}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

x ou em forma matricial:

$$[\Omega(\vec{k}_{//}, \nu) \cdot \tilde{G}(\vec{k}_{//}, \nu)]_{lm} = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle C \rangle}{2J^2 \alpha} \quad (5.5)$$

Assim:

$$\begin{aligned} \Omega_{li}(\vec{k}_{//}, \nu) = & \left\{ \left[\nu - (\tilde{d} \sigma_l + \sum_j \varepsilon_{lj}^1(0) \sigma_j + \varepsilon_{lk}^2(0) \sigma_k) \right] \delta_{li} + \right. \\ & \left. + \sigma_l \left[\sum_j \varepsilon_{lj}^1(\vec{k}_{//}) \delta_{ji} + \sum_k \varepsilon_{lk}^2(\vec{k}_{//}) \delta_{ki} \right] \right\} / \alpha, \end{aligned} \quad (5.6)$$

sendo

$$\alpha = (1 + \gamma \varepsilon \gamma') \quad (5.7)$$

Considerando $h = 0$ e impondo a condição que $\sigma_l = 0$ para $l \geq 2$; os elementos não diagonais da matriz Ω são dados por:

$$\Omega_{li} = \beta_{li} = \begin{cases} 0 & \text{se } |i-l| > 1, \\ 0 & \text{se } l \geq 2 \\ \frac{(\varepsilon_{l+1}^1 + \gamma \varepsilon_{l+1}^2 \gamma')}{\alpha} \cdot \begin{cases} \sigma_0 & \text{se } (l,i) = (0,1) \\ \sigma_1 & \text{se } (l,i) = (1,0) \end{cases}, \\ \sigma_1 & \text{se } (l,i) = (1,2) \end{cases} \quad (5.8)$$

e os elementos diagonais por:

$$\Omega_{33} = \frac{\nu}{\alpha} = t \quad (5.9)$$

e

$$\Omega_{22} = t - \alpha_{22}, \quad (5.10)$$

sendo que

$$\alpha_{22} = \sigma_1 (1 + \gamma \varepsilon) / \alpha \quad (5.11)$$

e

$$\alpha_{11} = t - \alpha_{11} \quad , \quad (5.12)$$

com

$$\alpha_{11} = \left\{ \sigma_0 (\varepsilon_{\perp}^1 + \gamma \varepsilon) + \sigma_1 [d + \gamma(1 - \gamma) + \gamma \varepsilon(1 - \gamma')] \right\} / \alpha \quad (5.13)$$

e finalmente

$$\Omega_{00} = t - \alpha_{00} \quad , \quad (5.14)$$

sendo que

$$\alpha_{00} = \left\{ \sigma_0 [d_s + \gamma \varepsilon_{//}^1 (1 - \gamma) + \gamma \varepsilon_{//}^2 (1 - \gamma')] + \sigma_1 [\varepsilon_{\perp}^1 + \gamma \varepsilon_{\perp}^2] \right\} / \alpha \quad (5.15)$$

Se $n \geq 3$ temos que $\Omega_{nn} = 2t$, logo a matriz $\Omega(\vec{K}_{//}, \nu)$ pode ser escrita na seguinte forma:

$$\Omega(\vec{K}_{//}, \nu) = \begin{bmatrix} t - \alpha_{00} & \beta_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \beta_{10} & t - \alpha_{11} & \beta_{12} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & t - \alpha_{22} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

É evidente que a matriz $\Omega(\vec{K}_{//}, \nu)$ passa a ser diagonal a partir do elemento $\Omega_{33}(\vec{K}_{//}, \nu)$. De forma análoga ao capítulo anterior obtemos os seguintes elementos da matriz inversa de $\Omega(\vec{K}_{//}, \nu)$:

$$\left[\Omega^{-1}(\vec{K}_{//}, \nu) \right]_{00} = \frac{t - \alpha_{11}}{(t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \beta_{10}\beta_{01}}, \quad (5.17)$$

e

$$\left[\Omega^{-1}(\vec{K}_{//}, \nu) \right]_{11} = \frac{t - \alpha_{00}}{(t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \beta_{10}\beta_{01}}, \quad (5.18)$$

que podem ser escritos na seguinte forma:

$$[\Omega^{-1}(\vec{K}_{//}, \nu)]_{ll} = \frac{N_l(t)}{D(t)}, \quad (5.19)$$

onde

$$N_0(t) = t - \alpha_{11}, \quad (5.20)$$

e

$$N_1(t) = t - \alpha_{00}. \quad (5.21)$$

As raízes do polinômio $D(t)$ são dadas por

$$D(t) = (t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \beta_{01}\beta_{10}, \quad (5.22)$$

que são polos dos elementos $(\Omega^{-1})_{ll}$, e conseqüentemente das funções de Green.

Para se determinar a magnetização por íon em cada plano (G_l) temos que utilizar a Eq. (3.36) apresentada no capítulo 3. Sabemos que

$$\Phi_{\ell}(s) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \left[\int \frac{d^2 \vec{k}_{\parallel} \operatorname{Im}[\Omega^{-1}(\vec{k}_{\parallel}, \omega + i\varepsilon)]_{\ell\ell}}{(e^{\beta\omega} - 1)} \right], \quad (5.23)$$

que em termos das variáveis reduzidas torna-se:

$$\Phi_{\ell}(s) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int d^2 \vec{k}_{\parallel} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \operatorname{Im}[\Omega^{-1}(\vec{k}_{\parallel}, t + i\varepsilon)]_{\ell\ell}}{(e^{\beta\omega(t)} - 1)} \right]. \quad (5.24)$$

Lembrando-se ainda que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im}[\Omega^{-1}(\vec{k}_{\parallel}, t + i\varepsilon)]_{\ell\ell} = -\pi \sum_n \frac{N_{\ell}(t_n)}{D'(t_n)} \delta(t - t_n), \quad (5.25)$$

onde t_n é uma raízes do polinômio $D(t)$ e $D'(t)$ sua primeira derivada, podemos então escrever que:

$$\Phi_0(s) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \vec{k}_{\parallel} \frac{1}{(t_1 - t_2)} \left[\frac{(t_1 - \alpha_{11})}{(e^{\beta\omega(t_1)} - 1)} - \frac{(t_2 - \alpha_{11})}{(e^{\beta\omega(t_2)} - 1)} \right] \quad (5.26a)$$

e

$$\Phi_1(s) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \vec{k}_{\parallel} \frac{1}{(t_1 - t_2)} \left[\frac{(t_1 - \alpha_{00})}{(e^{\beta\omega(t_1)} - 1)} - \frac{(t_2 - \alpha_{00})}{(e^{\beta\omega(t_2)} - 1)} \right] \quad (5.26b)$$

As Eqs. (5.26) juntamente com a Eq. (3.36) permitem determinar os valores das magnetizações G_0 e G_1 autoconsistentemente para cada valor da temperatura.

Sabemos que os polos das funções de Green correspondem às energias das excitações elementares do sistema, que são dados pelas raízes do polinômio $D(t)$. Podemos então encontrar a relação de dispersão dos magnons localizados para $T > T_V^C$.

Fixado o parâmetro que caracteriza a anisotropia uniaxial no volume (d_V), é possível de se determinar o mínimo valor do parâmetro que determina a anisotropia na superfície (d_S) e que satisfaz à condição $T_V^C(d_V) = T_S^C = T_S^C(d_S^C)$. Assim sendo, se $d_S > d_S^C$, nossos resultados mostram que $T_S^C > T_V^C$ para um dado valor de d_V .

Apresentamos nos gráficos seguintes o comportamento das magnetizações reduzidas do volume (G_V), do primeiro plano (G_0) e do segundo plano (G_1), em função da temperatura reduzida (τ), para alguns valores selecionados dos parâmetros do sistema. Tomamos sempre $\xi_0^1 = \xi_1^1 = 1.0$.

Na Fig.(12) apresentamos a dependência da temperatura crítica reduzida de superfície (τ_S^C) em função do parâmetro de anisotropia uniaxial de superfície (d_S). Para o valor de $d_V = 0.2$ é possível observar neste diagrama três regiões distintas:

a) Se $d_S < 0.408$ teremos as fases ferromagnética ($\tau < \tau_V^C$) e paramagnética ($\tau > \tau_V^C$) tanto para a superfície como para o volume, isto é, as temperaturas críticas de volume e superfície são iguais, $\tau_V^C = \tau_S^C$.

b) Se $d_S > 0.408$ o volume e a superfície são ferromagnéticos para $\tau < \tau_V^C$, mas se $\tau > \tau_V^C$ o volume se encontrará na fase paramagnética enquanto que a superfície ainda será ferromagnética.

c) Finalmente se $d_S > 0.408$ e $\tau > \tau_S^C$ todo o sistema se encontrará na fase desordenada.

Na Fig.(13) exibimos o comportamento do parâmetro de anisotropia de superfície (d_s^C) em função do parâmetro correspondente de volume (d_v). É interessante observar que mesmo para $d_v = 0.0$, é possível de se determinar um valor de d_s crítico, acima do qual a superfície torná-se ferromagnética, mesmo que o volume esteja na fase paramagnética.

Na Fig.(14) mostramos o comportamento da magnetização relativa do primeiro plano (G_0) em função da temperatura reduzida (T). Notamos que se $d_s < d_s^C$ o valor da temperatura crítica de superfície e de volume convergem para um mesmo valor (curvas A e B). Neste caso o ordenamento magnético do sistema é governado essencialmente pelo volume. Para $d_s > d_s^C$, observamos que é possível de se ter magnetização na superfície enquanto o volume é paramagnético (curvas C e D).

Na Fig.(15) exibimos o gráfico das magnetizações de volume (G_v), primeiro (G_0) e segundo (G_1) planos em função da temperatura. Para valores de d_v muito menores que d_s , é possível de se obter temperaturas críticas de superfície consideravelmente maiores que as correspondentes de volume.

Finalmente mostramos nas Figs.(16) e (17) as relações de dispersão para os magnons superficiais para temperaturas acima da temperatura crítica de volume. Na Fig.(16) o parâmetro de anisotropia é fixado enquanto variamos a temperatura.

Para cada valor de temperatura são encontrados dois ramos com frequências diferentes, bem como a tendência de desaparecimento desses dois ramos quando estamos atingindo a temperatura

crítica de superfície. Por outro lado, na Fig.(17) mostramos o comportamento da relação de dispersão dos magnons localizados para vários valores do parâmetros de anisotropia d_s . Neste caso observa-se um aumento nos valores da frequência para valores crescentes de d_s .

✓ Devemos salientar que os ramos A correspondem a um determinado valor de anisotropia tal que a temperatura crítica de superfície é apenas ligeiramente superior que o valor de temperatura escolhido ($d_s = 0.6$).

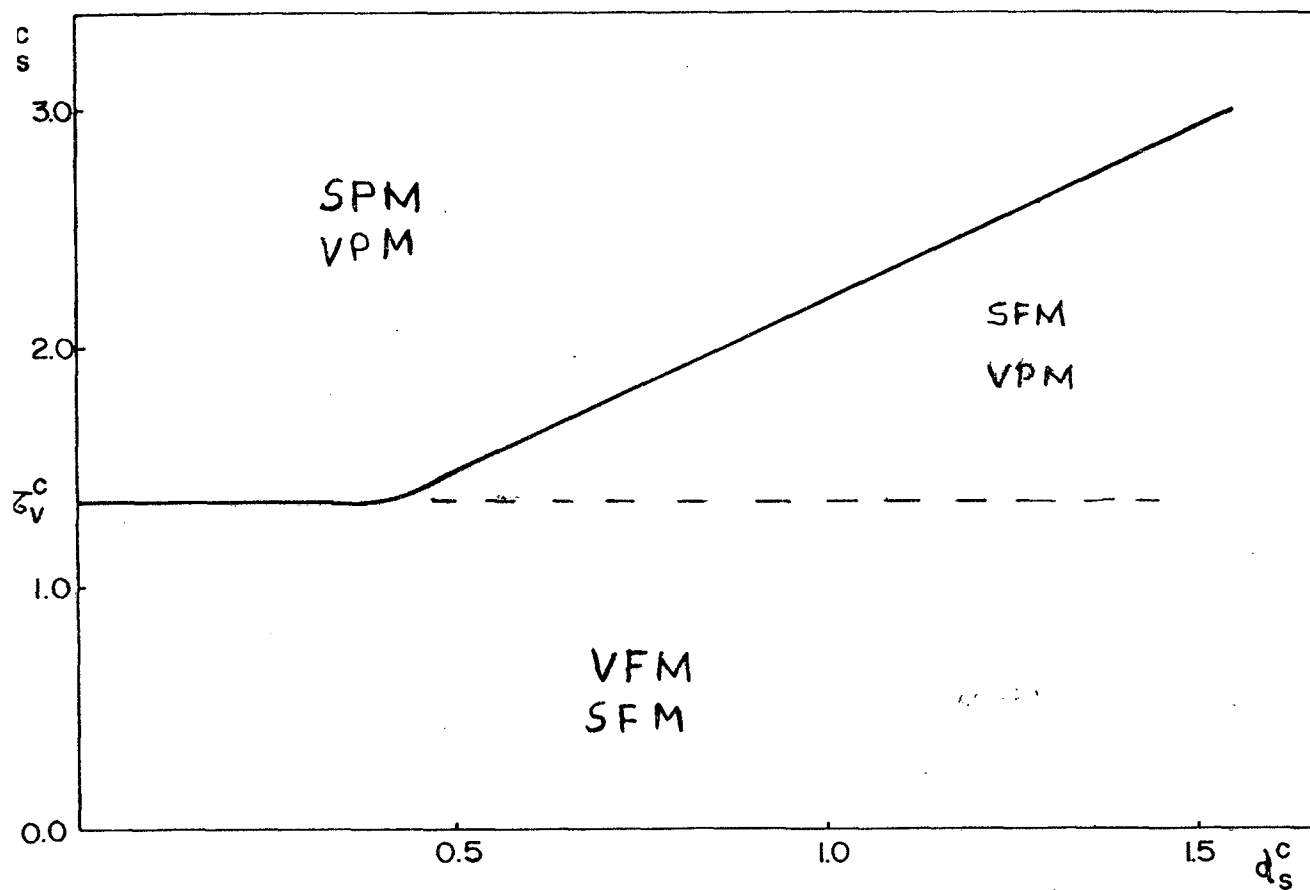


FIGURA 12 - Temperatura crítica de superfície (T_s^c) em função do parâmetro d_s . Para $S = 1.0$; $\zeta_v = 0.0$; $dv = 0.2$.

$$d_v = \frac{D}{z_1 J_1} .$$

Legenda: SFM - Superfície ferromagnética

VPM - Volume paramagnético

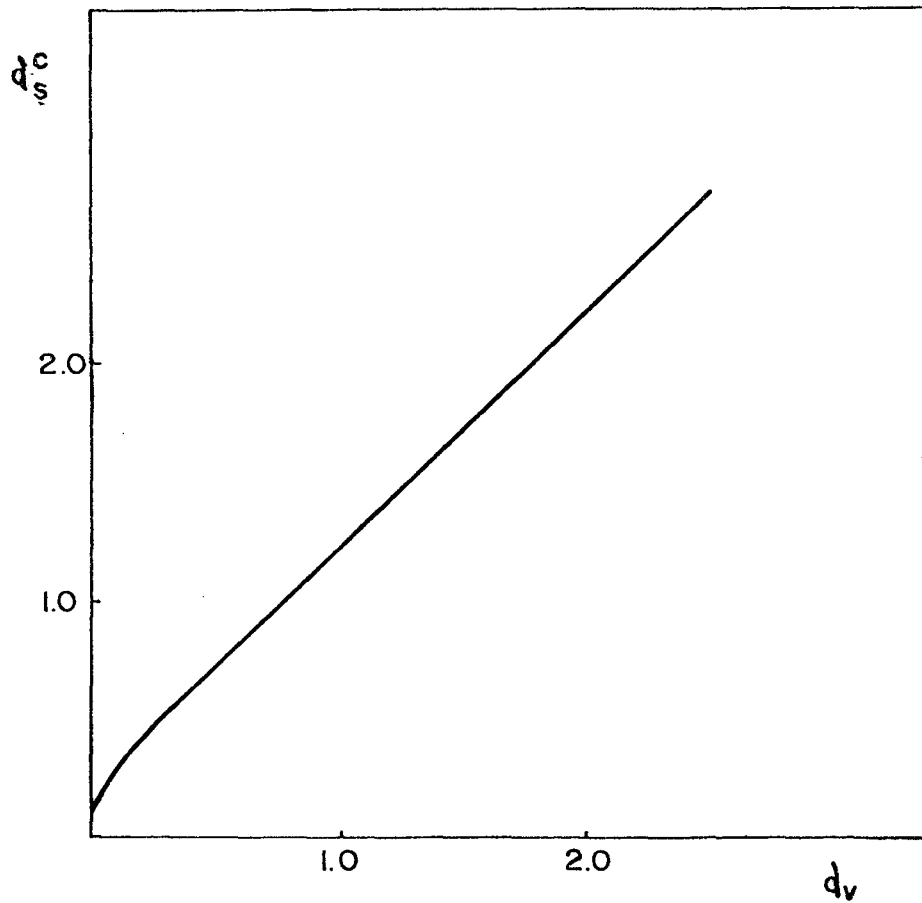


FIGURA 13 - Parâmetro d_s^c em função de d_v . $S = 1.0$; $\xi_v = 0.0$.

$$d_v = \frac{D_v}{z_1 J_1} ; \quad v = \frac{z_2 J_2}{z_1 J_1} .$$

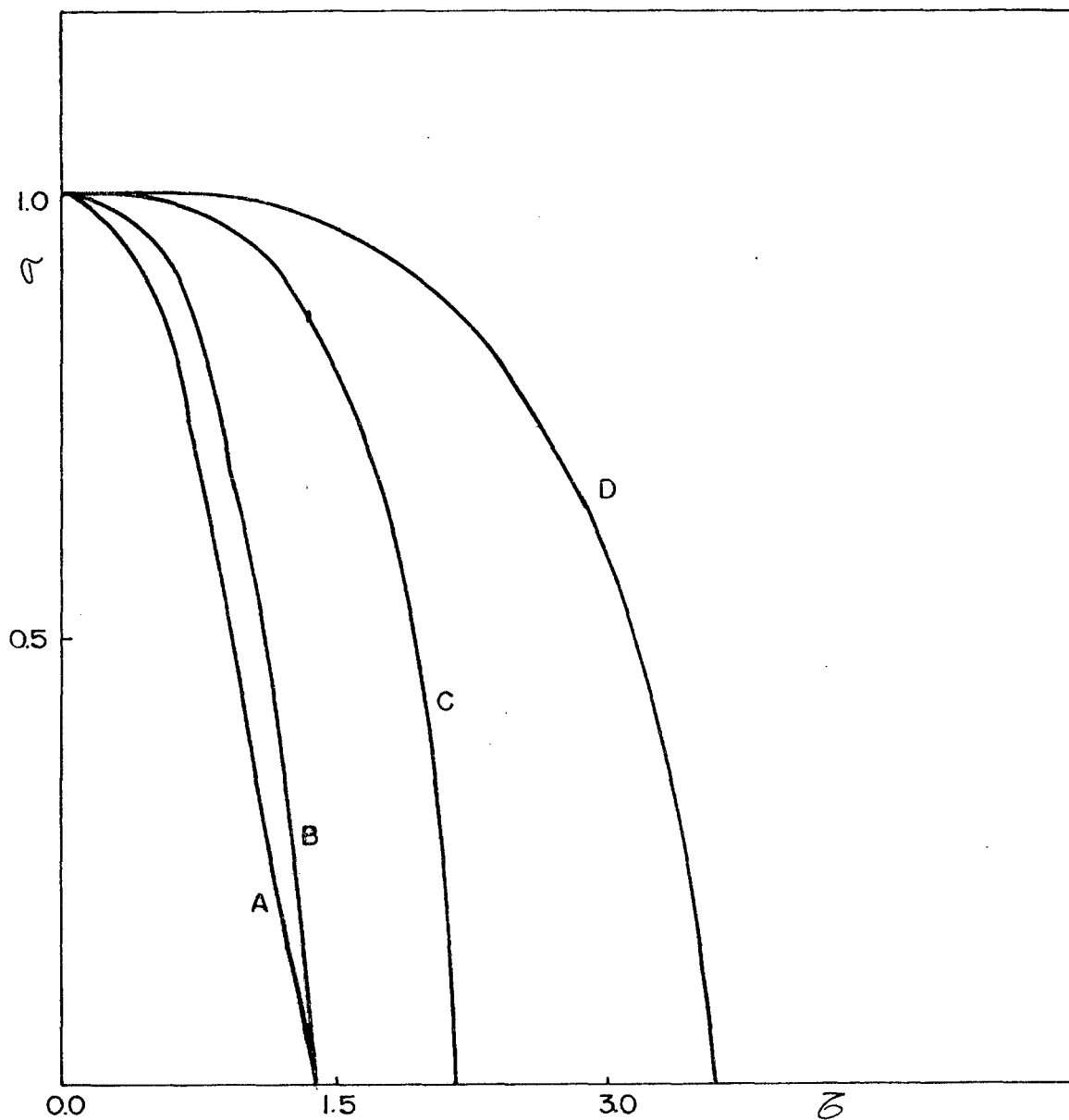


FIGURA 14 - Magnetização relativa (σ) em função da temperatura reduzida (ζ), para valores de $d_v = 0.2$; $S = 1.0$.

A : $d_s = 0.02$; B : $d_s = 0.2$; C : $d_s = 1.0$;

D : $d_s = 2.0$. $d_v = \frac{D}{z_1 J_1}$.

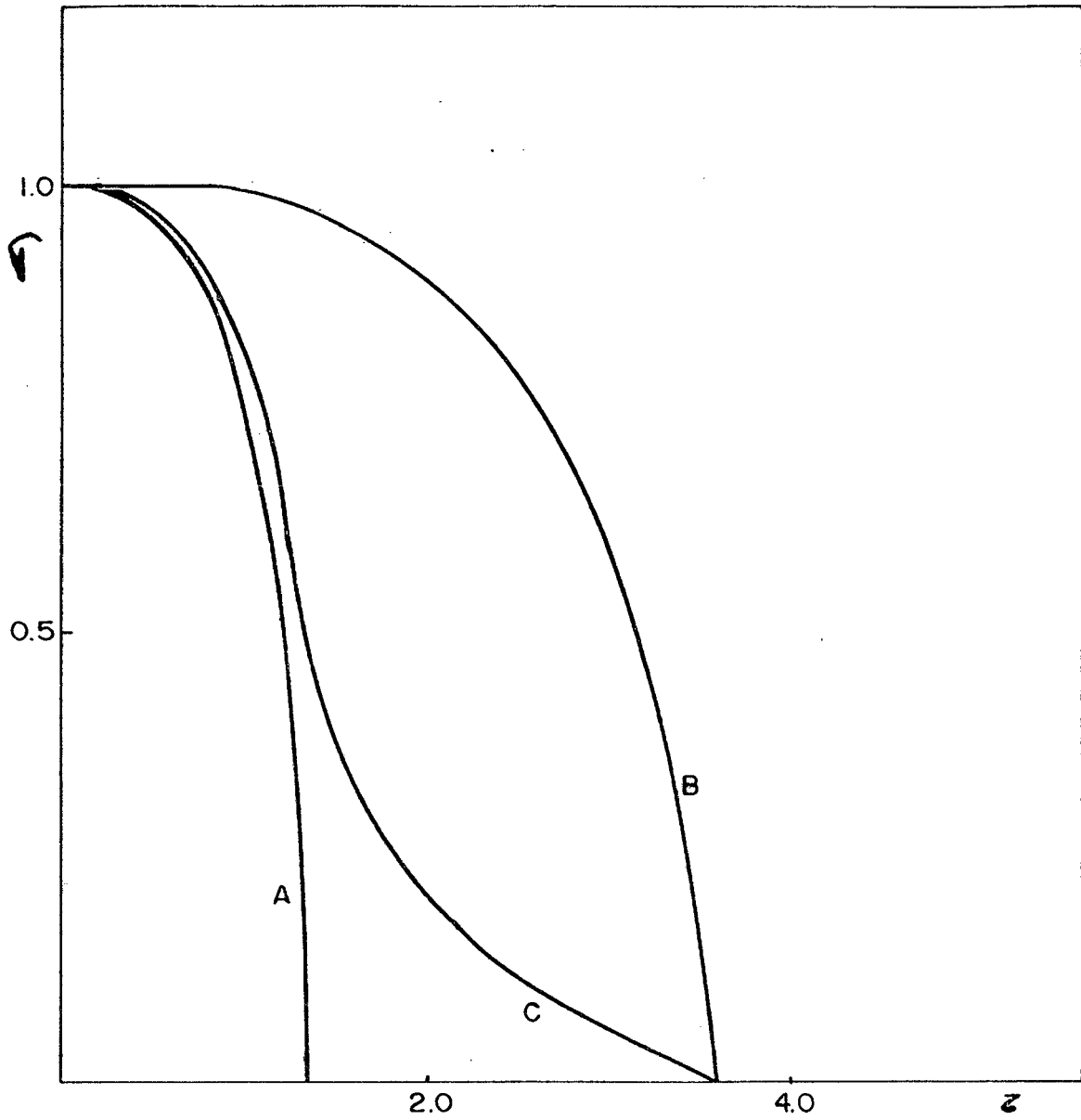


FIGURA 15 - Magnetização relativa $\bar{S}_z = \langle S_z^z \rangle / S$ em função da temperatura reduzida (\bar{z}) para $d_v = 0.2$; $d_s = 2.0$ e $S = 1.0$.
 A : volume; B : 1º plano; C : 2º plano; $\bar{z} = \frac{k_B T}{z_1 J_1}$.

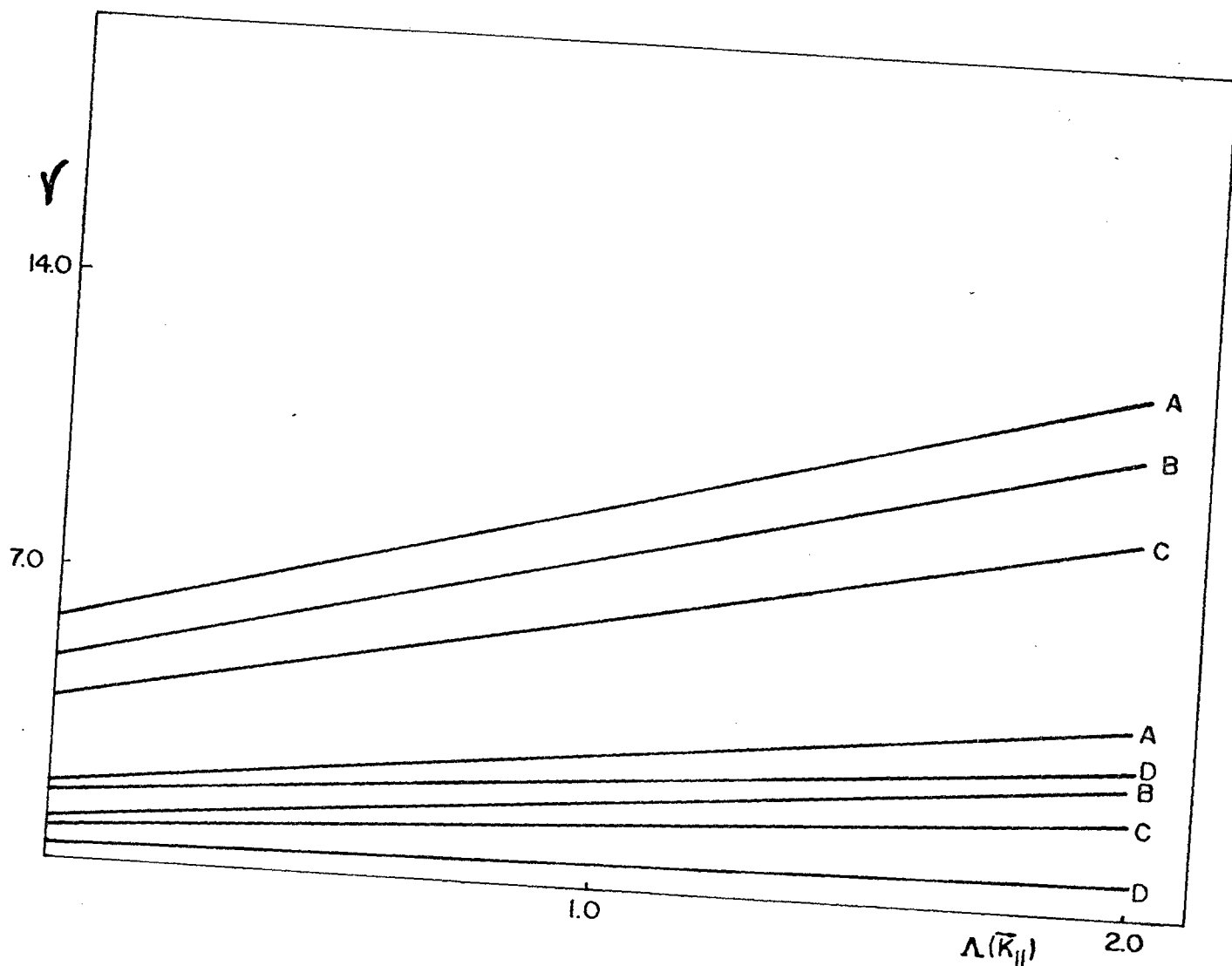


FIGURA 16 - Relação de dispersão dos magnons de superfície. Tomamos
 $S = 1.0$; $d_v = 0.2$; $\tau_v^c = 1.36$; $d_s = 1.0$; $\tau_s^c = 2.18$.
 A : $\tau = 1.38$; B : $\tau = 1.60$; C : $\tau = 1.80$; D : $\tau = 2.10$.

$$V = \frac{w}{2J^2}; \Lambda(\vec{K}_{||}) = \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\cos(K_x a) + \cos(K_y a) \right] \right\}$$

$$\tau = \frac{K_B T}{z_1 J_1}$$

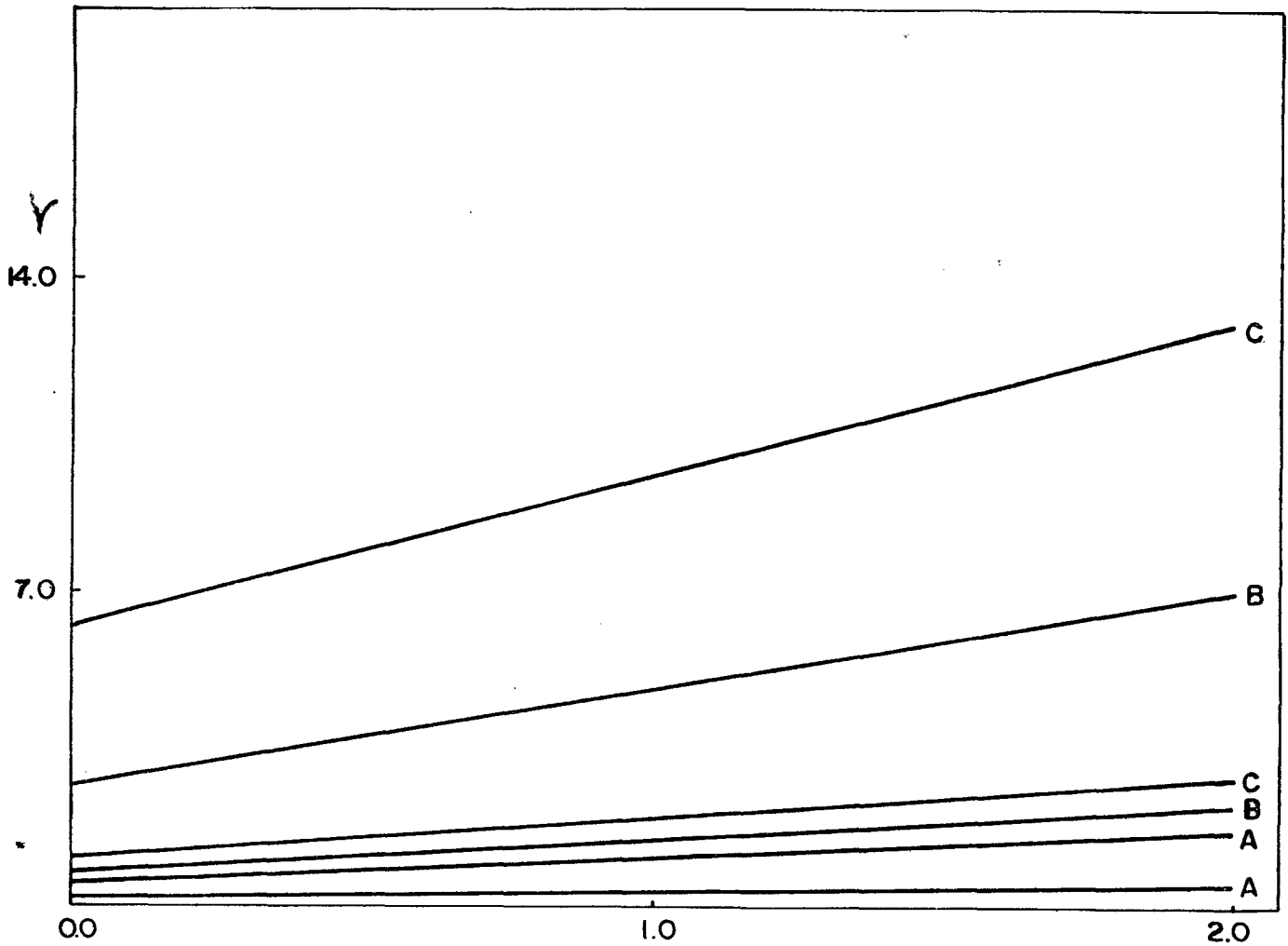


FIGURA 17 - Relação de dispersão dos magnons de superfície. Tomamos

$$S = 1.0; d_v = 0.2; \zeta_v = 1.36;$$

$$A : d_s = 0.6; B : d_s = 0.75; C : d_s = 1.2.$$

$$v = \frac{w}{2J^{\perp}}; \Omega(\vec{k}_{\parallel}) = \left\{ 1 - \frac{1}{2} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \right\}.$$

$$\zeta = \frac{k_B T}{z_1 J_1}.$$

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Neste trabalho estudamos o comportamento da magnetização e dos magnons de superfície em função da temperatura para um cristal ferromagnético semi-infinito. Consideramos um modelo de Heisenberg com interação de intercâmbio entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples semi-infinita, além de uma anisotropia uniaxial de íon único, com valores diferentes para a superfície (d_s) e para o volume (d_v). Utilizando o formalismo das funções de Green, calculamos autoconsistentemente as magnetizações dos dois primeiros planos em função da temperatura e dos parâmetros considerados no Hamiltoniana. Admitimos que para $\lambda \gg 2$ a magnetização é igual à de um sistema infinito. Essa aproximação é utilizada com o objetivo de tornar os cálculos computacionais mais simples. Além disso, pode ser mostrado⁽⁵⁾ que essa aproximação é razoável, tendo em vista que a convergência para a magnetização de volume ocorre tomando-se um número pequeno de planos. A magnetização de volume foi também calculada autoconsistentemente para qualquer valor de spin na aproximação RPA⁽²⁷⁾.

No caso particular em que $S = 1/2$, levamos em consideração apenas interações de intercâmbio isotrópicas entre primeiros e segundos vizinhos. Qualquer que seja a relação existente entre a magnitude dessas interações, verificamos que a temperatura crítica de superfície e de volume são idênticas, conforme mostramos nas Figs. (8) e (9).

Neste trabalho, embora consideramos uma anisotropia uniaxial de íon único, obtivemos para a magnetização de superfície, resultados semelhantes aos obtidos por Selzer e Majlis⁽¹⁵⁾, que tomaram uma anisotropia no termo de intercâmbio.

Entretanto, obtivemos resultados interessantes ao tomarmos as contribuições da anisotropia uniaxial de íon único na superfície.

No caso de $S = 1$ e considerando somente interações de intercâmbio entre primeiros vizinhos, verificamos que dependendo da relação existente entre as anisotropias uniaxiais de superfície e volume é possível de se obter uma superfície ferromagnética sobre um volume paramagnético, conforme mostramos nas Figs. (14) e (15). Em particular na Fig. (13) mostramos os valores críticos do parâmetro de anisotropia de superfície (d_s^c) em função de d_v . Neste caso, se $d_s > d_s^c$, verificamos que a temperatura crítica de superfície é tanto maior quanto maior for o valor do parâmetro d_s conforme mostra a Fig. (12).

Nos capítulos 4 e 5 o espectro de energia dos magnons superficiais foi determinado em função da temperatura, vetor de onda e parâmetro de anisotropia uniaxial de íon único. Os resultados obtidos para os espectros de energia dos magnons de volume e superfície são qualitativamente semelhantes àqueles obtidos por Selzer e Majlis⁽¹⁵⁾.

Neste trabalho empregamos sistematicamente o método das funções de Green juntamente com a aproximação RPA.

Embora a aproximação RPA não leve em conta efeitos de correlação transversal, os resultados obtidos nessa aproximação são satisfatórios nas regiões de baixas e altas temperaturas. A utilização de desacoplamentos mais sofisticados, como por exemplo de Callen⁽²⁷⁾, tornam os cálculos mais complexos e os resultados obtidos diferem ligeiramente daqueles obtidos na aproximação RPA⁽³²⁾.

As perspectivas de futuras pesquisas na área de magnetismo de superfície são promissoras. Entre os possíveis trabalhos que podemos sugerir dentro da linha de pesquisa seguida nesta dis

sertação destacamos:

a) Estudar em detalhe o comportamento da magnetização de superfície na região de baixas temperaturas, empregando-se, por exemplo, as expansões em ondas de spin.

b) Calcular as propriedades termodinâmicas relevantes como por exemplo, a susceptibilidade magnética, calor específico, função de correlação, etc...

c) Explorar o efeito do campo magnético nas propriedades do cristal ferromagnético semi-infinito. Em particular, considerar situações em que o campo magnético possa ser perpendicular à superfície e onde os efeitos de campo desmagnetizante devem ser levados em conta.

d) Investigar o comportamento das magnetizações de superfície e dos magnons superficiais quando outros tipos de anisotropias devam ser levadas em consideração: anisotropias dipolares, ortorrômbicas, íon único, exchange, etc...

e) Tentar aplicar o formalismo desenvolvido neste trabalho no estudo das transições de fase em sistemas antiferromagnéticos, a fim de verificar a contribuição dos magnons de superfície nas transições.

f) Finalmente, estudar os efeitos de diluição na superfície de sistemas ferromagnéticos semi-infinitos.

APÊNDICE A

Na resolução de problemas em Física do Estado Sólido frequentemente encontramos integrais que devem ser calculadas na primeira zona de Brillouin:

$$g = \frac{1}{V_c^*} \int_{ZB} f(\vec{k}) d\vec{k} \Rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) \quad (1)$$

onde V_c^* é o volume da célula primitiva na rede recíproca e N o número de células primitivas do cristal.

Em geral a Eq.(1) não é de fácil manipulação analítica ou numérica, sendo muitas vezes necessário o desenvolvimento de métodos especiais para sua resolução. Entre algumas alternativas encontradas na literatura podemos citar:

- a) Escolha de um número relativamente grande de pontos igualmente espaçados na primeira zona de Brillouin.
- b) Adoção do Método dos pontos especiais^(7,8,9,29).

Escolhemos a segunda alternativa em nosso trabalho, por ser mais eficiente, já que o tempo de computação envolvido é relativamente pequeno.

A idéia básica do método dos pontos especiais consiste em considerar válida a seguinte equação:

$$\bar{f} = \frac{1}{V_c^*} \int_{ZB} f(\vec{k}) d\vec{k} = \sum_{i=1}^N f(\vec{k}_i) \cdot \omega_i \quad (2)$$

onde \vec{K}_i são os pontos especiais, e w_i seus respectivos pesos, sendo que $\sum_{i=1}^3 w_i = 1$

O método consiste em gerar esses pontos, a partir das operações de simetria da rede em consideração. Por exemplo, para uma rede cúbica simples pode ser mostrado⁽⁸⁾ que os pontos especiais são gerados através da seguinte equação:

$$\vec{K}_i = \vec{K}_1 + T_i \vec{K}_2 \quad (3)$$

onde T_i representa o conjunto de todas as operações de simetria do grupo pontual⁽²⁹⁾ do cristal em consideração, e que $\vec{K}_1 = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ e $\vec{K}_2 = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$. Aplicando-se a equação acima para cada uma das operações de simetria, obtém-se quatro novos pontos especiais, que em unidades de $\frac{2\pi}{a}$, são dados por:

$$\begin{aligned} \vec{K}_1 &= \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right), \quad \vec{K}_2 = \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right) \\ \vec{K}_3 &= \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right) \quad \text{e} \quad \vec{K}_4 = \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

Os fatores peso w_i de cada ponto especial \vec{K}_i são determinados pela seguinte regra geral: seja n_i o número de diferentes vetores de onda obtidos quando cada \vec{K}_i sofre a ação de cada um dos elementos de T . O fator peso será dado pela seguinte relação:

$$w_i = \frac{n_i}{\sum_j n_j} \quad (5)$$

Para os vetores \vec{k}_1 e \vec{k}_4 obtemos $n_{1,4} = 8$ vetores de onda diferentes. Por outro lado, para os vetores \vec{k}_2 e \vec{k}_3 , temos que $n_{2,3} = 24$ vetores diferentes, então:

$$\omega_{3,4} = \frac{8}{64} = \frac{1}{8} \quad \text{e} \quad \omega_{2,3} = \frac{24}{64} = \frac{3}{8} \quad . \quad (6)$$

Conjuntos com um número maior de pontos especiais podem ser obtidos a partir dos seguintes pontos de referência, dados no trabalho de Chadi-Cohen⁽⁸⁾,

$$\vec{K}_n = \frac{1}{8} \left(\frac{2\pi}{a} \right) \left(\frac{1}{2^n}, \frac{1}{2^n}, \frac{1}{2^n} \right) \quad , \quad (7)$$

juntamente com os quatro vetores \vec{k}_j obtidos anteriormente. Repetindo-se o mesmo procedimento efetuado a partir da Eq.(3), e com a seguinte relação

$$\vec{K}_m = \vec{K}_j + T_i [\vec{K}_n] \quad (8)$$

obtem-se, para $n = 1$ um conjunto de novos vinte pontos especiais \vec{K}_m que satisfazem as seguintes condições:

- a) $\vec{K}_m = \frac{\pi}{8a} (i, j, k)$
- b) As componentes dos vetores \vec{K}_m são tais que $i, j, k \leq 7$, inteiros, positivos e ímpares.
- c) Devido às operações de simetria do grupo pontual os seguintes vetores são equivalentes:

$$(i, j, k) = (i, k, j) = (j, i, k) = (j, k, i) = (k, i, j) = (k, j, i)$$
 isto implica que, por exemplo, os vetores $(1, 3, 3)$, $(3, 3, 1)$ e $(3, 1, 3)$ são equivalentes.

d) Os pesos dos pontos especiais são dados por:

$$w_1 = \frac{1}{64} \quad \text{para os pontos do tipo (a,a,a)}$$

$$w_2 = \frac{3}{64} \quad \text{para os pontos do tipo (a,a,b)}$$

$$w_3 = \frac{3}{32} \quad \text{para os pontos do tipo (a,b,c) .}$$

Repetindo o processo anterior é possível de se obter um conjunto de oitocentos e dezesseis pontos especiais, \vec{K}_p , que listamos abaixo:

a) $\vec{K}_p = \left(\frac{2\pi}{a} \right) \frac{1}{64} (i,j,k)$,

b) As componentes dos vetores \vec{K}_p são tais que $i,j,k \leq 31$, inteiros positivos e ímpares.

c) A condição de equivalência dada para os vetores \vec{K}_m continua válida para os vetores \vec{K}_p .

d) Os pesos dos vetores \vec{K}_p são dados por:

$$w_1 = \frac{3}{2048} \quad \text{para os vetores do tipo (a,b,c)}$$

$$w_2 = \frac{3}{4096} \quad \text{para os vetores do tipo (a,a,b)}$$

$$w_3 = \frac{1}{4096} \quad \text{para os vetores do tipo (a,a,a)}$$

Como exemplo de aplicação do método dos pontos especiais, estudamos a seguinte função que apresenta singularidade na origem e é de interesse em problemas de magnetismo:

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\vec{K}} \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[\cos(K_x a) + \cos(K_y a) + \cos(K_z a) \right] \right\}^{-1} \quad (9)$$

Verificamos que o valor numérico de F é praticamente o mesmo se efetuarmos a soma, na primeira zona de Brillouin, com um número considerável de pontos igualmente espaçados, por exemplo oito mil pontos, ou com apenas um conjunto de quatro pontos especiais apresentados anteriormente com seus respectivos pesos. A seguir apresentamos os resultados que obtivemos para a função F :

- a) Oito mil pontos igualmente espaçados, $F = 1.3136$
- b) Vinte e sete mil pontos igualmente espaçados,
 $F = 1.3534$
- c) Quatro pontos especiais, $F = 1.2930$
- d) Um ponto especial, $F = 1.000$
- e) Vinte pontos especiais, $F = 1.4106$
- f) Oitocentos e dezesseis pontos especiais,
 $F = 1.4900$

À medida que cresce o número de pontos especiais 1,516386 derivado em termos de integrais elípticas⁽¹²⁾. O método dos pontos especiais, descrito brevemente neste Apêndice, foi utilizado para calcular integrais na primeira zona de Brillouin em três dimensões. As integrais bidimensionais que aparecem no capítulo das propriedades do sistema semi-infinito, foram efetuadas através dos dez pontos especiais, em unidades de $\frac{\pi}{a}$, e seus respectivos pesos apresentados no trabalho de Cunnigham⁽⁹⁾, para uma rede quadrada que listamos abaixo:

$$\begin{aligned}
 \vec{K}_1 &= \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right), & \vec{K}_6 &= \left(\frac{5}{8}, \frac{1}{8}\right), \\
 \vec{K}_2 &= \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8}\right), & \vec{K}_7 &= \left(\frac{7}{8}, \frac{1}{8}\right), \\
 \vec{K}_3 &= \left(\frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right), & \vec{K}_8 &= \left(\frac{5}{8}, \frac{3}{8}\right), \\
 \vec{K}_4 &= \left(\frac{7}{8}, \frac{7}{8}\right), & \vec{K}_9 &= \left(\frac{7}{8}, \frac{3}{8}\right), \\
 \vec{K}_5 &= \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{8}\right), & \vec{K}_{10} &= \left(\frac{7}{8}, \frac{5}{8}\right),
 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\omega_{1,2,3,4} = \frac{1}{16} \quad e \quad \omega_{5,6,7,8,9,10} = \frac{1}{8} .$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

01. ZUBAREV, D.N. Double-Time Green functions in statistical physics. Sov. Phys. Uspekhi, 3: 320, 1960.
02. REZENDE, S.M. Topics in Magnetism: magnetic excitations in insulators. V Brasiliam Simposium in Theoretical Physics. Rio de Janeiro, Livros Técnicos Científicos, 1980.
03. TANNOUDJI, C.C. et alli. Quantum mechanics. 2. ed. Paris, 1977. V. 1, p. 643.
04. CALLEN, H.B. & ANDERSON, F.B. Statistical mechanics and field-induced phase transitions of the Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. , 136(4): 1068, 1964.
05. SELZER, S. Magnetismo em Superfícies. Tese de Doutorado. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 1981.
06. TAHIR-KHELI, R. A. & TER HAAR, D. Use of Green functions in the theory of ferromagnetism. I. General discussion of spin-S case. Phys. Rev., 127: 88, 1962.
07. BALDERESCHI, A. Mean-value point in the Brillouin zone. Phys. Rev. B, 7: 5212, 1973.
08. CHADI, D.J. & COHEN, M. L. Special points in the Brillouin zone. Phys. Rev. B, 8: 5747, 1973.
09. CUNNINGHAM, S.B.L. Special points in the two dimensional Brillouin zone. Phys. Rev. B, 10: 4988, 1974.

10. CHOPRA, K. L. Thin film phenomena. New York, 1969. p. 608.
11. HEWSON, A.C. & TER HAAR, D. The Green functions method in the theory of antiferromagnetism. Physica, 30: 890, 1964.
12. WATSON, G.N. Quart J. Math., 10: 266, 1939.
13. MADELUNG, O. Introduction to solid-state theory. Berlin, Springer-Verlag, 1978. V. 2, Cap. 2, p. 50 e Cap. 9. P. 425.
14. ASHCROFF, N.W. & MERMIN, N.D. Solid state physics. Philadelphia, Holt Rinehart and Winston, 1976. Cap. 9, p. 150.
15. SELZER, S. & MAJLIS, N. Effects of surface exchange anisotropy in Heisenberg ferromagnet. Phys. Rev. B, 27(1): 544, 1983.
16. THE-HUNG, D.; LEVY, J.C.S. & NAGAI, O. Effects of surface spin waves and surface anisotropy in magnetic thin films at finite temperatures. Phys. Stat. Sol. B, 93: 351, 1979.
17. SELZER, S. & MAJLIS, N. Theory of surface magnetization and the low-energy, spin-polarized, inelastic electron scattering of insulating ferromagnets at finite T. Phys. Rev. B, 26(1): 404, 1981.
18. DE WAMES, R.E. & WOLFRAM, T. Theory of spin waves in the Heisenberg ferromagnets. Phys. Rev., 185(2): 720, 1969.
19. WALL, H.S. Analytic Theory of Continued Fractions. D. Van Nostrand, 1948. Cap. 1, p. 13.
20. BINDER, K. & HOHENBERG, P.C. Phys. Rev. B, 9: 2194, 1974.

21. DEVLIN, J.F. Effect of cristal-field anisotropy on magnetically ordered systems. Phys. Rev. B, 4(1): 136, 1971.
22. WHITE, R.M. Quantum theory of magnetism. New York, McGraw-Hill Book, 1970. Cap. 2, p. 57.
23. TAMUKA, I. Surface effects in Ising ferromagnets with anisotropy. J. Phys. Soc. Japan, 72(4): 1105, 1985.
24. LINES, M.E. Magnetism in two dimensions. J. App. Phys., 40: 1352, 1969.
25. TIWARA, M. & SRIVASTAVA, R.N. Effect of anisotropy on Curie temperature in Heisenberg ferromagnet. Indian J. Pure & Appl. Phys., 19: 1983.
26. EVARESTOV, R.A. & SMIRNOV, V.P. Special points of the Brillouin zone and their use in the state theory. Review Article, Phys. Stat. Sol. B, 119: 9, 1983.
27. CALLEN, H.B. Green function of ferromagnetism. Phys. Rev., 130(3): 890, 1963.
28. GRADSHTEYN, I.S. & RYZHIK, I.M. Table of integrals, series, and products. New York, Academic Press, 1980. p. 1032.
29. CALLAWAY, J. Quantum theory of the solid state. New York, Academic Press, 1976. p. 178.
30. FIGUEIREDO, W. Determinação das fronteiras de fase de sistemas antiferromagnéticos anisotrópicos a baixas temperaturas. Instituto de Física da USP, 1980.
31. RAW, C. J. Magn. Magn. Mater., 31, 874, 1983.

32. WELLER, D. et al. Observation of surface-enhanced magnetic order and magnetic surface reconstruction on Gd(001). Phys. Rev. Letters., 54: 1555, 1985.