

SILVIA SELZER

MAGNETISMO EM SUPERFÍCIES

Tese  
de  
DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro, 1981

*a Marcela, Pablo e Flavia*

## RESUMO

Neste trabalho estuda-se o ferromagneto semi-infinito de Heisenberg com interações entre primeiros vizinhos em redes magnéticas cúbicas simples (CS) e de face centrada (CFC), para  $T \neq 0$ . Pela primeira vez são calculados simultaneamente, de forma autoconsistente, a magnetização por plano, o valor no volume e o espectro das excitações magnéticas para qualquer valor de spin  $S$ , obtendo-se resultados numéricos para toda temperatura até  $T_c$  e para diversos valores dos parâmetros da interação na superfície. Com isto consegue-se mostrar o "cross-over" do comportamento tri-dimensional ao bi-dimensional à medida que a superfície se desacopla do interior. A temperaturas finitas o perfil autoconsistente da magnetização obtido está de acordo com cálculos na aproximação de campo molecular e com as simulações numéricas Monte-Carlo, de Binder e Hohenberg, embora naqueles trabalhos só tivessem sido considerados alguns valores particulares das interações na superfície. A baixas temperaturas, as relações de dispersão para o CS estão de acordo com resultados teóricos obtidos na aproximação de ondas de spin. Os resultados para as relações de dispersão de magnons superficiais na estrutura CFC são inéditos. Também o são os correspondentes à variação das relações de dispersão para ambas as estruturas CS e CFC em função da temperatura. Para fazer os presentes cálculos desenvolveu-se uma adaptação de uma formulação da RPA devi-

da a Hewson e Ter Haar para antiferromagnetos isolantes e spin  $S$  arbitrário, ao problema dos ferromagnetos isolantes semi-infinitos. Os resultados para uma superfície (010) no CS e para a superfície (111) no CFC são qualitativamente similares. Quando as interações de intercâmbio são isotrópicas, a magnetização da superfície é governada pela do volume, e se anula na mesma temperatura  $T_C^V$ . A solução do sistema de equações autoconsistentes é simplificada desprezando-se a variação espacial da magnetização além do segundo plano. Utiliza-se um método para avaliar as funções de Green na representação mista, de plano e de  $\vec{k}_\parallel$ , dos operadores de spin. Calcula-se também a seção diferencial de espalhamento inelástico para elétrons de baixa energia por uma rede CFC, para diversas temperaturas e parâmetros da superfície variáveis. Os resultados mostram características qualitativamente semelhantes aos obtidos por Harriague e Majlis a baixas temperaturas para uma rede CCC. A dependência das curvas da seção de choque em função da transferência de energia, com os parâmetros da superfície, sugerem a possibilidade de tirar conclusões sobre aqueles a partir da determinação experimental da seção de choque, o que hoje é viável graças à existência de fontes de feixes intensos de elétrons polarizados. Para interações anisotrópicas na superfície verifica-se que, tal como acontece no modelo de Ising (anisotropia infinita), a magnetização da superfície pode ser maior que a do volume, se as interações naquela forem suficientemente maiores do que neste.

## Agradeço

- a *Norberto Majlis* pela sua orientação, apoio e estímulo.

- a *Enrique Anda, José Ernesto Ure e Sergio Makler* pelas proveitosas discussões. Em particular a *Sergio Makler* pela colaboração na parte computacional deste trabalho.

- ao *International Centre For Theoretical Physics* pelas facilidades de computação, assim como ao *Núcleo de Processamento de dados da Universidade Federal Fluminense* e ao da *Universidade Federal do Rio de Janeiro*.

- a *Vera Rosenthal* pelo trabalho de datilografia e pela contribuição na correção do português.

- a todos que contribuíram para tornar possível a realização deste trabalho.

## SUMÁRIO

|  | Pág. |
|--|------|
| Agradecimentos .....   | iii  |
| Resumo .....   | vi   |
| Lista de Figuras .....   | viii |
| Lista de Tabelas .....   | x    |
| <br>   |      |
| CAPÍTULO 1 - Introdução .....  | 1    |
| <br>   |      |
| CAPÍTULO 2 - Origem e descrição da interação de intercâmbio .....                          | 9    |
| 2.1 - Interação de intercâmbio direto .....  | 9    |
| 2.2 - Interação de "supertroca" .....  | 14   |
| <br>   |      |
| CAPÍTULO 3 - Função de Green para o sistema semi-infinito .....                            | 19   |
| 3.1 - Introdução .....   | 19   |
| 3.2 - Método da função de Green .....  | 19   |
| 3.3 - Cálculo da função de Green na RPA .....  | 24   |
| 3.4 - Cálculo da magnetização .....  | 27   |
| <br>   |      |
| CAPÍTULO 4 - Aplicações aos ferromagnetos cúbicos simples e cúbicos de face centrada ..... | 32   |
| 4.1 - Introdução .....   | 32   |
| 4.2 - Sistema cúbico simples .....   | 32   |
| 4.3 - Modos localizados e modos de volume. Significado físico do parâmetro $\xi$ .....     | 41   |
| 4.4 - Sistema cúbico de face centrada .....  | 43   |

|   |    |
|---|----|
| CAPÍTULO 5 - Cálculo numérico da magnetização .....   | 50 |
| 5.1 - Introdução .....  | 50 |
| 5.2 - Cálculo autoconsistente .....   | 50 |
| 5.3 - Resultados para a magnetização e as re-<br>lações de dispersão de magnons superfi-<br>ciais ..... | 54 |
| CAPÍTULO 6 - Espalhamento inelástico de elétrons .....  | 66 |
| 6.1 - Introdução .....  | 66 |
| 6.2 - Potencial de interação .....  | 67 |
| 6.3 - Função de onda do elétron incidente ..  | 69 |
| 6.4 - Seção diferencial de espalhamento ....  | 70 |
| 6.5 - Resultados .....  | 74 |
| CAPÍTULO 7 - Efeito da anisotropia superficial na intera-<br>ção de intercâmbio .....                   | 79 |
| CAPÍTULO 8 - Discussão e Conclusões .....   | 84 |
| APÊNDICE A - Cálculo dos elementos de matriz do Hamiltoni-<br>ano de Heitler e London .....             | 87 |
| APÊNDICE B - Interpretação da aproximação de Bogolyubov<br>e Tyablicov (RPA) para o sistema infinito .. | 90 |

## LISTA DE FIGURAS

| Figura   | Pág. |
|--|------|
| 2.1 - Esquema de dois possíveis estados fundamentais do $Mn^{++}O^{--}$ .....  | 17   |
| 2.2 - Esquema do estado excitado tipo singleto $\psi'_s$ ..  | 17   |
| 2.3 - Esquema do estado excitado tipo tripleto $\psi'_t$ ..  | 18   |
| 4.1 - Esquema das interações e a variação da magnetização nos diversos planos para a estrutura cúbica simples .....  | 33   |
| 4.2 - Representação de $\xi = t \pm (t^2 - 1)^{1/2}$ .....   | 40   |
| 4.3 - Rede hexagonal correspondente à superfície (111) do CFC .....  | 45   |
| 5.1 - Magnetização superficial na estrutura cúbica simples em função de temperatura reduzida $\tau = kT/6Ih^2$ ..... | 57   |
| 5.2 - Cristal cúbico de face centrada. Magnetização em função da temperatura $\tau = kT/12Ih^2$ . $S=1/2$ .          | 58   |
| 5.3 - Cristal cúbico de face centrada. $S = 7/2$ . Magnetização de superfície .....                                  | 59   |
| 5.4 - Relações de dispersão para magnons de superfície CS (010) .....  | 60   |
| 5.5 - Relações de dispersão para magnons de superfí-   |      |



|     |   |    |
|-----|---|----|
|     | cie CFC (111) .....   | 61 |
| 5.6 | - Perfis de magnetização CS (010), S=1/2 .....                                  | 62 |
| 5.7 | - Perfis de magnetização CFC (111), S=1/2. ....                                 | 63 |
| 5.8 | - Perfis de magnetização CFC (111), S=7/2. ....                                 | 64 |
| 5.9 | - $\xi(\vec{k}_{  })$ , fator de amortecimento dos magnons superficiais         | 65 |
| 6.1 | - Seção diferencial de espalhamento inelástico<br>de elétrons, $\tau = 2$ ..... | 77 |
| 6.2 | - Idem Fig. 6.1, $\tau = 5$ .....   | 78 |
| 7.1 | - Magnetização de superfície com anisotropia ...                                | 83 |

LISTA DE TABELAS

| Tabela  | Pág. |
|---|------|
| 4.1 - Transformada de Fourier dos parâmetros de intercâmbio $I_{\ell m}(\vec{k}_n)$ .....   | 47   |
| 5.1 - Comparação dos valores da magnetização superficial calculados com um ( $\sigma_0^{(1)}$ ) e dois ( $\sigma_0^{(2)}$ ) planos variados. Estrutura CS, $S = 1/2$ , $\tau=0.28$ para diversos valores de $\epsilon_{\parallel}$ e $\epsilon_{\perp}$ ..... | 56   |

CAPÍTULO 1INTRODUÇÃO

A partir da década de sessenta surgiu um grande interesse no estudo dos efeitos da superfície em física do estado sólido. Uma das razões pelas quais se incorporaram os efeitos de superfície a sistemas magnéticos foi a crescente necessidade de reduzir os tamanhos dos sistemas, de modo que a relação superfície-volume aumentou a ponto de modificar substancialmente as propriedades dos sistemas considerados. Isto é muito importante no desenvolvimento da tecnologia de memórias magnéticas para computadores, comunicações etc. Além das razões tecnológicas nós nos propusemos a estudar o problema pelo interesse teórico. Em todo experimento a presença de superfícies delimitadoras das amostras é um fato naturalmente inevitável. A teoria das excitações elementares é desenvolvida originalmente considerando-se os sistemas como sendo infinitos, de maneira que esta teoria requer correções para descrever excitações em sistemas reais, com superfícies.

Se introduzimos uma superfície em um cristal infinito, isto é, se considerarmos o sistema semi-infinito, há uma quebra de simetria na direção perpendicular ao plano da superfície. A função de ondas de uma excitação elementar deve respeitar a simetria de translação do cristal, o que se expressa matematicamente no teorema de Bloch, válido para um cristal infinito, que estabelece: as funções de onda das excitações elementares de um sistema com um Hamiltoniano invariante sob o

grupo de translações discretas de uma rede cristalina infinita tem a forma de um produto de uma onda plana por uma função  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  com a periodicidade da rede cristalina

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.1)$$

(função de Bloch). Para uma rede infinita exige-se que  $\vec{k}$  seja real como condição para que a amplitude da função de ondas da excitação no espaço se mantenha limitada.

Porém, se considerarmos o cristal semi-infinito, já não teremos propagação ao longo da direção perpendicular à superfície. Cortando o cristal perfeito infinito ao longo de um plano atômico, para gerar um cristal semi-infinito, ainda podemos considerar funções do tipo das de Bloch, soluções de problema ilimitado, mas adequadas às condições de contorno com uma superfície, o que conduz a

$$\psi_{\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}_{\perp}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}_{\parallel}} e^{i(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) + B_{\vec{k}_{\parallel}} e^{-i(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) \quad (1.2)$$

onde,  $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + \vec{r}_{\perp}$  e  $\vec{k}_{\parallel}$  e  $\vec{k}_{\perp}$  são função da escolha dos eixos cristalinos. Se  $\vec{r}_{\perp}$  está na direção  $y$ , a função exponencial será  $e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{ik_{\perp}y}$ , de modo que se  $y$  cresce em direção ao interior do cristal,  $\vec{k}_{\perp}$  já não precisa ser real.

Se  $k_{\perp} = iq$ ,  $q > 0$ , por exemplo, a função de ondas será decrescente, satisfazendo a condição assintótica para  $y$  tendendo a infinito, própria de um estado localizado na superfície:  $\psi \rightarrow 0$ ,  $y \rightarrow \infty$ , e devemos exigir que  $B_{\vec{k}_{\parallel}} \equiv 0$  para este caso.

Resulta então que existem soluções com dois tipos de comportamento, que vamos analisar para um valor fixo do vetor de ondas  $\vec{k}_{\parallel}$ :

1) Existe uma infinidade de ondas estacionárias na direção perpendicular à superfície, com valores do comprimento de ondas  $\lambda = 2\pi/k_{\perp}$  dentro de um intervalo finito, e com frequências que formam uma distribuição contínua. Como se demonstrará mais adiante na seção 4.2, os limites do espectro contínuo e a relação de dispersão  $\omega(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$  são exatamente os mesmos que na ausência da superfície, ou seja, para o cristal infinito. Estas soluções tem amplitude não nula em todo o cristal.

2) Dependendo dos parâmetros que caracterizam a superfície, existem ou não soluções que na direção perpendicular se comportam como ondas evanescentes, 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. Vemos casos específicos destes dois tipos de soluções nas figs. 5.4 e 5.5.

No caso magnético as excitações elementares são as ondas de desvio de spin em relação à direção do spin no estado fundamental completamente ordenado, os magnons.

Este trabalho trata de cristais cúbicos isolantes ferromagnéticos, sistemas nos quais predomina a interação de intercâmbio, e portanto bem representados pelo Hamiltoniano de Heisenberg:

$$H = - \sum_{\vec{\ell} \neq \vec{m}} I_{\vec{\ell} \vec{m}} \vec{S}_{\vec{\ell}} \cdot \vec{S}_{\vec{m}} \quad (1.3)$$

onde  $I_{\ell m}^{\rightarrow\rightarrow}$  são as integrais de intercâmbio,  $\vec{S}_{\vec{\ell}}$  é o operador de spin correspondente ao sítio  $\vec{\ell}$  da rede magnética. Supomos que a interação é de curto alcance, e só entre primeiros vizinhos.

As integrais de intercâmbio são consideradas parâmetros do problema. Aquelas que envolvem átomos na superfície ficam modificadas no nosso modelo, introduzindo-se  $I_{\parallel}$  entre ions na superfície e  $I_{\perp}$  entre um spin da superfície e um spin vizinho no interior. Estes parâmetros representam a influência sobre as integrais de intercâmbio superficiais de vários fatores:

a) a vizinhança de um ion na superfície e no interior do sistema é diferente, tendo os spins superficiais menos vizinhos, e estando contíguos ao vácuo. Isto tem efeitos muito drásticos sobre os orbitais eletrônicos dos estados  $d$  (ou  $f$ , segundo seja o caso), os quais são em última instância responsáveis pelos valores numéricos dos  $\{I_{ij}\}$ .

b) pode-se esperar que a superfície sofra em alguma medida uma reconstrução e/ou uma relaxação. Entende-se por reconstrução uma mudança na malha bi-dimensional do plano (suposto que este seja um plano cristalino ideal) da superfície. Este caso não será considerado no que se segue. Por relaxação entendemos a mudança da distância interplanar na superfície e no interior. Este último fenômeno, se existisse, alteraria de várias maneiras os valores numéricos das integrais de intercâmbio, sendo o efeito mais trivial a mudança da superposição dos orbitais afetados, que depende exponencialmente da distância entre eles. Eventualmente, consideraremos a modificação da simetria do Hamiltoniano, estudando efeitos de aniso-

tropia superficial.

Serão estudados neste trabalho os efeitos da superfície sobre a dinâmica, ou seja, como se modifica o espectro das excitações. Em particular, como é que aparecem estados localizados. Devido à estrutura autoconsistente da aproximação que adotamos, a RPA, deve-se calcular simultaneamente o perfil espacial da magnetização na direção perpendicular à superfície.

Há uma série de trabalhos na literatura que abordam estes problemas parcialmente. Mills e Maradudin<sup>(1)</sup> calculam o efeito da superfície no calor específico e no desvio de spin associado a cada sítio de um cristal ferromagnético semi-infinito a baixas temperaturas e sem considerar  $I_{||}$  e  $I_{\perp}$  diferentes de  $I$  de volume. Eles resolvem esse problema na aproximação de Holstein-Primakoff, supondo  $\langle S_{\lambda}^Z \rangle \equiv S$ . Nesta aproximação, adequada para baixas temperaturas, só existem magnons localizados em uma malha magnética cúbica simples, com superfície (100), se as interações com os primeiros e segundos vizinhos de um dado spin são consideradas. Este cálculo não é autoconsistente.

O espectro das excitações magnéticas foi também estudado por De Wames e Wolfram<sup>(2)</sup>. Eles obtêm os modos de ondas de spin localizados na superfície para ferromagnetos cúbicos, admitindo a modificação dos parâmetros de intercâmbio da

superfície, e calculam as relações de dispersão para o cristal cúbico simples; escrevem as equações de movimento para as transformadas de Fourier dos operadores  $S_{\lambda}^{+}$  e  $S_{\lambda}^{-}$  em relação às coordenadas espaciais paralelas à superfície e em relação ao tempo, e desacoplam as equações mediante a aproximação  $\langle S_{\lambda}^Z \rangle \simeq S$ , válida para  $T \simeq 0$ . Este cálculo não é autoconsistente.

Takeda e Fukuyama<sup>(3)</sup> calculam o perfil autoconsistente da magnetização e a variação desta com a temperatura na aproximação de campo médio, com o que deixam de lado a dinâmica das excitações superficiais.

Harriague e Majlis<sup>(4)</sup> obtêm o espectro de energias de magnons localizados em falhas de empilhamento em um ferromagneto de Heisenberg de estrutura CFC a baixas temperaturas, usando, como Mills e Maradudin, a aproximação de Holstein e Primakoff, e obtêm que os modos localizados dependem dos parâmetros  $I_{\parallel}$  e  $I_{\perp}$  da falha.

O recente desenvolvimento de fontes de elétrons polarizados<sup>(5)</sup> tem estimulado o estudo das propriedades superficiais dos sistemas magnéticos. Experiências de espalhamento elástico e inelástico de elétrons de baixa energia sobre superfícies de amostras de materiais magnéticos isolantes podem oferecer informação muito detalhada sobre a estrutura magnética da superfície e sobre o espectro das excitações magnéticas, localizadas na superfície<sup>(6,7)</sup>. Isto é devido ao fato de que os elétrons com energias até mais ou menos 150eV não penetram mais do que um ou dois planos atômicos dentro do cristal, sendo, em consequência, uma ferramenta adequada para estudar propriedades das superfícies<sup>(8)</sup>.



No Capítulo 2 tenta-se explicar de uma maneira qualitativa o mecanismo de "supertroca" responsável pelas propriedades magnéticas de certos compostos de terras raras, aos quais se aplicaria a teoria desenvolvida neste trabalho<sup>(9-12)</sup>.

No Capítulo 3 descreve-se o método da função de Green para o sistema semi-infinito adaptando uma aproximação RPA para spin  $S$  arbitrário, desenvolvida originalmente por Hewson e Ter Haar, ao caso de sistemas com superfície<sup>(7,12)</sup>, para desacoplar as equações.

No Capítulo 4 utilizam-se as funções de Green para sistemas semi-infinitos no caso de ferromagnetos isolantes de estrutura cúbica simples (CS) e de face centrada (CFC) com Hamiltoniano isotrópico de Heisenberg.

Com a teoria desenvolvida nos capítulos 3 e 4, calcula-se de maneira autoconsistente no Capítulo 5 a magnetização em cada plano e as relações de dispersão dos magnons superficiais em função da temperatura e das constantes de intercâmbio para os sistemas tratados.

O Capítulo 6 está dedicado ao cálculo da seção diferencial de espalhamento inelástico de elétrons lentos polarizados.

No Capítulo 7 considera-se o efeito da anisotropia superficial na interação de intercâmbio e estuda-se sua influência sobre as propriedades dinâmicas e termodinâmicas dos ferromagnetos considerados. O modelo tenta representar uma camada superficial ferromagnética sobre um substrato paramagnético. Obtemos temperaturas de transição da superfície apreciadas.

velmente maiores que a temperatura do volume<sup>(13)</sup>.

O Capítulo 8 analisa os resultados principais obtidos neste trabalho e indica possíveis linhas de pesquisa sugeridas pelos mesmos.

CAPÍTULO 2

ORIGEM E DESCRIÇÃO DA INTERAÇÃO DE INTERCÂMBIO

2.1 - Interação de intercâmbio direto

Numa tentativa de explicar o magnetismo, Dirac e Heisenberg, independentemente, descobriram a interação de intercâmbio, baseados no princípio de exclusão de Pauli. Esse princípio requer que as funções de onda eletrônicas de coordenadas espaciais e de spin sejam antissimétricas em relação ao intercâmbio de um par de elétrons. Isto faz com que os autovalores da energia dependam das orientações relativas dos spins dos elétrons, já que mantêm os elétrons com spins paralelos afastados e, portanto, reduz a repulsão coulombiana do estado com spins paralelos relativamente àquele com spins antiparalelos<sup>(14)</sup>.

A diferença de energias entre a configuração de spins paralelos e antiparalelos é a energia de intercâmbio. A interação de intercâmbio mais elementar aparece no cálculo da energia de um sistema de dois elétrons.

O Hamiltoniano de dois elétrons (e dois prótons em posições fixas) é (sem considerar a repulsão coulombiana entre os prótons):

$$H = H_1(r_1) + H_2(r_2) + V_2(r_1) + V_1(r_2) + V^{\text{int}}(r_1, r_2) \quad (2.1)$$

onde

$$H_i(r) = -\nabla^2 + V_i(r) \quad (2.2)$$

$$e \quad H_i(r) \phi_i(r) = \varepsilon \phi_i(r) \quad (2.3)$$

$\varepsilon$  é a energia fundamental de um átomo isolado. Vamos considerar  $\phi_i(r)$  real.

O Hamiltoniano  $H$  é simétrico em relação à troca de índices tanto de elétrons quanto de ions.

Definimos

$$\psi_0 = \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \quad (2.4)$$

$$e \quad \psi_1 = \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) \quad (2.5)$$

$$(\psi_0, \psi_0) = 1 \quad (2.6a)$$

$$(\psi_0, \psi_1) = S^2 \quad (2.6b)$$

$$S = (\phi_1, \phi_2) = (\phi_2, \phi_1) \quad (2.6c)$$

Calculamos agora a matriz do Hamiltoniano na base  $(\psi_0, \psi_1)$  (aproximação de Heitler e London) (Apêndice A).

Chamando

$$C = \int \phi_1^2(r_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_2^2(r_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.7)$$

$$V = \int \phi_2(r_1) V_1(r_1) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 = \int \phi_1(r_1) V_2(r_1) \phi_1(r_1) d\vec{r}_1 \quad (2.8)$$

$$t = \int \phi_1(r_1) V_1(r_1) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 \quad (\text{integral de transferência}) \quad (2.9)$$

e

$$I = \iint \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2|} \phi_1(\mathbf{r}_2) \phi_2(\mathbf{r}_1) d\vec{\mathbf{r}}_1 d\vec{\mathbf{r}}_2$$

(integral de intercâmbio). (2.10)

A matriz Hamiltoniana na base  $(\psi_0, \psi_1)$  é:

$$H = \begin{pmatrix} 2\epsilon + 2V + C & 2\epsilon S^2 + 2tS + I \\ 2\epsilon S^2 + 2tS + I & 2\epsilon + 2V + C \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

com autovalores dados por:

$$|H - E| = 0 \quad (2.12)$$

Chamando  $a = 2\epsilon + 2V + C$  e  $b = 2\epsilon S^2 + 2tS + I$ , a

eq. 12 fica:

$$\begin{vmatrix} a - E & b \\ b & a - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.13)$$

cujas soluções são:

$$E_0 = a - b \quad (2.14)$$

$$E_1 = a + b$$

Se a integral de superposição  $S$  é igual a zero, (tight-binding)

$$E_0 = 2\varepsilon + 2V + C - I \quad (2.15)$$

$$E_1 = 2\varepsilon + 2V + C + I \quad (2.16)$$

A diferença de energias  $E_0 - E_1 = -2I$ .

Os autovetores correspondentes a  $E_0$  e  $E_1$  são, na base  $(\psi_0, \psi_1)$ :

$$\text{Para } E_0: \quad \vec{\psi}'_0 = \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix} \quad (\text{função antissimétrica}) \quad (2.17)$$

e o autovetor correspondente a  $E_1$  é:

$$\vec{\psi}'_1 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (\text{função simétrica}) \quad (2.18)$$

Levando-se agora em consideração o princípio de Pauli, a função de ondas total deve ser antissimétrica.

Consideremos  $I > 0$ . As funções de spin correspondentes ao autovalor com menor energia,  $E_0 = a - I$ , devem ser simétricas, e correspondem a  $S = 1$ . São  $\chi_1^\pm (S^Z = \pm 1)$ . (Não consideramos aqui a função de spin com  $S^Z = 0$ ). Portanto, a função de ondas total de mínima energia que pertence ao subespaço de  $S = 1$  (triplete) é

$$\psi_t^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 - \psi_1) \chi_1^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) - \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) \right\} \chi_1^\pm \quad (2.19)$$

A função de onda que corresponde ao autovalor  $E_1 = a + I$  é simétrica; portanto, a função de spin deve ser an-

tissimétrica, correspondendo ao caso de spin  $S = 0$  (singleto),  $\chi_0$ .

A função de onda total do singleto será:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) + \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) \right\} \chi_0 \quad (2.20)$$

É possível descrever qualquer sistema com dois autovalores com um Hamiltoniano efetivo de spin  $1/2$ . Em 1928 Dirac mostrou que, para o caso especial de elétrons localizados em orbitais ortogonais, o efeito do princípio de Pauli podia ser levado em consideração acrescentando ao Hamiltoniano um termo da forma  $\sum_{i < j} -I_{ij} [1/2 + 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j]$ . Com este Hamiltoniano a diferença  $E_0 - E_1 = 2I_{ij}$ . O Hamiltoniano

$$H = - 2 \sum_{i < j} I_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.21)$$

chamado Hamiltoniano de Heisenberg, é o ponto de partida para a descrição de sistemas que apresentam magnetização espontânea. Ele é aceito como válido para a descrição do magnetismo em isolantes, onde os elétrons estão mais ou menos localizados. Se  $I < 0$ , o autovalor com menor energia é  $E_1 = a + I$  e o autovetor correspondente é  $\psi_s$ , ou seja, o estado fundamental com  $I < 0$  é de spins "antiparalelos". No entanto, também se aceita que a definição de energia de intercâmbio seja muito mais complexa que a simples interação entre dois elétrons, descrita acima. Em particular  $I_{ij}$  é o resultado de mais de um mecanismo. No caso de compostos isolantes de Eu, que são reconhecidamente os mais próximos ao ferromagneto ideal de Heisenberg, o mecanismo dominante parece ser o chamado de interação de "supertroca" (15).

## 2.2 - Interação de "supertroca"

Vamos descrever qualitativamente o mecanismo proposto por Kramers<sup>(9)</sup> e desenvolvido por P.W. Anderson<sup>(10)</sup> para explicar o antiferromagnetismo de certas substâncias como MnSe, MnTe etc., em que os ions magnéticos não poderiam ter uma interação de intercâmbio direto suficientemente grande que justificasse o valor da temperatura crítica dessas substâncias.

O comportamento dos compostos magnéticos de  $\text{Eu}^{++}$  pode ser explicado basicamente como os de  $\text{Mn}^{++}$  mas, para simplificar, descrevemos aqui o caso do MnO, pois o  $\text{Mn}^{++}$  tem só um elétron não emparelhado, enquanto que o  $\text{Eu}^{++}$  tem sete<sup>(11)</sup>.

Experimentos realizados por Shull<sup>(12)</sup>, de difração de neutrons por aqueles compostos de Mn, revelam os seguintes fatos:

- 1) Os ions magnéticos  $\text{Mn}^{++}$  formam uma rede CFC;
- 2) Apesar de estarem separados por um ion não magnético (Se, Te, O), os ions de Mn estão fortemente acoplados.

Kramers, visando explicar a interação magnética entre ions de terras raras ou metais de transição em compostos isolantes, propõe que, mesmo na ausência total de superposição de orbitais d ou f dos ions magnéticos, existiria a possibilidade de que o ion ligante tivesse um spin diferente de zero em alguns estados excitados. Estes teriam então uma forte interação de intercâmbio com cada um dos ions magnéticos e, em consequência, forneceria uma interação indireta entre os ions magnéticos adjacentes. A consideração dos estados intermediários deste tipo favoreceria energeticamente a configuração "paralela"



ou "antiparalela" dos ions magnéticos, segundo o caso.

Essa diferença de energia pode ser simulada por um Hamiltoniano efetivo que depende só dos spins dos ions magnéticos e que tem a forma da interação de intercâmbio de Dirac-Heisenberg, descrita na seção 1 deste capítulo:

$$H^{\text{eff}} = I^{\text{eff}} \left( \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right) \quad (2.22)$$

O parâmetro  $J^{\text{eff}}$  desta interação dependerá, de uma maneira mais ou menos complicada, da configuração do estado fundamental e dos estados excitados do sistema formado pelos ions magnéticos e o ion ligante.

Anderson, em seu trabalho, mostra que o Hamiltoniano que descreve dois ions magnéticos com um ion de ligante entre eles pode ser decomposto em três termos aditivos:

$$H = H^0 + H^{\text{tr}} + H^{\text{ex}} \quad (2.23)$$

onde  $H^0$  descreve os ions sem interação,  $H^{\text{tr}}$  é a parte das interações que conecta o estado fundamental do sistema com um certo sub-espço de estados excitados, e  $H^{\text{ex}}$  representa as forças de troca entre o spin total do ligante e os spins dos ions metálicos magnéticos. Tanto  $H^0$  quanto  $H^{\text{tr}}$  são independentes de spin.

Os estados excitados contêm, por hipótese, pelo menos um estado em que o ion do ligante tem spin diferente de zero, e em geral isto obriga a transferir elétrons do ligante para um dos ions metálicos.

Se considerarmos um autoestado aproximado de  $H^0 + H^{tr}$ , calculado até primeira ordem em teoria de perturbações no Hamiltoniano  $H^{tr}$ , teremos:

$$\psi'_{s,t} = a\psi_{s,t}^0 + b\psi_{s,t} \quad (2.24)$$

$$b = \frac{(\psi_{s,t}^0 | H^{tr} | \psi_{s,t})}{\Delta E^{tr}} \quad (2.24a)$$

$$\Delta E^{tr} = E^0 - E_{s,t} \quad (2.24b)$$

$s, t$  (singlete e triplete), indicam diferentes alinhamentos relativos dos spins dos ions metálicos.

Suponhamos, para simplificar, que os coeficientes  $a$  e  $b$  sejam independentes do alinhamento dos spins. Podemos agora calcular a energia total do sistema até primeira ordem em  $H^{ex}$

$$E_{s,t}^{(1)} = E^0 + \Delta E^{tr} + (\psi'_{s,t} | H^{ex} | \psi'_{s,t}) \quad (2.25)$$

O terceiro termo na eq. (25) depende explicitamente do spin do estado intermediário, de maneira que a diferença

$$\begin{aligned} \Delta E^{(1)} &= E_s^{(1)} - E_t^{(1)} = (\psi'_s | H^{ex} | \psi'_s) - (\psi'_t | H^{ex} | \psi'_t) \\ &= b^2 \left[ (\psi_s | H^{ex} | \psi_s) - (\psi_t | H^{ex} | \psi_t) \right] \end{aligned} \quad (2.26)$$

desde que os elementos de matriz de  $H^{ex}$  entre  $\psi_{s,t}^0$  e  $\psi_{s,t}$  sejam

nulos até a ordem considerada de teoria de perturbações. Na fig. 2.1 queremos representar esquematicamente esta situação.

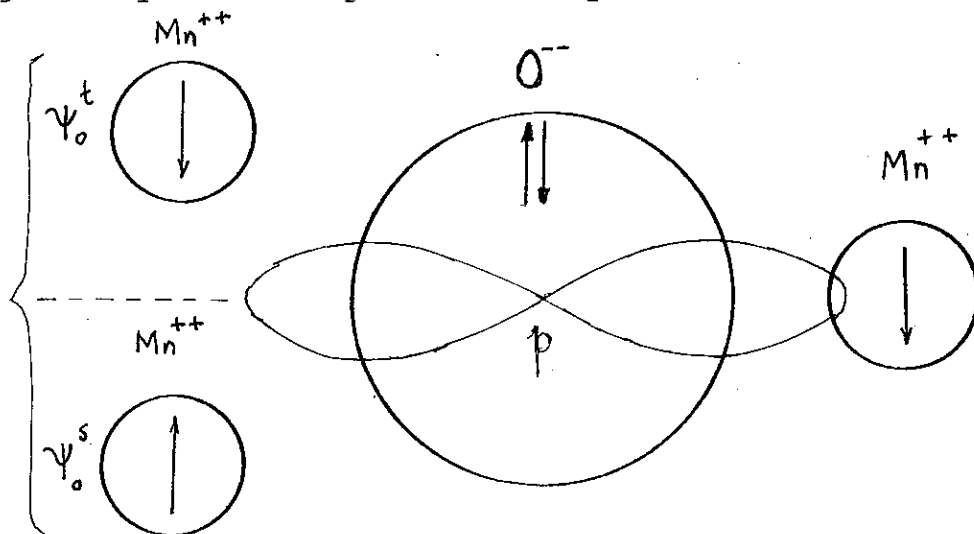


Fig. 2.1 - Esquema de dois possíveis estados fundamentais do  $Mn^{++}O^{--}$

Partindo do estado sem interação singleto  $\psi_0^s$  pode haver uma transição a um estado excitado do tipo singleto  $\psi_s^1$ , como mostra a fig. 2.2:

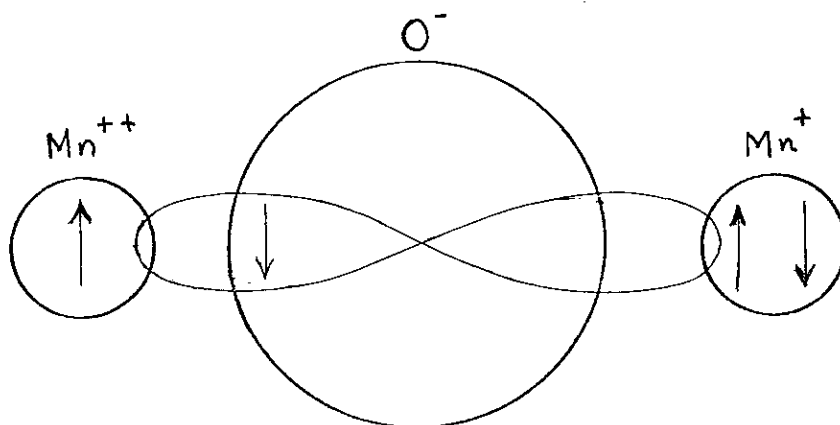


Fig. 2.2 - Esquema do estado excitado tipo singleto  $\psi_s^1$

Partindo de um estado sem interação do tipo tripleto ( $Mn^+, Mn^+$ ),  $\psi_t$ , a transição pode ocorrer a um estado excitado tipo tripleto (fig. 2.3).

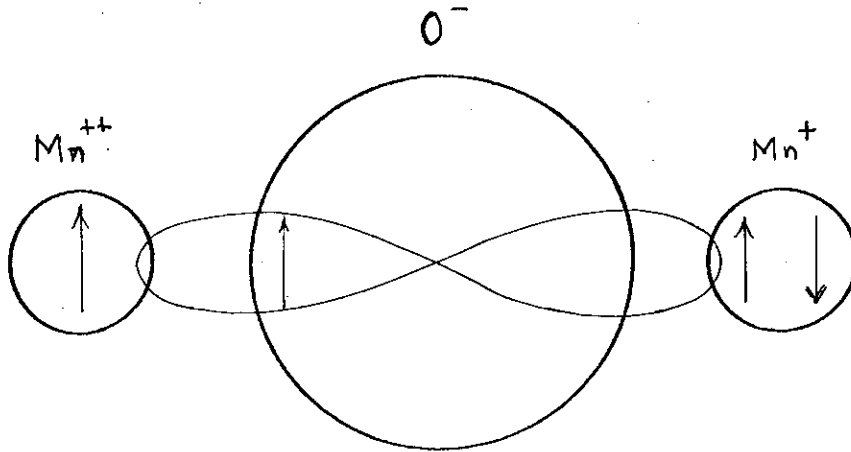


Fig. 2.3 - Esquema do estado excitado tipo tripleto  $\psi'_t$

As energias de intercâmbio entre o spin do  $O^-$  e o spin do  $Mn^{++}$  são diferentes nos estados  $\psi'_s$  e  $\psi'_t$  e esta é a origem da diferença de energia entre os alinhamentos  $\uparrow\uparrow$  e  $\uparrow\downarrow$  dos ions  $Mn^{++}$ .

As mesmas idéias podem aplicar-se à descrição das interações magnéticas em outros compostos. No  $EuO$ , em particular, a interação resultante entre primeiros vizinhos magnéticos é ferromagnética (11).

CAPÍTULO 3

FUNÇÃO DE GREEN PARA O SISTEMA SEMI-INFINITO

3.1 - Introdução

Neste capítulo vamos desenvolver o método da função de Green para sistemas de muitos corpos, da mecânica estatística quântica, para um cristal que ocupa um semi-espaço com uma superfície livre. Temos assim simetria de translação em planos paralelos à superfície e obteremos as equações de movimento para as transformadas de Fourier em relação ao tempo e às coordenadas paralelas à superfície.

Aplicamos também as idéias da aproximação de Bogolyubov e Tyablikov<sup>(16)</sup>, o que implica, no caso da superfície, em fazer uma aproximação a mais do que no caso infinito.

A partir do Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico, obteremos um Hamiltoniano efetivo  $\hbar^{\text{eff}}$ , resultante das aproximações usadas.

Finalmente, obteremos um sistema de equações para os valores da magnetização em cada plano, em função da temperatura, e válido para qualquer valor de spin  $S$ .

3.2 - Método da função de Green

O objetivo desta seção é calcular a função de Green de Zubarev definida da seguinte maneira<sup>(16)</sup>:

$$G_{\vec{\ell}\vec{m}}^+(t-t_0) \equiv \langle\langle S_{\vec{\ell}}^+(t); S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle\rangle \equiv -i\theta(t-t_0) \langle [S_{\vec{\ell}}^+(t), S_{\vec{m}}^-(t_0)] \rangle \quad (3.1)$$

$\langle \dots \rangle$  indica a média sobre um conjunto canônico de sistemas

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr } e^{-H/kT} \dots}{\text{Tr } e^{-H/kT}} ; \text{Tr } e^{-H/kT} = e^{-F/kT} \quad (3.2)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano do sistema e  $F$  é a energia livre de Helmholtz.

$S_{\vec{\ell}}^+(t)$  e  $S_{\vec{\ell}}^-(t)$  são os operadores de spin na representação de Heisenberg

$$S_{\vec{\ell}}^+(t) = e^{-iHt} S_{\vec{\ell}}^+(0) e^{iHt} \quad (\hbar=1) \quad (3.3)$$

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (3.4a)$$

$$\left[ S_{\vec{\ell}}^+, S_{\vec{m}}^- \right] = S_{\vec{\ell}}^+ S_{\vec{m}}^- - S_{\vec{m}}^- S_{\vec{\ell}}^+ \quad (3.4b)$$

Os subíndices se referem a sítios da rede.

Os operadores  $S_{\vec{\ell}}^+(t)$  e  $S_{\vec{m}}^-$  satisfazem as equações

de movimento

$$i \frac{d}{dt} S_{\vec{\ell}}^+(t) = \left[ S_{\vec{\ell}}^+(t), H \right] \quad (3.5)$$

Derivando a função de Green  $G_{\vec{\ell}\vec{m}}^+(t-t_0)$  em relação ao tempo, obtemos a equação:

$$\begin{aligned} i \frac{dG_{\vec{\ell}\vec{m}}^+(t-t_0)}{dt} &= i \frac{d}{dt} \langle \langle S_{\vec{\ell}}^+(t) ; S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle = \\ &= \frac{d\theta(t-t_0)}{dt} \langle \left[ S_{\vec{\ell}}^+(t), S_{\vec{m}}^-(t_0) \right] \rangle + \langle \langle i \frac{dS_{\vec{\ell}}^+(t)}{dt} ; S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

ou:

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} \langle \langle S_{\vec{\ell}}^+(t); S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle &= \delta(t-t_0) \langle \langle S_{\vec{\ell}}^+(t); S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle + \\
+ \langle \langle [S_{\vec{\ell}}^+(t), H]; S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle &\quad (3.7)
\end{aligned}$$

As funções de Green do segundo membro são de ordem superior às iniciais, ou seja, envolvem um número maior de operadores que as do primeiro membro. Escrevendo as equações de movimento para as funções de Green do segundo membro, se obtém analogamente equações em que o segundo membro contém maior número de operadores que o primeiro. Dessa forma gera-se uma cadeia infinita (hierarquia) de equações para as funções de Green, que devem ser complementadas com condições de contorno, dadas por meio de teoremas espectrais.

A equação (7) é exata mas impossível de ser resolvida sem fazer aproximações. Às vezes, mediante um método aproximado, pode-se desacoplar a hierarquia da Eq. (7), ou seja, reduzi-la a um conjunto finito de equações que podem ser resolvidas.

Representaremos a função de Green em termos de sua transformada de Fourier temporal

$$G_{\vec{\ell}\vec{m}}^+(t-t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{\vec{\ell}\vec{m}}^+(\omega) e^{-i\omega(t-t_0)} \quad (3.8)$$

Substituindo na Eq. (7) a Eq. (8), obtemos as equações para a transformada de Fourier temporal:

$$\begin{aligned}
\omega \langle \langle S_{\vec{\ell}}^+(t); S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{1}{2\pi} \langle \langle [S_{\vec{\ell}}^+(t_0), S_{\vec{m}}^-(t_0)] \rangle \rangle + \\
+ \langle \langle [S_{\vec{\ell}}^+(t), H]; S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle_{\omega} &\quad (3.9)
\end{aligned}$$

O Hamiltoniano H depende do problema tratado. Os ferromagnetos dos quais nos ocuparemos estão bem representados pelo Hamiltoniano de Heisenberg:

$$H = - \sum_{\vec{\ell} \neq \vec{m}} I_{\vec{\ell}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{\ell}} \cdot \vec{S}_{\vec{m}} \quad (3.10)$$

Em termos dos operadores  $S_{\vec{\ell}}^+ = S_{\vec{\ell}}^x + iS_{\vec{\ell}}^y$ ,  $S_{\vec{\ell}}^- = S_{\vec{\ell}}^x - iS_{\vec{\ell}}^y$  e  $S_{\vec{\ell}}^z$  o Hamiltoniano pode-se escrever

$$H = - \sum_{\vec{\ell} \neq \vec{m}} I_{\vec{\ell}\vec{m}} \{1/2(S_{\vec{\ell}}^+ S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^- S_{\vec{\ell}}^+) + S_{\vec{\ell}}^z S_{\vec{m}}^z\} \quad (3.11)$$

Os operadores  $S_{\vec{\ell}}^+$ ,  $S_{\vec{\ell}}^-$  e  $S_{\vec{\ell}}^z$  satisfazem as regras de comutação:

$$\left[ S_{\vec{\ell}}^+, S_{\vec{g}}^- \right] = 2S_{\vec{g}}^z \delta_{\vec{\ell}\vec{g}} \quad \left[ S_{\vec{\ell}}^{\pm}, S_{\vec{g}}^z \right] = \mp S_{\vec{g}}^{\pm} \delta_{\vec{\ell}\vec{g}} \quad (3.12)$$

Substituindo a Eq. (11) na Eq. (9), obtemos:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle S_{\vec{\ell}}^+(t) ; S_{\vec{m}}^-(t_0) \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{\ell}}^+(t_0), S_{\vec{m}}^-(t_0)] \rangle - \\ &- 2 \sum_{\vec{i}} I_{\vec{i}\vec{\ell}} (\langle \langle S_{\vec{i}}^+ S_{\vec{\ell}}^z ; S_{\vec{m}}^- \rangle \rangle_{\omega} - \langle \langle S_{\vec{i}}^z S_{\vec{\ell}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle \rangle) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Agora nos encontramos com funções de Green do tipo

$$\langle \langle S_{\vec{i}}^+ S_{\vec{\ell}}^z ; S_{\vec{m}}^- \rangle \rangle_{\omega}$$

Se substituimos o operador  $S_{\vec{\ell}}^z$  por sua média estatística, estaremos desprezando as flutuações de  $S_{\vec{\ell}}^z$  no sítio



$\vec{\ell}$  e suas correlações com as componentes  $S_{\vec{i}}^X$  e  $S_{\vec{i}}^Y$  no sítio  $\vec{i}$ .

$$\langle\langle S_{\vec{i}}^+ S_{\vec{\ell}}^Z; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_{\omega} \approx \langle S_{\vec{\ell}}^Z \rangle \langle\langle S_{\vec{i}}^+; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.14)$$

Esta é a aproximação introduzida por Bogolyubov e Tyablikov, chamada também aproximação de fase aleatória (RPA) <sup>(17)</sup>. No apêndice B explica-se a razão do nome RPA para a mesma e mostra-se o significado desta aproximação para o caso do sistema semi-infinito.

O sistema que estamos tratando é um cristal cúbico. Suponhamos que a superfície livre coincide com um plano cristalino. Sendo o plano da superfície um plano infinito teremos simetria de translação em todos os planos paralelos a este.

A aproximação de Bogolyubov e Tyablikov, aplicada a um sistema infinito, supõe que o valor médio  $\langle S_{\vec{\ell}}^Z \rangle$  é o mesmo em todos os pontos da rede.

No nosso caso admitiremos que  $\langle S_{\vec{\ell}}^Z \rangle$  varia de plano em plano desde a superfície, mas o consideraremos constante dentro do mesmo plano. Aproveitaremos a simetria de translação bi-dimensional também para expressar a função de Green  $G_{\vec{f}\vec{g}}(\omega)$  e a constante de intercâmbio  $I_{\vec{f}\vec{g}}$  em termos das componentes de Fourier  $\vec{k}_n$  paralelas ao plano da superfície.

$$G_{\vec{f}\vec{g}}(\omega) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_n} G_{fg}(\vec{k}_n, \omega) \exp\left\{i\vec{k}_n \cdot (\vec{f}_n - \vec{g}_n)\right\} \quad (3.15)$$

$$I_{\vec{f}\vec{g}} \equiv I_{\vec{f}_n - \vec{g}_n, fg} = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_n} I_{fg}(\vec{k}_n) \exp\left\{i\vec{k}_n \cdot (\vec{f}_n - \vec{g}_n)\right\} \quad (3.16)$$

$$\vec{f}_n = (f_x, f_z) \quad f = f_y$$

Substituindo estas transformadas nas equações para a função de Green e usando a aproximação RPA, Eq. (14), obtemos:

$$\begin{aligned} \omega G_{\ell m}(\omega, \vec{k}_n) &\approx \frac{1}{\pi} \langle S_{\ell}^Z \rangle \delta_{\ell m} + 2 \sum_i I_{i\ell}(0) \langle S_i^Z \rangle G_{\ell m}(\omega, \vec{k}_n) - \\ &- 2 \langle S_{\ell}^Z \rangle \sum_i I_{i\ell}(\vec{k}) G_{im}(\omega, \vec{k}_n) \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde  $\langle S_{\vec{\ell}}^Z \rangle = \langle S_{\ell, \vec{\ell}_n}^Z \rangle \equiv \langle S_{\ell}^Z \rangle$ , independe de  $\vec{\ell}_n$

### 3.3 - Cálculo da função de Green na RPA

A Eq. (17) pode ser escrita

$$\left[ (\omega - H^{\text{eff}}) G \right]_{\ell m} = \frac{\langle S_{\ell}^Z \rangle}{\pi} \delta_{\ell m} \quad (3.18a)$$

onde

$$(\omega - H^{\text{eff}})_{\ell j} = (\omega - 2 \sum_i I_{ij}(0) \langle S_i^Z \rangle) \delta_{\ell j} + 2 \sum_i I_{i\ell}(\vec{k}_n) \langle S_{\ell}^Z \rangle \delta_{ij} \quad (3.18b)$$

É conveniente escrever  $I_{ij}$  e  $\langle S_i^Z \rangle$  respectivamente em termos das quantidades no volume:  $I$  e  $\langle S_{\text{vol}}^Z \rangle$ . Definiremos então:

$$I_{ij}/I = \epsilon_{ij} \quad (3.19a)$$

$$\sigma_i = \langle S_i^Z \rangle / \langle S_{\text{vol}}^Z \rangle \quad (3.19b)$$

$$v = \frac{\omega}{2I \langle S_{\text{vol}}^Z \rangle} \quad (3.19c)$$

$$g_{jm} = iG_{jm} \quad (3.19d)$$

Nas novas variáveis a equação (18.a) é:

$$(\nu - \hbar^{\text{eff}})_g = \sigma/2\pi \quad ; \quad (3.20a)$$

$$\Omega = \nu - \hbar^{\text{eff}} \quad (3.20b)$$

onde

$$(\hbar^{\text{eff}})_{\ell j} = \sum_i \epsilon_{ij}(0) \sigma_i \delta_{j\ell} - \sigma_\ell \sum_i \epsilon_{i\ell}(\vec{k}_n) \delta_{ij} \quad (3.21)$$

$\hbar^{\text{eff}}$  é um Hamiltoniano magnético efetivo, cujos elementos diagonais representam o Hamiltoniano de campo médio, enquanto que a presença de elementos não diagonais são próprios da aproximação RPA.

Para resolver a Eq. (20) vamos estudar a equação homogênea de autovalores a ela ligada:

$$(\hbar^{\text{eff}} - \nu) X = 0 \quad (3.22)$$

Admitiremos que todos os autovalores de  $\hbar^{\text{eff}}$  sejam reais. É fácil verificar que a matriz

$$g(\nu) = i \sum_n \frac{X_n X_n^+ \sigma}{\nu - \nu_n} \quad (3.23)$$

satisfaz a Eq. (20) sob a condição de que o conjunto de autovetores  $\{X_n\}$  forme um sistema ortonormal e completo, ou seja,

$$\sum_n X_n X_n^+ = 1 \quad (3.24)$$

Em consequência, a Eq. (23) mostra que:

1) Os polos da matriz de Green  $g$  são as autofrequências do Hamiltoniano efetivo;

2) Os elementos da matriz  $g_{\ell m}$  são proporcionais às transformadas de Fourier das amplitudes de probabilidade de achar a excitação  $X$  localizada no sítio  $\ell$ , se no sítio  $m$  ela tinha amplitude 1 a  $t = 0$ . Para verificar isto, basta considerar a solução geral não estacionária  $X(t)$  da equação de Heisenberg:

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

que pode ser escrita

$$|X(t)\rangle = e^{-i h^{\text{eff}} t} |X(0)\rangle \quad (3.25)$$

Da Eq. (25) temos que

$$\langle \ell | X(t) \rangle \equiv \left[ X(t) \right]_{\ell} = \sum_n e^{-i\nu_n t} \langle \ell | n \rangle \langle n | X(0) \rangle \quad (3.26)$$

Supondo agora  $\langle h | X(0) \rangle = \delta_{mh}$  na base local, temos

$$\left[ X(t) \right]_{\ell} = \sum_n e^{-i\nu_n t} (X_n)_{\ell} (X_n)_m^* \quad (3.27)$$

De modo que a transformada de Fourier de  $X(t)$  será, para  $t > 0$  (com  $\nu \rightarrow \nu + i\epsilon$  para garantir a convergência):

$$\left[ X(t) \right]_{\ell, \nu + i\epsilon} = i \sum_k \frac{(X_k)_{\ell} (X_k)_m^*}{\nu - \nu_k + i\epsilon} \quad (3.28)$$

### 3.4 - Cálculo da magnetização

Para resolver as equações para a função de Green é importante obter-se as representações espectrais das funções de correlação

$$\langle S_{\ell}^{-} S_{\ell}^{+} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) d\omega \quad (3.29)$$

$$\langle S_{\ell}^{+} S_{\ell}^{-} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} d\omega \quad \beta = 1/kT \quad (3.30)$$

e suas relações com as representações espectrais das funções de Green  $G_{\ell\ell}^{\pm}(\omega)$ .

As funções de Green de argumento complexo  $G_{\ell\ell}^{\pm}(\omega)$  podem ser consideradas como continuações analíticas nos semiplanos  $\left\{ \begin{array}{l} \text{superior} \\ \text{inferior} \end{array} \right\}$ , se  $\text{Im } \omega \gtrless 0$  respectivamente, de uma única função com singularidades no eixo real. A distribuição espectral  $J(\omega)$  das Eqs. (29) e (30) satisfaz<sup>(16)</sup>

$$J(\omega) = i \frac{G_{\ell\ell}^{+}(\omega+i\varepsilon) - G_{\ell\ell}^{-}(\omega-i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} \quad (3.31)$$

Substituindo a Eq. (31) na Eq. (29),

$$\begin{aligned} \langle S_{\ell}^{-} S_{\ell}^{+} \rangle &= i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^{+}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{G_{\ell\ell}^{+}(\omega+i\varepsilon) - G_{\ell\ell}^{-}(\omega-i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} = \\ &= - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^{+}} 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Im} G_{\ell\ell}^{+}(\omega+i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Relacionaremos agora a função de correlação da Eq. (32) com  $\langle S_{\ell}^Z \rangle$  e obteremos um sistema de equações para os  $\langle S_{\ell}^Z \rangle$  para cada plano e em função da temperatura que pode ser

resolvido em forma autoconsistente.

Partimos da seguinte igualdade:

$$1/2 [s^+ s^- + s^- s^+] + (s^z)^2 = s(s+1) \quad (3.33)$$

e usando a relação de comutação, Eq. (12), chegamos a que

$$s^- s^+ = s(s+1) - s^z - (s^z)^2 \quad (3.34)$$

Usando a identidade (válida para todo S)

$$\begin{array}{l} r=+S \\ \Pi \\ r=-S \end{array} (s^z - r) = 0 \quad (3.35)$$

Para  $S = 1/2$ ,  $(s^z)^2 = 1/4$ .

Obtemos, da Eq. (34), a relação

$$\langle s_{\ell}^- s_{\ell}^+ \rangle = 1/2 - \langle s_{\ell}^z \rangle \quad (3.36)$$

e a Eq. (32) se escreve:

$$i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{\ell\ell}(\omega+i\epsilon) - G_{\ell\ell}(\omega-i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} d\omega = 1/2 - \langle s_{\ell}^z \rangle$$

Se  $S \neq 1/2$ , é conveniente introduzir, seguindo Hewson e Ter-Haar<sup>(17,18)</sup>, as funções de Green para generalizar o formalismo para qualquer S

$$G_{g,\ell}^{(n)}(\omega) \equiv \langle \langle s_g^+ ; (s_{\ell}^-)^n (s_{\ell}^+)^{n-1} \rangle \rangle_{\omega} \quad (3.38)$$

As equações de movimento para essa função de

Green, na RPA introduzida neste trabalho, levam à solução:

$$G_{\ell\ell}^{(n)}(\omega, \vec{k}_n) = (\Omega^{-1})_{\ell\ell} \frac{\langle [S_{\ell}^+, (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^{n-1}] \rangle}{2\pi} \quad (3.39)$$

O comutador

$$[S_{\ell}^+, (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^{n-1}] = \left[ 2nS_{\ell}^z + (n^2 - n) \right] (S_{\ell}^-)^{n-1} (S_{\ell}^+)^{n-1} \quad (3.40)$$

Por outro lado

$$(S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^n = \prod_{p=1}^n \left\{ S(S+1) - (n-p)(n-p+1) - (2n-2p+1)S_{\ell}^z - (S_{\ell}^z)^2 \right\} \quad (3.41)$$

então

$$[S_{\ell}^+, (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^{n-1}] = (2nS_{\ell}^z + (n^2 - n)) \prod_{p=1}^{n-1} \left\{ S(S+1) - (n-1-p)(n-p) - (2n-2p-1)S_{\ell}^z - (S_{\ell}^z)^2 \right\} \quad (3.42)$$

Escrevemos a relação equivalente à Eq. (33) para operadores  $(S_{\ell}^-)^n$  e  $(S_{\ell}^+)^n$ :

$$\langle (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^n \rangle = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2 \vec{k}_n \frac{\text{Im} G_{\ell\ell}^{(n)}(\omega, \vec{k}_n)}{e^{\beta\omega} - 1} \quad (3.43)$$

vemos que pela Eq. (39)

$$\begin{aligned} \langle (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^n \rangle &= -\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2 \vec{k}_n \langle [S_{\ell}^+, (S_{\ell}^-)^n (S_{\ell}^+)^{n-1}] \rangle \times \\ &\times \frac{\text{Im} \left[ \Omega^{-1}(\omega, \vec{k}_n) \right]_{\ell\ell}}{e^{\beta\omega} - 1} \end{aligned} \quad (3.44)$$

e pela Eq. (41),

$$\begin{aligned} \langle (S_{\ell}^{-})^n (S_{\ell}^{+})^n \rangle &= -\frac{1}{\pi} \left[ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2\vec{k}_{\parallel} \frac{\text{Im}(\Omega^{-1}(\omega, \vec{k}_{\parallel}))_{\ell\ell}}{e^{\beta\omega} - 1} \right] \times \\ &\times \langle 2nS_{\ell}^Z + (n^2 - n) \prod_{p=1}^{n-1} \left\{ S(S+1) - (n-1-p)(n-p) - (2n-2p-1)S_{\ell}^Z - (S_{\ell}^Z)^2 \right\} \rangle \end{aligned} \quad (3.45)$$

O colchete no segundo membro da Eq. (45),

$$\phi_{\ell}(S) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2\vec{k}_{\parallel} \frac{\text{Im}\left\{\Omega^{-1}(\omega, \vec{k}_{\parallel})\right\}_{\ell\ell}}{e^{\beta\omega} - 1}, \quad (3.46)$$

é a generalização da função  $\psi(S)$  de Hewson e Ter-Haar<sup>(18)</sup> para o sistema semi-infinito.

Usando agora a identidade Eq. (35) obtemos  $(S_{\ell}^Z)^{2S+1}$  como combinação linear das primeiras  $2S$  potências de  $S_{\ell}^Z$ , de modo que as potências  $(S_{\ell}^Z)^n$  onde  $n = 0, 1, \dots, 2S$ , são variáveis independentes. Portanto, precisamos  $2S$  equações independentes.

Expressando o primeiro membro da Eq. (45) em termos da Eq. (41) para  $n$  variando entre 0 e  $2S$ , obtêm-se um sistema de  $2S$  equações com  $2S$  incôgnitas  $\langle S_{\ell}^Z \rangle$ ,  $\langle (S_{\ell}^Z)^2 \rangle$ ,  $\langle (S_{\ell}^Z)^3 \rangle$  ....  $\langle (S_{\ell}^Z)^{2S} \rangle$  :

$$\begin{aligned} &\langle \prod_{p=1}^n \left\{ S(S+1) - (n-p)(n-p+1) - (2n-2p+1)S_{\ell}^Z - (S_{\ell}^Z)^2 \right\} \rangle = \\ &= \langle 2nS_{\ell}^Z + (n^2 - n) \prod_{p=1}^{n-1} \left\{ S(S+1) - (n-p-1)(n-p) - (2n-2p-1)S_{\ell}^Z - (S_{\ell}^Z)^2 \right\} \rangle \times \\ &\times \phi_{\ell}(S) \quad ; \quad (n = 0, 1, \dots, 2S) \end{aligned} \quad (3.47)$$



Hewson e Ter-Haar<sup>(18)</sup> obtiveram a solução geral:

$$\langle S_{\ell}^z \rangle = \frac{\left[ S - \phi_{\ell}(S) \right] \left[ 1 + \phi_{\ell}(S) \right]^{2S+1} + \left[ S + 1 + \phi_{\ell}(S) \right] \left[ \phi_{\ell}(S) \right]^{2S+1}}{\left[ 1 + \phi_{\ell}(S) \right]^{2S+1} - \left[ \phi_{\ell}(S) \right]^{2S+1}} \quad (3.48)$$

CAPÍTULO 4APLICAÇÕES AOS FERROMAGNETOS CÚBICOS SIMPLES E CÚBICOS DE FACE CENTRADA4.1 - Introdução

Vamos aplicar o cálculo da função de Green desenvolvido no capítulo anterior a redes de spins de estruturas cúbica simples (CS) (seções 4.2 e 4.3) e de face centrada (CFC), (seção 4.4), para qualquer valor  $S$  do spin. A magnetização supõe-se paralela à superfície para não ter que considerar campos demagnetizantes.

Suponhamos que a variação espacial da magnetização afeta só os dois primeiros planos a partir da superfície, e que a magnetização atinge o valor do volume no terceiro plano, para simplificar o problema.

As constantes de intercâmbio entre spins no plano da superfície e entre a superfície e o segundo plano são considerados diferentes das do volume (Fig. 4.1).

Consideraremos o caso em que a superfície é um plano (010).

4.2 - Sistema cúbico simples

Como vimos no capítulo anterior, para calcular a magnetização é necessário ter uma expressão para a inversa da matriz  $\Omega$  ou seja  $\Omega^{-1} = \text{Adj } \Omega / \text{Det } \Omega$ .

Portanto, vamos calcular esta matriz para o caso particular da malha cúbica simples. Lembramos que

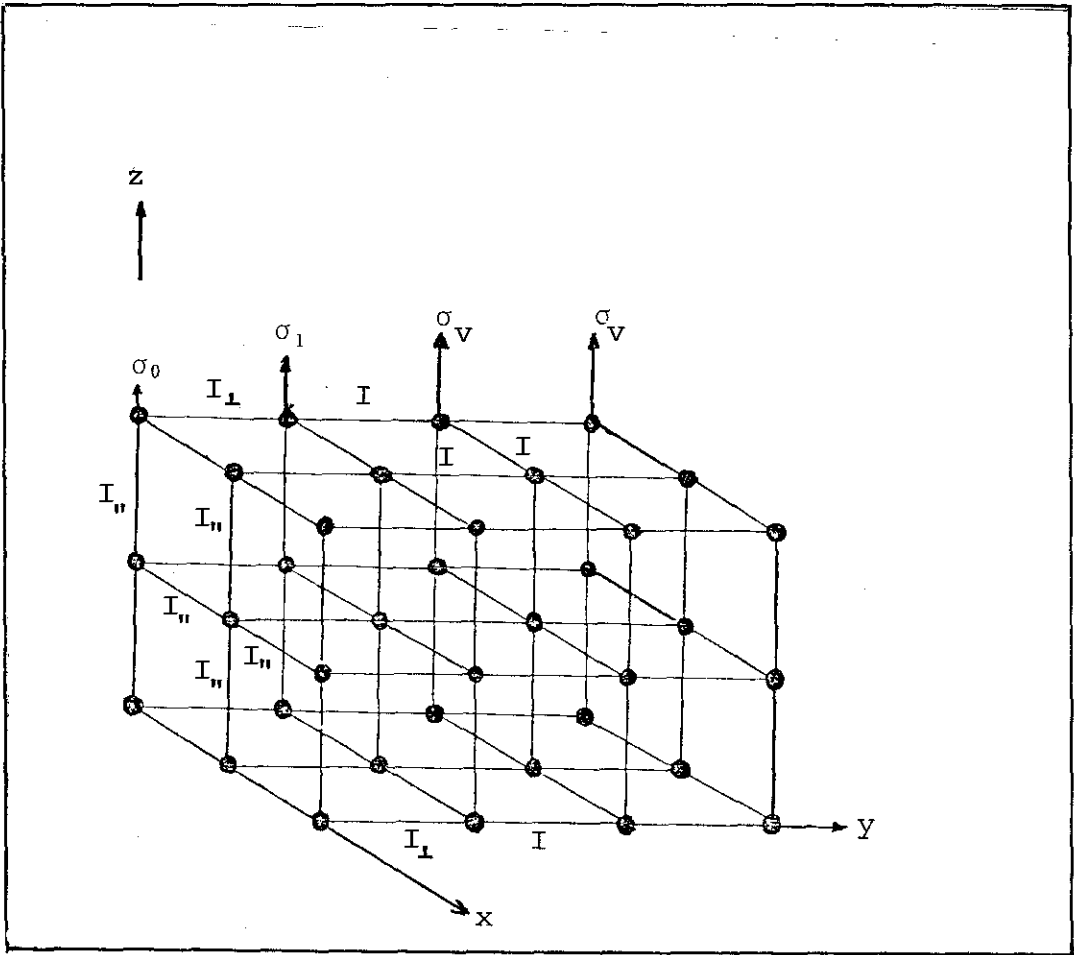


Fig. 4.1 - Esquema da estrutura cúbica simples. A superfície é o plano  $(x,z)$ . As interações entre vizinhos estão indicadas. Também mostra-se a variação da magnetização nos diversos planos.

$$\Omega(v, \vec{k}) \equiv v - \hbar^{\text{eff}} \quad (4.1)$$

com

$$\begin{aligned} \hbar_{nm}^{\text{eff}}(\vec{k}) = & \delta_{nm} \left[ \varepsilon_{\vec{k}_n=0}^{(m)} \sigma_m - \varepsilon_{\vec{k}_n}^{(m,m+1)} \sigma_{m+1} - \right. \\ & \left. - \varepsilon_{\vec{k}_n}^{(m,m-1)} \sigma_{m-1} \right] - \sigma_m \left[ \varepsilon_{\vec{k}_n}^{(n)} \delta_{nm} + \varepsilon_{\vec{k}_n}^{(n,m)} \delta_{n,m+1} + \right. \\ & \left. + \varepsilon_{\vec{k}_n}^{(n,m)} \delta_{n,m-1} \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

para a malha CS com interação entre primeiros vizinhos e para o plano da superfície paralelo aos eixos (x,z) do cristal. A magnetização tem a direção Z.

Os parâmetros da Eq. (2) se definem:

$$\varepsilon_{\vec{k}_n}(n,m) = \begin{cases} 4\gamma_0(\vec{k}_n) \cdot \begin{cases} \varepsilon_{\parallel} & \text{se } n=m=0 \\ 1 & \text{se } n=m \neq 0 \end{cases} \\ \varepsilon_{\perp} & \text{se } n \text{ ou } m = 0 \\ 1 & \text{se } n \text{ e } m \neq 0 \end{cases} \quad \left. \vphantom{\varepsilon_{\vec{k}_n}(n,m)} \right\} n \neq m \quad (4.3)$$

$$\gamma_0(\vec{k}_n) = 1/2 (\cos k_x a + \cos k_z a) \quad (4.4)$$

Definimos também

$$\Omega_{jl} = \begin{cases} 2t + \alpha_{ll} \\ \beta_{jl} & j \neq l \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\alpha_{00} = 2 - \sigma_1 \varepsilon_{\perp} + 4(1 - \varepsilon_{\parallel} \sigma_0) \left[ 1 - \gamma_0(\vec{k}_n) \right] \quad (4.6a)$$

$$\alpha_{11} = 1 - \sigma_0 \varepsilon_{\perp} + 4(1 - \sigma_1) \left[ 1 - \gamma_0(\vec{k}_n) \right] \quad (4.6b)$$

$$\alpha_{22} = 1 - \sigma_1 \quad (4.6c)$$

$$\beta_{10} = \sigma_1 \varepsilon_1 \quad (4.7a)$$

$$\beta_{01} = \sigma_0 \varepsilon_1 \quad (4.7b)$$

$$\beta_{12} = \sigma_1 \quad (4.8a)$$

$$\beta_{21} = 1 \quad (4.8b)$$

$$\beta_{\ell m} = 0, \ell > 1, m > 2 \quad (4.8c)$$

$$\Omega_{\ell\ell} (\ell \geq 3) \equiv 2t \equiv v-2-4 \left\{ 1 - \gamma_0(\vec{k}_n) \right\} \quad (4.9a)$$

$$\alpha_{\ell\ell} (\ell \geq 3) = 0 \quad (4.9b)$$

Logo, a matriz  $\Omega$  será:

$$\Omega = \begin{pmatrix} 2t + \alpha_{00} & \beta_{01} & & & & & \\ & \beta_{10} & 2t + \alpha_{11} & \beta_{12} & & & \\ & ' & \beta_{21} & 2t + \alpha_{22} & 1 & & \\ & ' & ' & 1 & 2t & 1 & \\ & ' & ' & ' & 1 & 2t & 1 \\ & ' & ' & ' & ' & ' & ' \\ & ' & ' & ' & ' & ' & ' \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Fica evidente que os  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's são uma perturbação do sistema sem superfície. É fácil calcular diretamente a inversa  $\Omega^{-1}$ , desde que a matriz  $\Omega$  é tridiagonal.

Partimos para isto da definição geral:

$$(\Omega^{-1})_{\ell m} = \frac{\text{Adj } \Omega_{\ell m}}{\text{Det } \Omega}$$

Veremos agora que os elementos de matriz  $(\Omega^{-1})_{\ell m, p \underline{0}}$  podem ser escritos de maneira bastante simples. Chamando  $D_N = \text{Det } \Omega$ , onde  $N = n^{\circ}$  de planos do cristal, e  $D_{N-p}$  ao determinante da matriz que se obtém tirando as primeiras  $p$  filas e colunas, temos as seguintes relações de recorrência para os determinantes  $D_{N-p}$ :

$$\begin{aligned} D_N &= (2t + \alpha_{00}) D_{N-1} - \beta_{10} \beta_{01} D_{N-2} \\ D_{N-1} &= (2t + \alpha_{11}) D_{N-2} - \beta_{12} \beta_{21} D_{N-3} \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} D_{N-2} &= (2t + \alpha_{22}) D_{N-3} - D_{N-4} \\ D_{N-p} &= 2t D_{N-(p+1)} - D_{N-(p+2)} \end{aligned} \quad (4.13)$$

(para  $p > 2$ ).

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

$$\begin{vmatrix} 2t & 1 & & & \\ 1 & 2t & 1 & & \\ \cdot & 1 & 2t & 1 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \end{vmatrix} \quad (4.14)$$

são os polinômios associados de Tchebishev de primeira espécie

$$D_{N-p}(t) \equiv U_{N-p}(t) \quad (4.15a)$$

que também admitem a expressão

$$U_n(\cos\theta) \equiv \frac{\text{sen}(n+1)\theta}{\text{sen}\theta} \quad (4.15b)$$

Assim:

$$\begin{aligned} (\Omega^{-1})_{00} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_{N-1}}{D_N} = \frac{\cancel{D_{N-1}}}{(2t+\alpha_{00})\cancel{D_{N-1}} - \beta_{10}\beta_{01} \frac{D_{N-2}}{D_{N-1}}} = \\ &= \frac{1}{(2t+\alpha_{00}) - \frac{\beta_{10}\beta_{01} \cancel{D_{N-2}}}{(2t+\alpha_{11})\cancel{D_{N-2}} - \beta_{12}\beta_{21} \frac{D_{N-3}}{D_{N-2}}}} = \\ &= \frac{1}{2t+\alpha_{00} - \frac{\beta_{10}\beta_{01}}{2t+\alpha_{11} - \frac{\beta_{12}\beta_{21} \cancel{D_{N-3}}}{(2t+\alpha_{22})\cancel{D_{N-3}} - \frac{D_{N-4}}{D_{N-3}}}}} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Voltando ao caso  $p > 2$  definimos a quantidade:

$$\xi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_{N-(p+1)}(t)}{D_{N-p}(t)} \quad (4.17)$$

Substituindo no denominador da Eq. (17)  $D_{N-p}$  pela expressão da Eq. (12), e repetindo esta substituição para  $D_{N-p-1}$ , etc., sucessivamente, chega-se a:

$$\xi = \frac{1}{2t - \frac{1}{2t - \frac{1}{2t - \dots}}} = \frac{1}{2t - \xi} \quad (4.18)$$

que é equivalente a:

$$\xi^2 - 2t\xi + 1 = 0 \quad (4.19a)$$

ou

$$\xi + \xi^{-1} = 2t \quad (4.19b)$$

Então  $(\Omega^{-1})_{00}$  e  $(\Omega^{-1})_{11}$  podem ser escritas

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{1}{2t + \alpha_{00} - \frac{\beta_{10}\beta_{01}}{2t + \alpha_{11} - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{2t + \alpha_{22} - \xi}}} \quad (4.20)$$

e

$$(\Omega^{-1})_{11} = \frac{1}{2t + \alpha_{11} - \frac{\beta_{10}\beta_{01}}{2t + \alpha_{00}} - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{2t + \alpha_{22} - \xi}} \quad (4.21)$$

Precisaremos da continuação analítica ao plano complexo dos polinômios  $U_n(t)$ , para poder interpretar fisicamente o parâmetro  $\xi$  definido na Eq. (17).  $(\Omega^{-1})_{\ell\ell}$ , como função de  $\xi$ , será um quociente de polinômios:

$$(\Omega^{-1})_{\ell\ell} = \frac{N_\ell(\xi)}{D(\xi)} \quad (4.22)$$

e a anulação do denominador corresponde aos polos da matriz  $(\Omega^{-1})_{\ell\ell}$  e, portanto, da função de Green, como já vimos no capítulo



anterior.

Para  $t$  real e  $|t| < 1$ , definimos  $t = \cos\theta$ .

$U_n$  é um polinômio de grau  $n$  em  $\cos\theta$  (Eq. (15.b)). Todas as raízes de  $U_n(t)$  estão contidas no intervalo  $|t| \leq 1$ . Isso implica que  $\xi$  é complexo:

$$\xi(t) = t \pm i\sqrt{1-t^2}, \quad |\xi| = 1 \quad (4.23)$$

A função  $\xi(t)$  e, conseqüentemente  $(\Omega^{-1})_{\ell\ell}$ , tem um corte para  $|t| \leq 1$  e portanto é preciso considerar a continuação analítica para  $t$  e  $\xi$  complexos. Na Fig. 4.2 vemos uma representação de  $\xi(t)$  no plano complexo.

Vamos definir as variáveis complexas

$$t^+ = t + i\epsilon \equiv \cos(\theta+i\eta) \quad (4.23)$$

$$\xi = e^{i(\theta+i\eta)} \quad (4.24)$$

ou: 
$$\xi = e^{-\eta} e^{i\theta} = e^{-\eta}(\cos\theta + i \operatorname{sen}\theta) \quad (4.25)$$

Devemos escolher o ramo  $\xi^-(t+i\epsilon) = \xi - i\zeta$  ( $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \zeta \equiv 0^+$ ) para garantir que  $\operatorname{Im} G^+ < 0$ , consistente com  $J(\omega) > 0$ , como se vê na Eq. (3.31). Se  $|t| > 1$ , pode-se demonstrar que a fração contínua, Eq. (18), converge à raiz real  $\xi$  da Eq. (19.a), que tem menor valor absoluto<sup>(19)</sup>. Neste caso  $|\xi| < 1$ . Para esse intervalo da variável  $t$ , os polos do denominador, expresso como polinômio em  $\xi$ , correspondem às frequências dos magnons localizados na superfície. Pode-se verificar facilmente

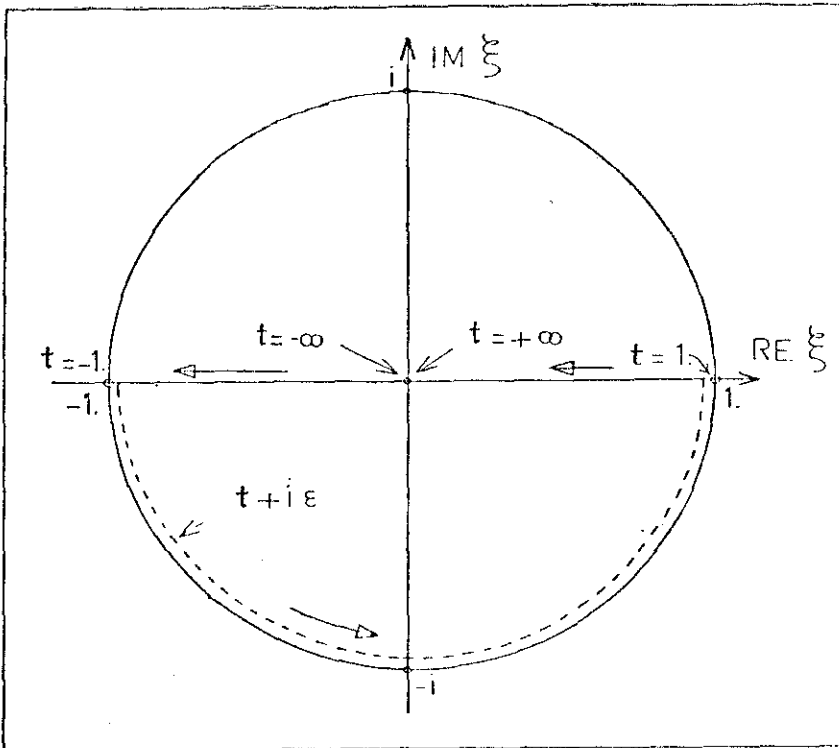


Fig. 4.2 - Representação de  $\xi = t \pm (t^2 - 1)^{1/2}$ . Mostra-se o ramo correspondente à continuação analítica para  $t$  no semiplano superior. A semi-circunferência inferior é a imagem do corte de  $\xi$  no plano  $t$  complexo  $-1 < t < 1$  onde se encontra o contínuo. As setas maiores indicam o sentido em que varia  $\xi$  na semi-circunferência inferior quando  $t$  varia em todo eixo real  $-\infty < t < \infty$ .

que

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \eta \rightarrow 0 \\ n\eta \rightarrow \infty}} \frac{U_{n-1} \left[ \cos(\theta + i\eta) \right]}{U_n \left[ \cos(\theta + i\eta) \right]} \longrightarrow \xi = e^{i\theta} \quad (4.26)$$

Se chamamos  $\theta = k_y a + \pi$  e substituímos  $t = -\cos k_y a$  na Eq. (49.a), verificamos que a relação de dispersão para os modos de volume é a mesma que para o sistema infinito:

$$v(\vec{k}) = 6 - 2 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (4.27)$$

#### 4.3 - Modos localizados e modos de volume. Significado físico do parâmetro $\xi$

O significado do parâmetro  $\xi$  pode ser visualizado considerando na Eq. (3.20) um elemento não diagonal de  $(\Omega g)_{\ell m}$ ,  $\ell \neq m$ :

$$\Omega_{\ell, \ell-1} g_{\ell-1, m} + \Omega_{\ell, \ell} g_{\ell m} + \Omega_{\ell, \ell+1} g_{\ell+1, m} = 0 \quad (4.28)$$

Para  $\ell > 3$  as equações são as não perturbadas

$$g_{\ell-1, m} + 2t g_{\ell m} + g_{\ell+1, m} = 0 \quad (4.29)$$

Definindo

$$g_{\ell m} = \text{const.} \cdot x_\ell \quad (4.30)$$

com  $m$  fixo (a constante de proporcionalidade independe de  $\ell$ ), temos:

$$x_{\ell-1} + 2t x_\ell + x_{\ell+1} = 0 \quad (4.31)$$

com soluções

$$\mathbf{x}_\ell = A\rho^\ell \quad (4.32)$$

onde  $\rho$  satisfaz

$$(\rho + \rho^{-1}) + 2t = 0 \quad (4.33)$$

Se chamamos  $\rho = -\xi$ , a Eq. (33) é idêntica à Eq. (19b).

Para entender o significado físico de  $\xi$ , e portanto de  $\mathbf{x}_\ell$ , basta observar que  $\mathbf{x}_\ell$  são as componentes dos autovetores do operador  $\hbar^{\text{eff}}$ .

Na Eq. (3.23) vimos que

$$g(\nu)_{\ell m} = i \sum_n \frac{\mathbf{x}_\ell^{(n)} \mathbf{x}_m^{*(n)} \sigma_m}{\nu - \nu_n} \quad (4.34)$$

O produto matricial

$$\sum_\ell (\hbar^{\text{eff}})_{s\ell} g_{\ell m}(\nu + i\varepsilon) = i \sum_{\ell, n} \frac{(\hbar^{\text{eff}})_{s\ell} \mathbf{x}_\ell^{(n)} \mathbf{x}_m^{*(n)} \sigma_m}{\nu - \nu_n + i\varepsilon} \quad (4.35)$$

Em particular, para  $\nu \rightarrow \nu_k$ :

$$\sum_\ell (\hbar^{\text{eff}})_{s\ell} g_{\ell m}(\nu_k + i\varepsilon) = i \left\{ \frac{\nu_k \mathbf{x}_\ell^{(k)} \mathbf{x}_m^{*(k)} \sigma_m}{i\varepsilon} + \sum_{k \neq n} \frac{(\hbar^{\text{eff}})_{s\ell} \mathbf{x}_\ell^{(n)} \mathbf{x}_m^{*(n)} \sigma_m}{\nu_k - \nu_n + i\varepsilon} \right\} \quad (4.36)$$

Desprezando os termos com  $k \neq n$ , no limite  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ , resulta

$$g_{pm}(\nu_k + i\varepsilon) = \mathbf{x}_p^{(k)} \mathbf{x}_m^{*(k)} \sigma_m / \varepsilon \quad (4.37)$$

$$g_{pm}(v_k + i\varepsilon) \sim x_p^{(k)} \sim (\xi_k)^p \quad (4.38)$$

portanto, coincide com a Eq. (30).

$|\xi| = 1$  corresponde aos modos de volume, já que o módulo da amplitude do magnon é constante no semi-espço da rede:  $|\xi^p| = 1$ . Os modos localizados (modos de superfície) correspondem a  $|\xi_s| < 1$ , pois a amplitude do magnon decai com a distância à superfície:  $|\xi_s|^p \xrightarrow{p \rightarrow \infty} 0$ .

A relação de dispersão para os magnons superficiais em termos de  $\xi_s$  para  $|t| > 1$  ( $|\xi_s| < 1$ ) é:

$$v_s = \xi_s + \frac{1}{\xi_s} + 2 + 4 \left[ 1 - \gamma_0(\vec{k}_s) \right] \quad (4.39)$$

sendo  $\xi_s$  raiz da equação  $\text{Det } \Omega(\xi) = 0$ .

#### 4.4 - Sistema cúbico de face centrada

Consideremos um ferromagneto semi-infinito de estrutura CFC. A superfície livre seja o plano cristalino (111). Escolhemos os vetores de base<sup>(20)</sup>:

$$\vec{A}_1 = a/2 (1, 0, \bar{1}) \quad , \quad (4.40a)$$

$$\vec{A}_2 = a/2 (0, 1, \bar{1}) \quad , \quad (4.40b)$$

$$\vec{A}_3 = a/2 (1, 1, 0) \quad (4.40c)$$

Os vetores recíprocos são:

$$\vec{B}_1 = (2\pi/a) (1, \bar{1}, \bar{1}) \quad (4.41a)$$

$$\vec{B}_2 = (2\pi/a) (\bar{1}, 1, \bar{1}) \quad (4.41b)$$

$$\vec{B}_3 = (2\pi/a) (1, 1, 1) \quad (4.41c)$$

Um vetor  $\vec{k}$  geral será:

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 k_i \vec{B}_i \quad (4.42)$$

ou

$$\vec{k} = (\vec{k}_n, k) \quad (4.43)$$

onde

$$\vec{k}_n = (k_1, k_2) \quad \text{e} \quad (k = k_3) .$$

O vetor  $\vec{k}_n$  descreve a propagação de ondas em uma direção paralela ao plano (111), embora ele mesmo não seja paralelo ao plano. Os vetores  $\vec{A}_1$  e  $\vec{A}_2$  definem uma malha hexagonal (Fig.4.3).

O vetor de ondas

$$\vec{k} = k_1 \vec{B}_1 + k_2 \vec{B}_2 + k_3 \vec{B}_3 \quad (4.44)$$

pode ser expresso em termos de um terno de vetores  $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  e  $\vec{b}_3$  tais que  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  são a base do plano recíproco dual do plano  $(\vec{A}_1, \vec{A}_2)$

$$\vec{b}_1 = \frac{8\pi}{3a^2} (2\vec{A}_1 - \vec{A}_2) \quad (4.45a)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{8\pi}{3a^2} (-\vec{A}_1 + 2\vec{A}_2) \quad (4.45b)$$

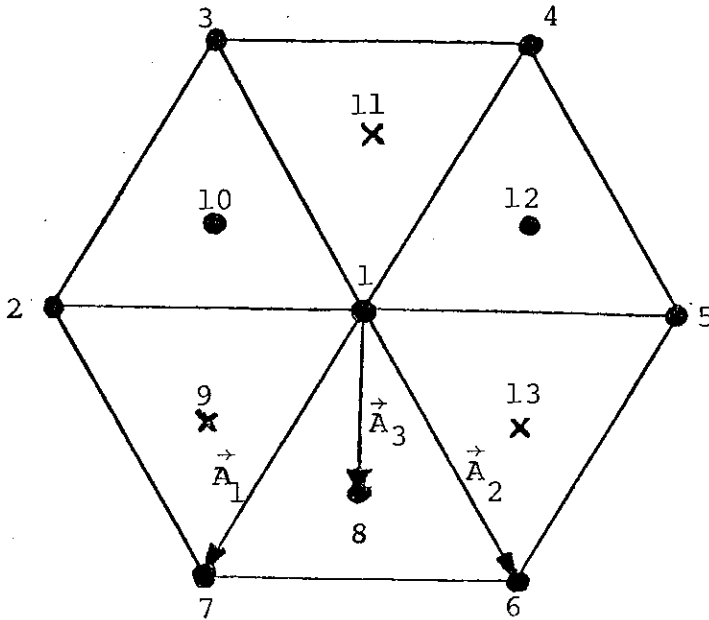


Fig. 4.3 - Rede hexagonal correspondente à superfície (111) do CFC. Os sítios 1, 2, 3, 4, 5, 6 e 7 estão no plano (111). Os sítios 8, 10 e 12 estão acima do plano. Os sítios 9, 11 e 13 estão abaixo do plano.  $\vec{A}_1$ ,  $\vec{A}_2$  e  $\vec{A}_3$  são os vetores de base.

Estes vetores satisfazem, para qualquer  $\vec{k}$ , a identidade:

$$\vec{k} = k_1 \vec{B}_1 + k_2 \vec{B}_2 + k_3 \vec{B}_3 \equiv k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + \gamma B_3 \quad (4.46)$$

onde:

$$\vec{k}_\parallel = k_1 \vec{B}_1 + k_2 \vec{B}_2 \quad \text{e} \quad \vec{k}'_\parallel = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 \quad (4.47)$$

$\vec{k}'_\parallel$  está contido no plano  $(\vec{A}_1, \vec{A}_2)$ . Como o produto escalar tanto de  $\vec{k}_\parallel$  como de  $\vec{k}'_\parallel$  com um vetor do plano  $(\vec{A}_1, \vec{A}_2)$  é o mesmo, convém trabalhar com  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$ . Qualquer vetor dentro da primeira zona de Brillouin do cristal CFC tri-dimensional se projeta sobre o plano do espaço recíproco perpendicular ao eixo cristalino (111) e fica dentro da primeira zona de Brillouin bi-dimensional da rede hexagonal de base  $(\vec{b}_1, \vec{b}_2)$ , de tal forma que as componentes de  $\vec{k}_\parallel$  nas direções de  $\vec{A}_1$  e  $\vec{A}_2$  são iguais às componentes de sua projeção  $\vec{k}'_\parallel$  nas direções  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  respectivamente.

Para obter a equação de movimento para as componentes de Fourier da Função de Green, neste caso é conveniente generalizar a transformada de Fourier em relação às coordenadas paralelas, incluindo uma fase proporcional à distância à superfície, que torna os elementos de matriz do  $h^{\text{eff}}(\vec{k}_\parallel, \nu)$  reais<sup>(4)</sup>:

$$g_{\vec{\ell}\vec{m}}(\nu) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_\parallel} g_{\ell m}(\vec{k}_\parallel, \nu) \exp\{i\vec{k}_\parallel \cdot (\vec{\ell}_\parallel - \vec{m}_\parallel) + i\psi(\vec{k}_\parallel)(\ell - m)\} \quad (4.48)$$

$$I_{\vec{\ell}\vec{m}} = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_\parallel} I_{\ell m}(\vec{k}_\parallel) \exp\{i\vec{k}_\parallel \cdot (\vec{\ell}_\parallel - \vec{m}_\parallel) + i\psi(\vec{k}_\parallel)(\ell - m)\} \quad (4.49)$$

$\psi(\vec{k}_\parallel)$  é a fase do fator de estrutura

$$F \equiv \phi e^{i\psi} = \frac{1}{3} \left\{ 1 + \exp(2\pi i k_1) + \exp(2\pi i k_2) \right\}, \quad (4.50)$$



$$\phi^2 = \frac{1}{9} \left[ 3 + 2(\cos 2\pi(k_1 - k_2) + \cos 2\pi k_1 + \cos 2\pi k_2) \right], \quad (4.51)$$

$$\text{tg} \psi(\vec{k}_n) = \frac{\text{sen} 2\pi k_1 + \text{sen} 2\pi k_2}{1 + \cos 2\pi k_1 + \cos 2\pi k_2} \quad (4.52)$$

Na tabela 1 mostramos os valores calculados para as transformadas de Fourier dos parâmetros de intercâmbio  $I_{\ell m}(\vec{k}_n)$ .

| $\ell$                        | 0                   | 1                 | > 1               |
|-------------------------------|---------------------|-------------------|-------------------|
| $I_{\ell\ell}(\vec{k}_n)$     | $3I_n(3\phi^2 - 1)$ | $3I(3\phi^2 - 1)$ | $3I(3\phi^2 - 1)$ |
| $I_{\ell, \ell+1}(\vec{k}_n)$ | $3I_{\perp}\phi$    | $3I\phi$          | $3I\phi$          |
| $I_{\ell-1, \ell}(\vec{k}_n)$ | 0                   | $3I_{\perp}\phi$  | $3I\phi$          |

Tabela 4.1 - Transformadas de Fourier dos parâmetros de intercâmbio  $I_{\ell m}(\vec{k}_n)$

Substituindo as transformadas das Eqs. (49) e (50) na (3.13) e fazendo como no caso anterior a aproximação RPA, obtemos uma equação equivalente à Eq. (3.20.a). Como no caso cúbico simples, seção 4.2, definimos para a malha CFC

$$\frac{1}{3} \alpha_{00} = 2 - \sigma_1 \epsilon_{\perp} + 4(1 - \epsilon_n \sigma_0) \left[ 1 - \gamma_1(\vec{k}_n) \right] \quad (4.53a)$$

$$\frac{1}{3} \alpha_{11} = 1 - \sigma_0 \epsilon_{\perp} + 4(1 - \sigma_1) \left[ 1 - \gamma_1(\vec{k}_n) \right] \quad (4.53b)$$

$$\frac{1}{3} \alpha_{22} = 1 - \sigma_1 \quad (4.53c)$$



$$e \quad \beta'_{\ell m} = \beta_{\ell m}/3\phi \quad (4.57c)$$

e substituindo  $\beta'_{\ell m} \rightarrow \beta_{\ell m}$ ,  $\alpha'_{\ell\ell} \rightarrow \alpha_{\ell\ell}$  e  $t' \rightarrow t$ , temos:

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{1}{3\phi} \left[ \frac{1}{\beta_{10}\beta_{01}} \right. \\ \left. \frac{2t+\alpha_{00}}{2t+\alpha_{11} - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{2t+\alpha_{22}-\xi}} \right] \quad (4.58)$$

Em termos da nova variável  $t$ ,

$$v = 3 \left( 2\phi t + 2 + 4(1 - \gamma_1(\vec{k}_n)) \right) \quad (4.59)$$

CAPÍTULO 5CÁLCULO NUMÉRICO DA MAGNETIZAÇÃO5.1 - Introdução

Vimos que para o spin S

$$\sigma_\ell = f\left\{\phi_\ell(S), S\right\}, \quad \ell = 0, 1, \dots \quad (5.1)$$

Estas equações devem ser resolvidas de maneira autoconsistente, já que  $\phi_\ell(S)$  contém  $\{\sigma_n; n = 0, 1, 2\}$ . Para o caso de dois planos variados, teremos duas equações com duas incógnitas  $\sigma_0$  e  $\sigma_1$ . A magnetização de volume também é um ingrediente das equações:  $\sigma_2 = \sigma_V$ .

Para obter  $\sigma_V$  resolvemos primeiro autoconsistentemente o problema da magnetização para o cristal infinito na aproximação RPA<sup>(17)</sup>. Então, com  $\sigma_V$  como dado para cada temperatura, resolvemos numericamente as equações para  $\sigma_0$  e  $\sigma_1$ .

5.2 - Cálculo autoconsistente

Teremos que calcular a função  $\phi_\ell(S)$  da Eq. (1), onde

$$\phi_\ell(S) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2 \vec{k}_n \frac{\text{Im}(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(\omega, \vec{k}_n)}{e^{\beta\omega} - 1} \quad (5.2)$$

de acordo com a Eq. (3.46).

Faremos isto para a estrutura cúbica simples e

cúbica de face centrada.

a) *Estrutura cúbica simples*

Consideraremos primeiro a integral sobre a frequência, escrita em termos da variável  $t$ , ligada com a frequência pela Eq. (4.9a) para o sistema cúbico simples. Quando a frequência  $\omega$  varia entre  $-\infty$  e  $+\infty$ ,  $\nu$  (frequência reduzida) e  $t$  (para  $\vec{k}_n$  fixo), também variam entre  $-\infty$  e  $+\infty$ . Em termos da variável  $t$ , então

$$\phi_{\ell}(S) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\{ -\frac{2}{\pi} \frac{a^2}{4\pi^2} \int d^2\vec{k}_n \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\text{Im}(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(t+i\epsilon, \vec{k}_n)}{e^{\beta\omega}-1} \right\} \quad (5.3)$$

com

$$\omega = 2I \langle S_{\text{vol}}^Z \rangle \left[ 2t+2+4(1-\gamma_0(\vec{k}_n)) \right] \quad (5.4)$$

Para calcular a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\text{Im}(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(t+i\epsilon, \vec{k}_n)}{e^{\beta\omega}-1}$$

lembramos que  $(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(t)$  tem um corte para  $-1 < t < 1$  e eventualmente polos isolados, para  $-1 > t$  ou  $t > 1$ , se existem raízes reais  $\xi_{\alpha}$  de  $\text{Det } \Omega = 0$  com  $|\xi_{\alpha}| < 1$ . Os polos contribuem com

$$\text{Im}(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(\vec{k}_n, \xi) = -\pi \sum_{\alpha} \delta(\xi - \xi_{\alpha}) \frac{N_{\ell}(\xi_{\alpha})}{D'(\xi_{\alpha})} \quad (5.5)$$

Então,

$$\phi_{\ell}(S) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} - \frac{a^2}{2\pi^3} \int d\vec{k}_{\parallel} \left( \int_{-1}^1 \frac{\text{Im}(\Omega^{-1})_{\ell\ell}(t+i\varepsilon) dt}{e^{\beta\omega(t)-1}} - \right. \\ \left. - \pi \sum_{\alpha} \frac{N_{\ell}(\xi_{\alpha})}{D'(\xi_{\alpha})} \frac{(1-\xi_{\alpha}^2)}{\xi_{\alpha}^2} \frac{1}{e^{\beta\omega(\xi_{\alpha})}-1} \right) \quad (5.6)$$

A integral sobre  $\vec{k}_{\parallel}$  dentro da primeira zona de Brillouin bi-dimensional quadrada para o sistema cúbico simples, foi calculada mediante um programa de computação usando o método de Gauss bi-dimensional.

A primeira integral na Eq. (6) foi calculada numericamente mediante uma sub-rotina de integração, a função DCADRE da biblioteca IMSL (International Mathematical and Statistical Library). Para os planos  $\ell = 0$  e  $\ell = 1$ , no somatório da Eq. (6) teremos

$$N_0(\xi_{\alpha}) = \xi_{\alpha} \{ (1+\alpha_{11}\xi_{\alpha}+\xi_{\alpha}^2)(1+\alpha_{22}\xi_{\alpha}) - \beta_{12}\xi_{\alpha}^2 \} \quad (5.7)$$

$$N_1(\xi_{\alpha}) = \xi_{\alpha} (1+\alpha_{00}\xi_{\alpha}+\xi_{\alpha}^2)(1+\alpha_{22}\xi_{\alpha}) \quad (5.8)$$

e os  $\xi_{\alpha}$  são obtidos resolvendo a equação de quinto grau:

$$D(\xi) = \sum_{n=0}^5 a_n \xi^n = 0 \quad , \quad (5.9)$$

com coeficientes dados pelas expressões:

$$a_0 = 1$$

$$a_1 = \alpha_{00} + \alpha_{11} + \alpha_{22}$$

$$a_2 = \alpha_{00}\alpha_{11} + \alpha_{00}\alpha_{22} + \alpha_{11}\alpha_{22} + 2 - (\beta_{12} + \beta_{10}\beta_{01})$$

$$\begin{aligned}
 a_3 &= \alpha_{00} + \alpha_{11} + 2\alpha_{22} + \alpha_{00}\alpha_{11}\alpha_{22} - \beta_{12}\alpha_{00} - \beta_{10}\beta_{01}\alpha_{22} \\
 a_4 &= 1 + \alpha_{11}\alpha_{22} + \alpha_{00}\alpha_{22} - \beta_{12} \\
 a_5 &= \alpha_{22}
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

b) *Estrutura cúbica de face centrada*

Como vimos na seção 4.4, para calcular a magnetização em um cristal cúbico de face centrada, as equações e os cálculos são os mesmos que para o cristal cúbico simples, se fizermos uma renormalização adequada dos parâmetros e variáveis do problema (Eqs. (4.52) a (4.57)).

Para calcular a integral estendida à primeira zona de Brillouin do cristal CFC usamos o método dos pontos especiais desenvolvido por Baldereschi<sup>(21)</sup> e Chadi et al<sup>(22)</sup> para integrais tri-dimensionais (60 pontos), enquanto que para as integrais bi-dimensionais usamos uma extensão do mesmo método de Chadi, desenvolvido por Cunningham<sup>(23)</sup>.

Calculou-se autoconsistentemente a magnetização do volume  $\sigma_v$  em função da temperatura.  $\sigma_0$  e  $\sigma_1$  foram calculados usando  $\sigma_v$  como dado. Para este fim, usou-se a sub-rotina ZSYSTEM da biblioteca IMSL, que resolve um sistema de  $n$  equações não lineares. As raízes da equação  $D(\xi) = 0$  foram calculadas usando o programa POLRT (biblioteca SSP - Scientific and Statistical Package - da IBM).

### 5.3 - Resultados para a magnetização e as relações de dispersão de magnons superficiais

Nas figs. 5.1, 5.2 e 5.3 vemos a magnetização da superfície e do volume em função da temperatura para o ferromagneto cúbico simples com  $S = 1/2$  e para o cúbico de face centrada com  $S = 1/2$  e  $S = 7/2$ , para  $\epsilon_{\parallel} = 1$  e diversos valores de  $\epsilon_{\perp}$ .

Pode-se notar que, tanto para CS como para CFC, a temperatura crítica do volume, que coincide com os valores dados por Tahir-Kheli et al e Flax et al<sup>(17,24)</sup>, domina a transição à fase paramagnética do sistema. Tanto o plano da superfície quanto o segundo plano tem a mesma temperatura crítica do volume.

Observamos também que quando  $\epsilon_{\perp}$  decresce, a superfície mostra uma tendência a passar ao comportamento bi-dimensional (2D) do modelo de Heisenberg, que não tem fase estável ordenada<sup>(25)</sup> (ou seja,  $T_c^{2D} = 0$ ).

A magnetização em função da distância à superfície cresce até atingir o valor da magnetização do volume no terceiro plano. Este comportamento é observado para valores de  $\epsilon_{\perp} < 1.5$ . Para valores de  $\epsilon_{\perp} > 1.5$  a magnetização do segundo plano chega a ser maior que a de volume a temperaturas relativamente altas.

As figs. 5.4 e 5.5 mostram as relações de dispersão dos diferentes ramos de magnons superficiais para os cristais CS e CFC, assim como os limites do contínuo.

Quando T aumenta, aparecem ramos superficiais acús



ticos novos ou os que já estavam presentes se afastam mais do contínuo. Os ramos superficiais óticos, pelo contrário, tendem a desaparecer ou a se aproximar do limite superior do contínuo.  $\epsilon_{\perp} \gtrsim 1$  favorece ramos  $\left\{ \begin{array}{l} \text{óticos} \\ \text{acústicos} \end{array} \right\}$  respectivamente.

A fig. 5.6 mostra o perfil de magnetização para a malha CS e as figs. 5.7 e 5.8 os perfis de magnetização para a malha CFC,  $S = 2 \frac{1}{2}$  e  $S = 7/2$ , respectivamente.

Com a temperatura crítica reduzida  $\tau_c = 8.04$  da fig. 5.8 que corresponde à estrutura CFC,  $S = 7/2$  (ex.: EuO), de nosso cálculo numérico, e usando para  $\frac{I}{k}$  os valores dados por Rushbrooke e Wood<sup>(31)</sup>, a temperatura  $T_c$  tem o valor 78K enquanto que a temperatura medida é 77K.

Na fig. 5.9 está representado o parâmetro  $\xi(\vec{k}_{\parallel})$ , fator de amortecimento da amplitude dos magnons. O modo acústico corresponde à curva de  $\xi$  negativo e o modo ótico à de  $\xi$  positivo. Lembrando-se que  $|\xi|^{\ell}$  dá a amplitude do magnon no plano  $\ell$ , o modo acústico mantém a fase quando varia de plano em plano. Contrariamente, a fase do modo ótico muda em  $\pi$  quando varia-se de plano.

Na tabela 5.1 comparam-se os valores da magnetização da superfície calculados com  $\sigma_{\perp} = \sigma_v$  (denotados  $\sigma_o^{(1)}$ ) e com  $\sigma_2 = \sigma_v$  (denotados  $\sigma_o^{(2)}$ ) para a estrutura CS,  $S = 1/2$  e  $\tau = 0.28$ , e para diversos valores de  $\epsilon_{\parallel}$  e  $\epsilon_{\perp}$ . Foram comparados os resultados da magnetização de superfície supondo que a mesma se alcança no segundo plano (modelo de um plano variado), com os do modelo de dois planos variados. Vê-se que a convergência à magnetização do volume é muito rápida, o que justifica a suposição de que só uns poucos planos, em que a magnetização é diferente do volume, precisam ser considerados. Os re-

sultados indicam que há uma diferença de 15% na magnetização da superfície calculada com os dois modelos.

| $\epsilon_{\parallel}$ | $\epsilon_{\perp}$ | $\sigma_0^{(1)}$ | $\sigma_0^{(2)}$ | $\sigma_1$ |
|------------------------|--------------------|------------------|------------------|------------|
| 0.5                    | 0.5                | 0.278            | 0.235            | 0.831      |
| 0.5                    | 1.0                | 0.460            | 0.400            | 0.842      |
| 1.0                    | 0.5                | 0.550            | 0.500            | 0.859      |
| 1.0                    | 1.0                | 0.730            | 0.700            | 0.904      |
| 1.0                    | 1.5                | 0.825            | 0.801            | 0.936      |
| 2.0                    | 0.5                | 1.078            | 1.078            | 0.947      |
| 1.5                    | 0.5                | 0.870            | 0.845            | 0.914      |

Tabela 5.1 - Comparação dos valores da magnetização de superfície calculados com um ( $\sigma_0^{(1)}$ ) e dois ( $\sigma_0^{(2)}$ ) planos variados. Estrutura CS,  $S=1/2$ ,  $\tau=0.28$  para diversos valores de  $\epsilon_{\parallel}$  e  $\epsilon_{\perp}$ .

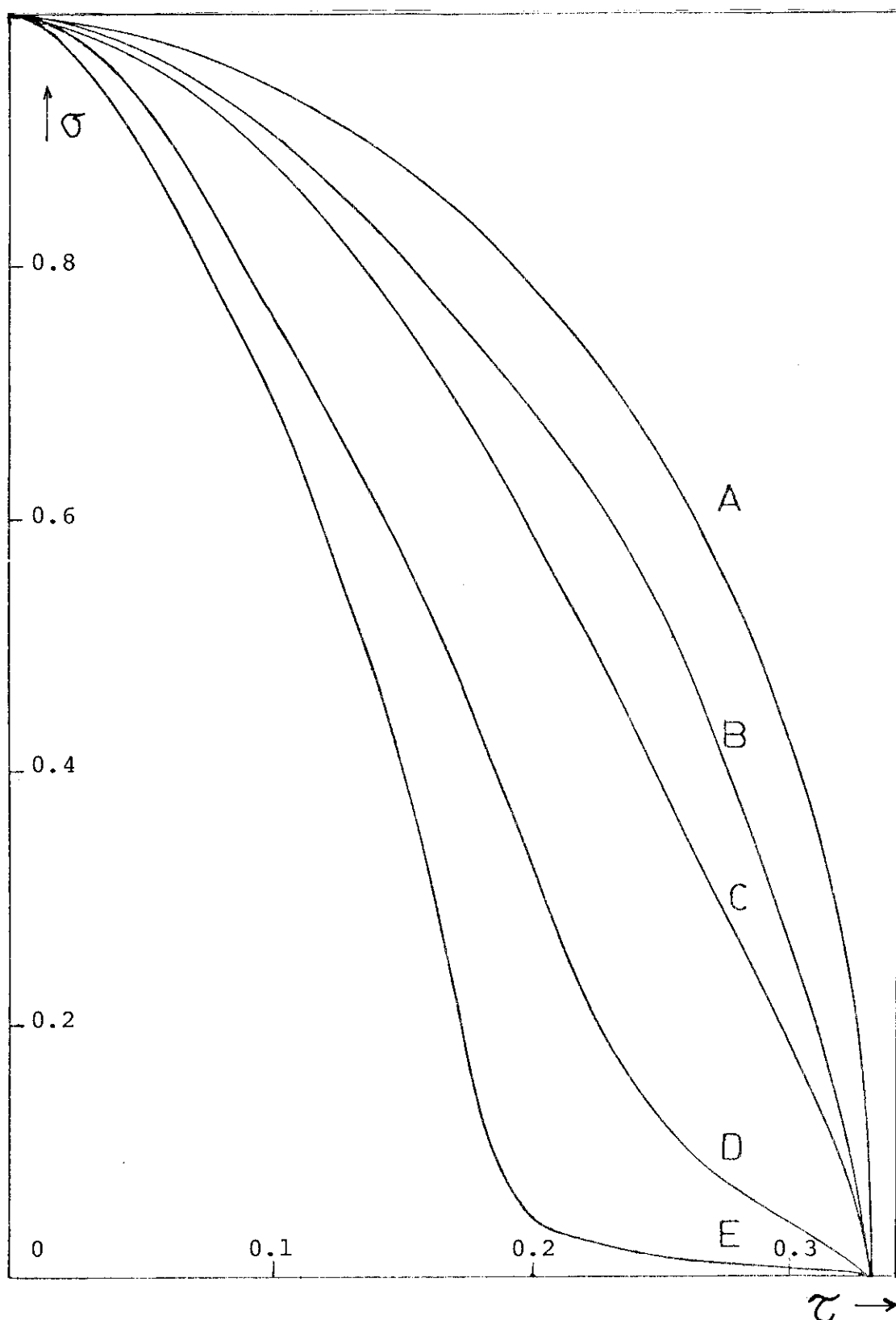


Fig. 5.1 - Magnetização superficial na estrutura cúbica simples em função da temperatura reduzida  $\tau = kT/6Jh^2$ .  $\epsilon_{II} = 1$ ;  $S = 1/2$ ;  $\tau_c = 0.33$ ; A :  $\sigma_V$ ; B :  $\epsilon_I = 1$ ; C :  $\epsilon_I = 0.5$ ; D :  $\epsilon_I = 0.1$ ; E :  $\epsilon_I = 0.01$ .  $\sigma \equiv 2\langle S^Z \rangle$

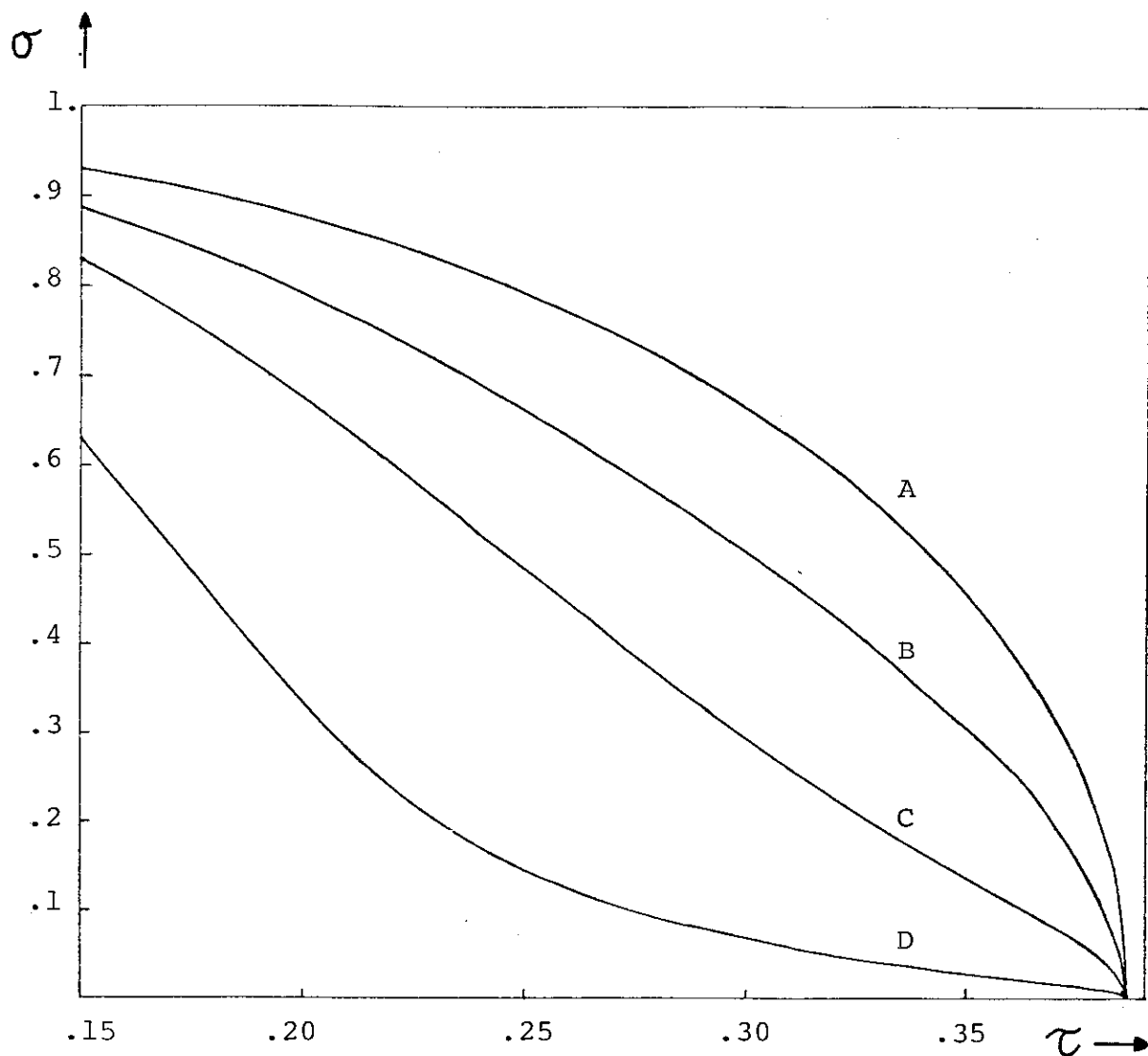


Fig. 5.2 - Cristal cúbico de face centrada. Magnetização de superfície  $\sigma_0$  em função da temperatura reduzida  $\tau = kT/12Ih^2$ .  $\tau_c = 0.386$ . Superfície (111).  $\epsilon_{||} = 1$ . A : magnetização de volume; B :  $\epsilon_{\perp} = 1$  ; C :  $\epsilon_{\perp} = 0.5$  ; D :  $\epsilon_{\perp} = 0.1$ .  $S = 1/2$ .

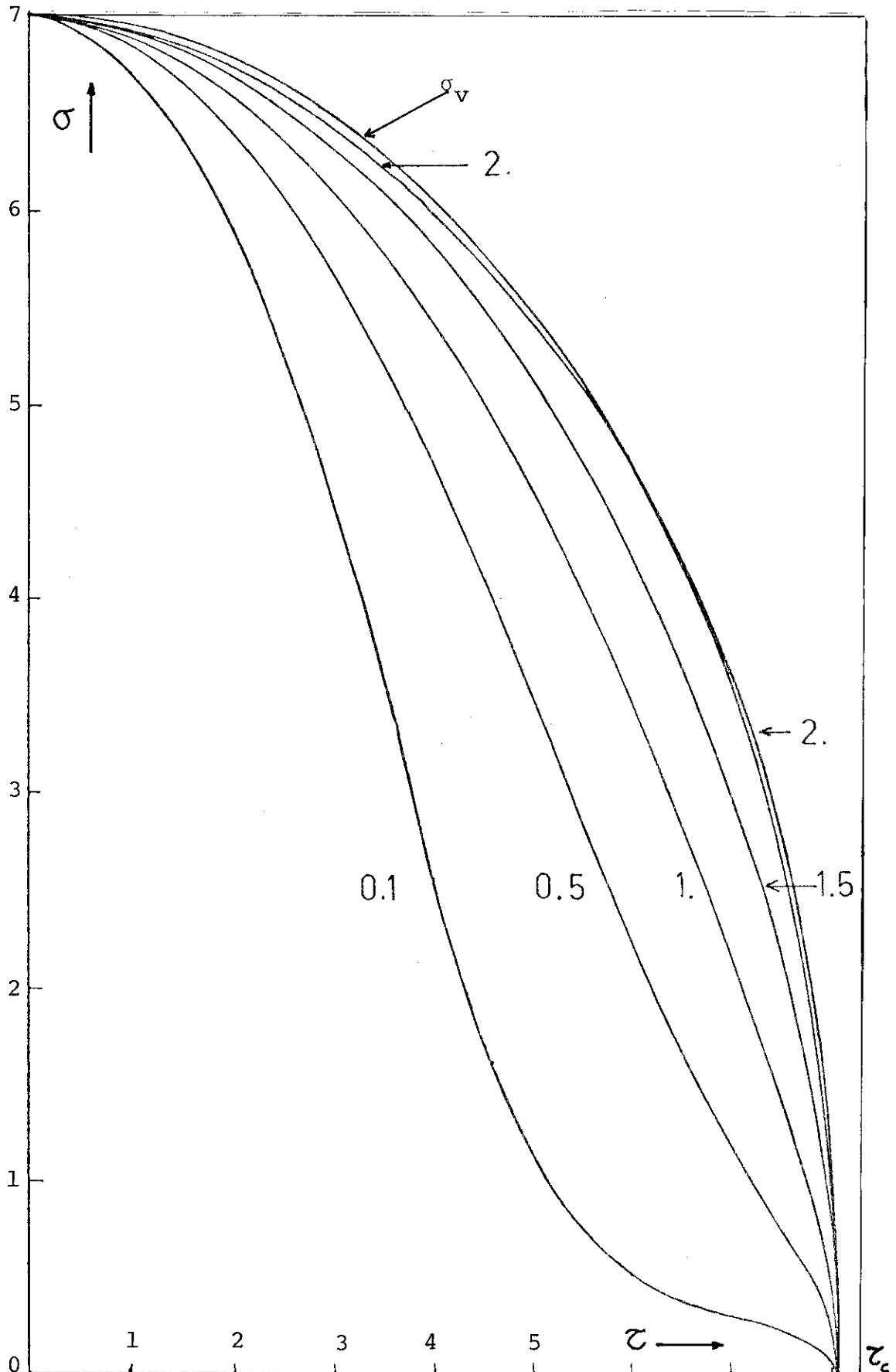


Fig. 5.3 - Cristal cúbico de face centrada  $S=7/2$ , magnetização de superfície (111) para os valores indicados de  $\epsilon_{\perp}$  e  $\epsilon_{\parallel}=1$ , em função da temperatura reduzida  $\tau$ .  $\tau_c=8.04$ .

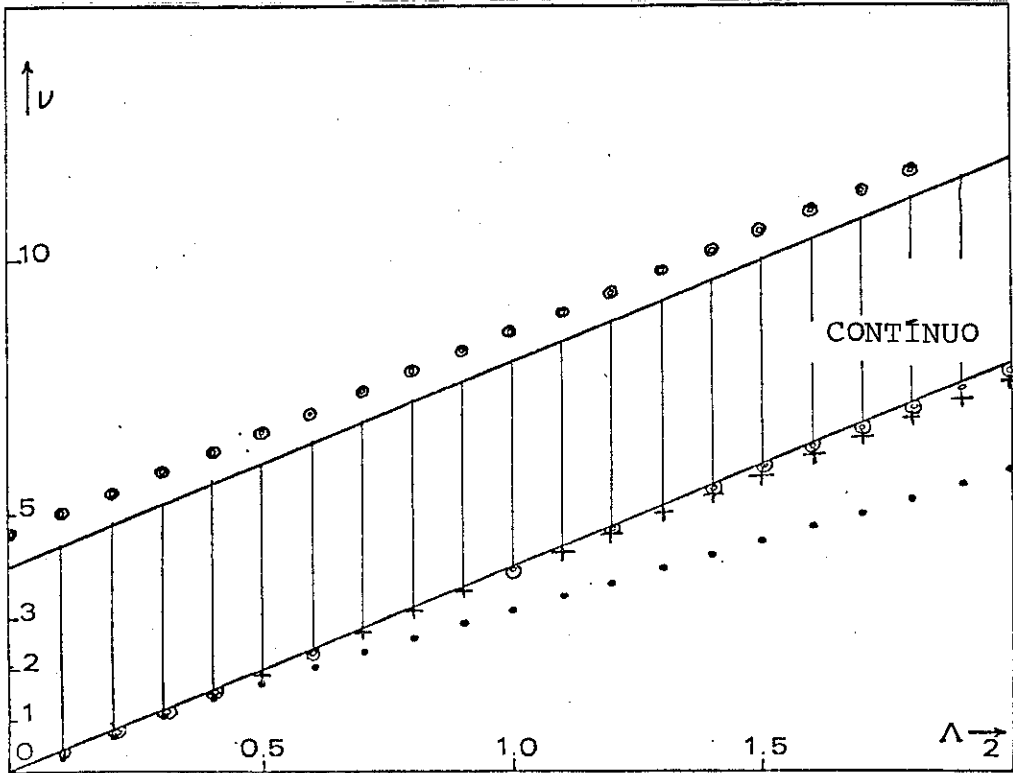


Fig. 5.4 - Relações de dispersão para magnons de superfície para o cristal cúbico simples com uma superfície (010) para  $\epsilon_{\parallel}=1$ ;  $\tau=0.17$ ;  $\epsilon_{\perp}=1$  ( $\oplus$ );  $\epsilon_{\perp}=2$  ( $\odot$ );  $\tau=0.3$ ;  $\epsilon_{\perp}=1$  ( $\cdot$ ).  $\nu$  = frequência angular em unidades de  $2hI\sigma_V$  versus  $\Lambda(\vec{k}_{\parallel})=1-\gamma_0(\vec{k}_{\parallel})$ , vide Eq. (4.4).

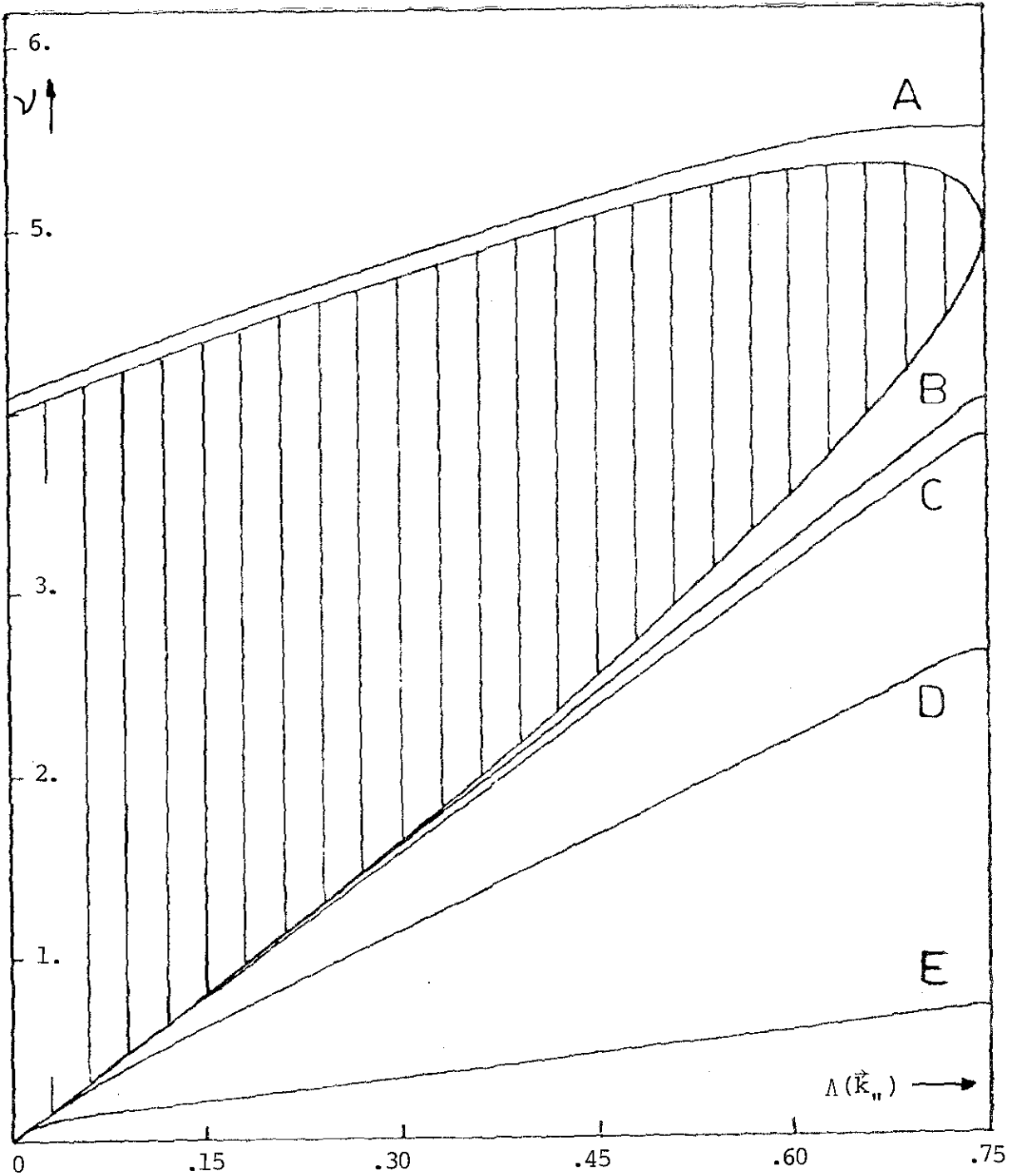


Fig. 5.5 - Relações de dispersão para magnons de superfície na rede CFC. A região com raias verticais é a faixa contínua do espectro. O eixo horizontal representa  $\Lambda(\vec{k}_\parallel) = 1 - \gamma_1(\vec{k}_\parallel)$ . Ver Eq. (4.55). As curvas correspondem respectivamente a: A :  $\tau=2$ ,  $\epsilon_1=1.5$  ; B :  $\tau=2$ ,  $\epsilon_1=0.1$  ; C :  $\tau=5$ ,  $\epsilon_1=0.1$  ; D :  $\tau=2$ ,  $\epsilon_1=0.1$  ; E :  $\tau=5$ ,  $\epsilon_1=0.1$  .

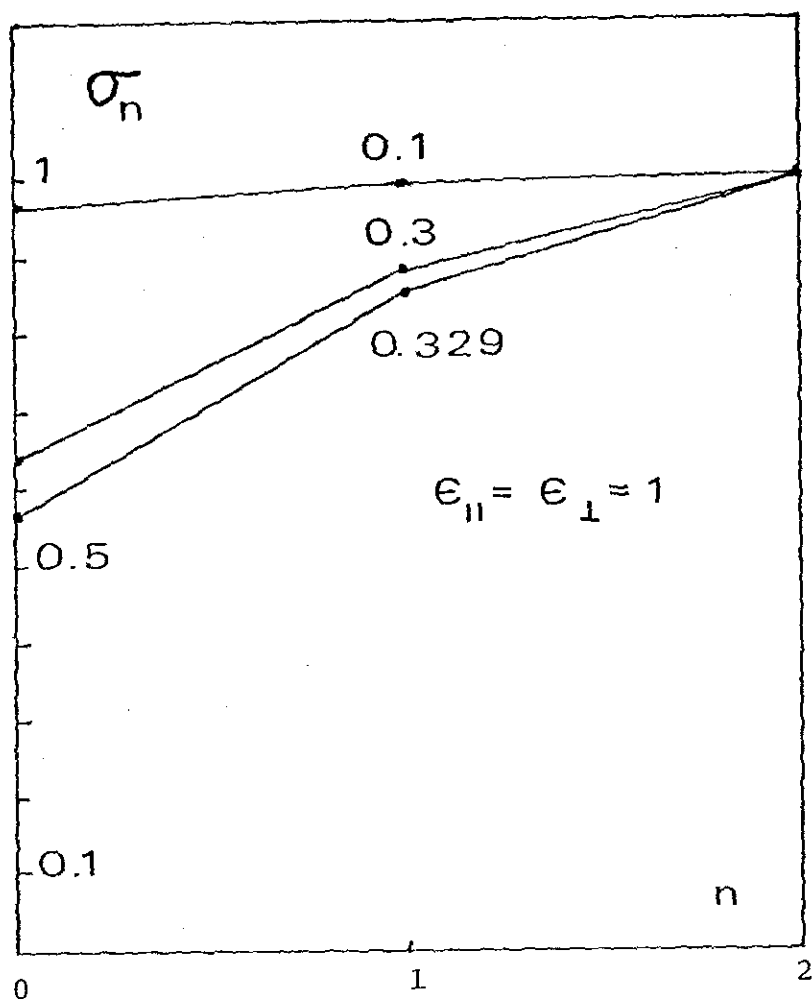


Fig. 5.6 - Perfis de magnetização para o cristal CS (0,1,0)  $S = 1/2$ .  $\epsilon_{\parallel} = 1$ ,  $\epsilon_{\perp} = 1$  e temperaturas indicadas.



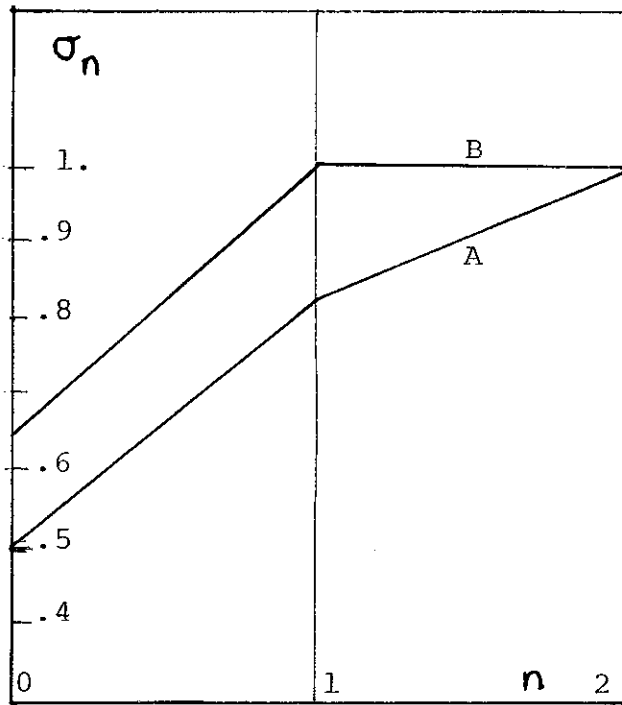


Fig. 5.7 - Perfis de magnetização para o cristal CFC (111)  
 $S = 1/2$ .  $\epsilon_{\parallel} = 1$ ,  $\epsilon_{\perp} = 1$ .  
 A)  $\tau = 0.383$  ; B)  $\tau = 0.356$

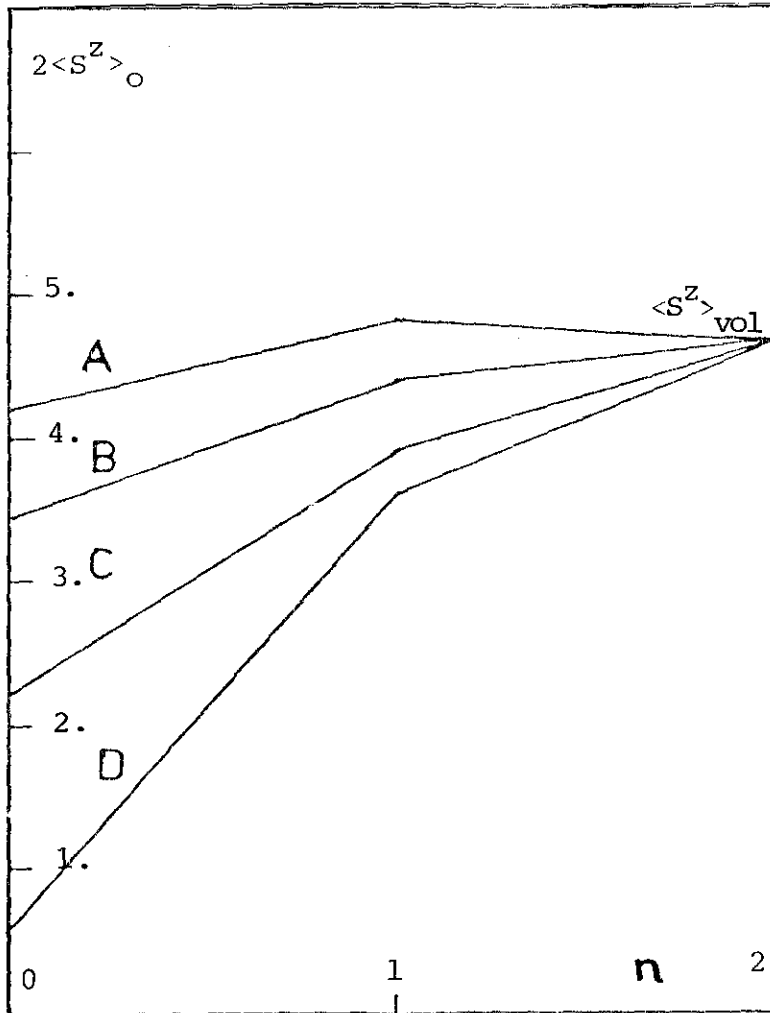


Fig. 5.8 - Perfis de magnetização para o cristal CFC (111)  $S = 7/2$ .  $\tau=6$ ;  $\epsilon_{\parallel}=1$ ; A)  $\epsilon_{\perp}=1.5$ ; B)  $\epsilon_{\perp}=1$ ; C)  $\epsilon_{\perp}=0.5$ ; D)  $\epsilon_{\perp}=0.1$

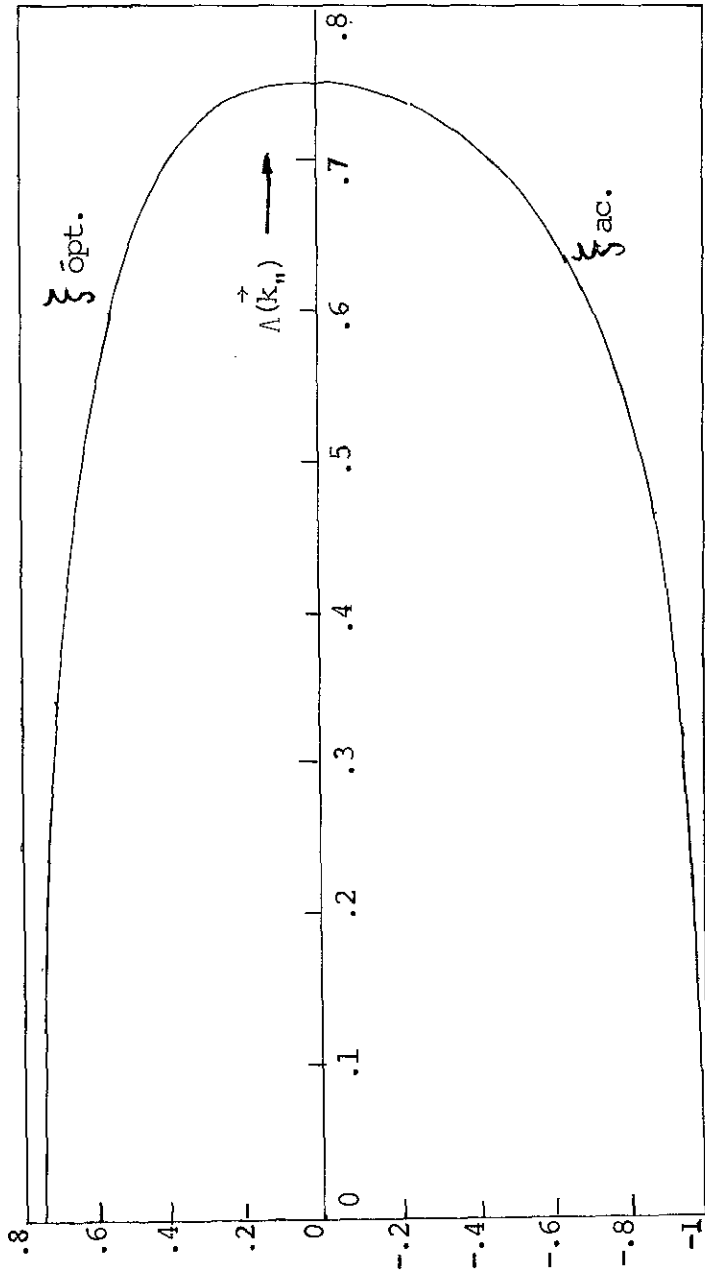


Fig. 5.9 -  $\xi(\vec{k}_n)$ , fator de amortecimento da amplitude dos modos superficiais em função de  $\Lambda(\vec{k}_n) = 1 - \gamma_1(\vec{k}_n)$  (ver Eq. (4.55)).

CAPÍTULO 6ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS6.1 - Introdução

As propriedades magnéticas da superfície de um ferromagneto são difíceis de serem detectadas experimentalmente, uma vez que poucas técnicas são suficientemente sensíveis à superfície e ao spin, de modo a darem informação direta. Uma das novas técnicas disponíveis é a difração de elétrons de baixa energia dos quais pode-se atualmente dispor de feixes com o spin polarizado. A intensidade do feixe difratado está relacionada com a magnetização da superfície (Felcher et al<sup>(26)</sup>).

O primeiro trabalho teórico sobre espalhamento magnético de elétrons de baixa energia pela superfície de um ferromagneto é o de D.L. Mills<sup>(6)</sup>. Ele calcula a seção de choque para  $T \approx 0$ , usando a aproximação de Holstein-Primakoff para os operadores de criação e aniquilação dos desvios de spin. Os modos normais das ondas de spin utilizadas neste trabalho tinham sido obtidos por Mills e Maradudin considerando as interações de intercâmbio entre primeiros e segundos vizinhos:  $J_1$  e  $J_2$ , respectivamente, para um cristal ferromagnético de estrutura cúbica simples<sup>(1)</sup>.

Harriague et al<sup>(27)</sup> calcularam a seção de choque do espalhamento magnético inelástico de elétrons de baixa energia pela superfície (001) de um ferromagneto de Heisenberg cúbico centrado no corpo, também na aproximação de

tron  $\underline{d}$  ou  $\underline{f}$  e  $\Omega_c$  o volume da célula unitária. A constante do acoplamento pode ser talvez da ordem de 0,1 eV<sup>(6)</sup>.

Suponhamos que a Eq. (1) possa ser usada para descrever a interação entre o elétron incidente de baixa energia no experimento de difração de elétrons, e os spins não emparelhados da amostra, se para  $s(\vec{r})$  usarmos a densidade de spin associada com o elétron incidente.

Um potencial de contato desse tipo foi introduzido por de Gennes e Friedel<sup>(28)</sup> e posteriormente usado por Mills<sup>(6)</sup> e Harriague et al<sup>(27)</sup>

$$V(\vec{r}) = \frac{G\Omega_c}{2} s(\vec{r}) \cdot \sum_{\vec{\ell}} S_{\vec{\ell}} \rho(\vec{r}-\vec{\ell}) \quad (6.2)$$

onde  $S_{\vec{\ell}}$  é o operador de spin na posição  $\vec{\ell}$  da rede,  $\rho(\vec{r})$  a densidade de elétrons  $\underline{d}$  ou  $\underline{f}$  do ion, normalizada de modo que

$$\int d^3\vec{r} \rho(\vec{r}-\vec{\ell}) = 1 \quad (6.3)$$

Para calcular a densidade de spin eletrônica  $S(\vec{r})$  expandimos o operador de campo dos elétrons  $\psi(\vec{r})$  em um conjunto completo de estados de uma partícula  $\{\phi(\vec{r})\}$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n,\alpha} c_{n\alpha} \phi_n(\vec{r}) \chi_\alpha \quad (6.4)$$

$$s(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left\{ \psi^\dagger(\vec{r}), \hat{\sigma} \psi(\vec{r}) \right\} = \sum_{\alpha\beta, nm} \sigma_{\alpha\beta} c_{n\alpha}^+ c_{m\beta} \phi_n^*(\vec{r}) \phi_m(\vec{r}) \quad (6.5)$$

onde

$$\hat{\sigma} = \hat{x} \sigma_x + \hat{y} \sigma_y + \hat{z} \sigma_z \quad (6.6)$$

e  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  são as matrizes de Pauli.

### 6.3 - Função de onda do elétron incidente

Na presença da superfície do cristal e elétron incidente pode ser descrito por uma auto-função da forma

$$\phi_{\vec{k}_n, k}(\vec{r}) = \exp [i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_n] f_k(y) \quad (6.7)$$

onde  $\vec{k}_n$  é um vetor de ondas paralelo à superfície do cristal,  $k$  é o vetor de ondas conjugado da variável  $y$ , sendo esta a coordenada perpendicular à superfície<sup>(6)</sup>.

Suponhamos a superfície no plano  $x$ - $z$  e o resto do cristal na região  $y > 0$ . Então para  $y$  grande e negativo  $\phi$  deve ser a solução da equação de ondas para a partícula livre de modo que  $f_k(y)$  será proporcional a  $\sin(ky + \delta)$  onde  $\delta$  é a defasagem, que depende de  $k$  e  $\vec{k}_n$ . Para  $y$  dentro do cristal e perto da superfície, o comportamento de  $f_k(y)$  será complicado. Estu

dos experimentais têm indicado que os elétrons incidentes com energias na vizinhança de 50eV ou menos penetram só uma ou duas camadas atômicas no cristal <sup>(6)</sup>. Em consequência vamos supor que para  $y > 0$ ,  $f_k(y)$  decai rapidamente quando  $y$  aumenta, de maneira que  $\phi_k(\vec{r})$  tem uma amplitude apreciável só na camada superficial.

#### 6.4 - Seção diferencial de espalhamento

A seção diferencial na aproximação de Born é:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi}\right)^2 \sum_{\substack{i,f \\ s,s'}} |\langle \vec{k}', s', f | V | \vec{k}, s, i \rangle|^2 W(i) P(s) \delta(E - E_i + E_f) \quad (6.8)$$

$m$  é a massa do elétron livre,  $|k, s\rangle$  o estado do elétron incidente,  $|k', s'\rangle$  estado do elétron espalhado;  $i$  e  $f$  são respectivamente os estados inicial e final do alvo.

$W(i) = e^{-\beta E_i} / \text{Tr}(e^{-\beta H})$  é a probabilidade de achar o sistema magnético no estado inicial  $i$ ; e  $P(s)$  é a probabilidade de que o elétron chegue à superfície com spin  $s$ . Supomos que há pequena transferência de energia  $E$  de modo que  $k' \approx k$ .  $V$  é o potencial de interação dado pela Eq. (1)

Calculemos o elemento de matriz

$$\langle \vec{k}', s', f | \sum_{\vec{l}} \vec{s} \cdot \vec{S}_{\vec{l}} \rho(\vec{r} - \vec{l}) | \vec{k}, s, i \rangle$$

da Eq. (8).

O termo  $l$ -ésimo da soma

$$\begin{aligned}
\langle k', s', f | S_{\vec{\ell}}^{\alpha} S_{\vec{\ell}}^{\alpha} \rho(\vec{r}-\vec{\ell}) | k, s, i \rangle &= \\
= \langle f | S_{\vec{\ell}}^{\alpha} | i \rangle \langle s' | s^{\alpha} | s \rangle \int d^3\vec{r} \phi_{\vec{k}', n, k'}^*(\vec{r}) \rho(\vec{r}-\vec{\ell}) \phi_{\vec{k}, n, k}(\vec{r}) & \quad (6.9)
\end{aligned}$$

onde

$$\alpha = (x, y, z)$$

e

$$\langle s' | s^{\alpha} | s \rangle \equiv \lambda_{s', s}^{\alpha} \quad (6.10)$$

$s' \neq s$  garante que o espalhamento inelástico é devido à absorção ou emissão de magnons superficiais.

Com  $\Delta\vec{k}_n = \vec{k}'_n - \vec{k}_n$ , calculamos

$$\int d^3\vec{r} \phi_{\vec{k}'_n, k'}^*(\vec{r}) \rho(\vec{r}-\vec{\ell}) \phi_{\vec{k}_n, k}(\vec{r}) = e^{i\Delta\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n} \gamma_n(\Delta\vec{k}_n, k', k) \quad (6.11)$$

onde

$$\gamma_n(\Delta\vec{k}_n, k', k) = \int d^3\vec{r}' f_{k'}(y'+n) f_k(y'+n) \rho(r') e^{i\Delta\vec{k}_n \cdot \vec{r}'_n} \quad (6.12)$$

Utilizamos a notação  $\vec{\ell} = (\vec{\ell}_n, n)$ .

Aqui supomos, por simplicidade, que as funções de onda  $f_k(y)$  não dependem do spin. Então, a Eq. (8) será:

$$\begin{aligned}
\left( \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} \right)_{s'} &= \left( \frac{m}{2\pi} \right)^2 \frac{G\Omega}{2c} \sum_{\substack{i, f, s, \\ n, n'}} \sum_{\substack{\vec{\ell}_n, \vec{\ell}'_n}} P(s) \gamma_n^* \gamma_n e^{-i\Delta\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n} \times \\
&\times \lambda_{s', s}^{\alpha} \langle f | S_{\vec{\ell}}^{\alpha} | i \rangle e^{i\Delta\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}'_n} (\lambda_{s', s}^{\beta})^* \langle f | S_{\vec{\ell}'}^{\beta} | i \rangle^* (e^{-\beta E_i / Z}) \delta(E + E_f - E_i) & \quad (6.13)
\end{aligned}$$



Na RPA os operadores  $S_n^Z$  são substituídos pelos valores médios:  $S_n^Z \rightarrow \langle S_n^Z \rangle$  e são conseqüentemente independentes do tempo, de maneira que estes operadores não contribuem à seção de choque inelástico e serão portanto excluídos do seguinte estudo.

Introduzimos agora as transformadas de Fourier dos operadores de spin em relação a  $\vec{k}_n$ :

$$S_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ = \sum_{\vec{k}_n} e^{i\Delta\vec{k}_n \cdot \vec{k}_n} S_{\vec{k}_n, n}^+ \quad (6.14a)$$

$$S_{\Delta\vec{k}_n, n}^- = \left( S_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ \right)^+ \quad (6.14b)$$

Devido à conservação do momento angular total, a parte de  $s_{\vec{k}}^\alpha S_{\vec{k}}^\alpha$  que contribui ao elemento de matriz da Eq. (9) é

$$\frac{1}{2} \left[ s_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ s_{\Delta\vec{k}_n, n}^- + s_{\Delta\vec{k}_n, n}^- s_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ \right] \quad (6.15)$$

Substituindo a Eq. (15) em Eq. (13) e escrevendo

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{ixt} \quad (6.16)$$

encontramos

$$\left( \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} \right)_{\mathbf{s}}^{\text{inel}} = \left( \frac{m}{2\pi} \right)^2 \frac{G\Omega}{2} \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{n}, \mathbf{n}'} P(\mathbf{s}) \frac{\gamma_{\mathbf{n}}^* \gamma_{\mathbf{n}'}}{4} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\lambda_{\mathbf{s}}^+ \lambda_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^-}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt} \langle S_{\Delta\vec{k}_n, n}^- (0) S_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ (t) \rangle + \right.$$

$$+ \frac{\lambda_{s's}^- \lambda_{ss'}^+}{2\pi} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt} \langle S_{\Delta\vec{k}_n, n}^+ (0) S_{\Delta\vec{k}_n, n}^- (t) \rangle \right\} \quad (6.17)$$

pois os  $\alpha$  e  $\beta$  que contribuem ao espalhamento inelástico são  $(\alpha, \beta) = (\pm, \mp)$ .

Como já dissemos, vamos supor que os elétrons não penetram mais do que o primeiro plano,  $n = 0$ .

As funções de correlação  $\langle S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\pm} (0) S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\mp} (t) \rangle$  podem ser relacionadas às funções de Green:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\mp} (0) S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\pm} \rangle e^{iEt} \frac{dt}{2\pi} = -2 \frac{\text{Im} \langle \langle S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\pm} ; S_{\Delta\vec{k}_n, n}^{\mp} \rangle \rangle_E^r}{e^{\beta E} - 1} \quad (6.18)$$

$P(s)$ , a fração de polarização dos elétrons incidentes, tem a forma

$$P(s) = \begin{cases} x, & S = \uparrow \\ 1-x, & S = \downarrow \end{cases} \quad (6.19)$$

Os elementos de matriz  $\langle S | \lambda^{\alpha} | S' \rangle$  são

$$\lambda_{\uparrow\downarrow}^+ = \lambda_{\downarrow\uparrow}^- = 1 \quad (6.20)$$

Supomos que o spin dado por  $s = \uparrow$  é paralelo à magnetização. Para  $s' = \uparrow$  que corresponde à absorção de energia pelo feixe de elétrons, a seção diferencial de choque inelástico é

$$\left( \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} \right)_{\uparrow}^{\text{inel}} = - \left( \frac{m}{2\pi} \right)^2 \frac{G\Omega_C}{4} |\gamma|^2 x \text{Im} \langle \langle S_{\Delta\vec{k}_n, 0}^+ ; S_{\Delta\vec{k}_n, 0}^- \rangle \rangle_E^B(E) \quad (6.21)$$

Para  $S' = \downarrow$  correspondente a uma perda de energia pelos elétrons, a seção diferencial de choque inelástico é

$$\left( \frac{d^2\sigma}{dEd\Omega} \right)_{\downarrow}^{\text{inel}} = - \left( \frac{m}{2\pi} \right)^2 \frac{G\Omega_C}{4} |\gamma|^2 (1-x) \times$$

$$\times \text{Im} \langle\langle S_{\Delta\vec{k}_{\parallel},0}^+ ; S_{\Delta\vec{k}_{\parallel},0}^- \rangle\rangle_{-E}^r \left[ 1+B(-E) \right] \quad (6.22)$$

$$B(E) = (e^{\beta E} - 1)^{-1} \quad (6.23)$$

Obtivemos assim a seção diferencial de espalhamento de elétrons por cristais ferromagnéticos semi-infinitos, tanto para absorção como para emissão de energia pelos elétrons do feixe.

### 6.5 - Resultados

Os resultados mostram que a densidade espectral de magnons no plano da superfície, que é o ingrediente fundamental das Eqs. (22) e (23) para a seção diferencial de espalhamento inelástico, é fortemente dependente dos parâmetros da superfície.

Nas figs. 6.1 e 6.2 estão representados os valores de  $d^2\sigma/dEd\Omega$  para pequena transferência de momento  $|\Delta\vec{k}_{\parallel}| \approx 0$ , e para  $\epsilon_{\perp} < 1$ . Elas mostram um pico muito agudo quase no extremo de baixas energias do contínuo e, quando a energia aumenta, a seção de choque decresce até que perto do limite superior  $t = 1$ ,  $\text{Im} g_{00}(E, \vec{k}_{\parallel})$  tende a zero como  $(1-t)^{1/2}$ .

Para  $\epsilon_{\perp} > 1$ , pelo contrário, observamos que, além

de um máximo perto do extremo de baixa energia, aparece outro pico muito menor no extremo superior do intervalo de energias.

Não é difícil interpretar este comportamento qualitativo da densidade local de magnons. Para  $\epsilon_{\perp} < 1$ , como mostra a fig. 5.5, existe um ramo acústico de magnons superficiais de energia muito próxima ao extremo inferior do contínuo.

Isto aparece como uma ressonância nas funções de onde de magnons de volume de baixa energia na superfície e como uma concentração de estados do volume nesse extremo da banda.

Quando  $\epsilon_{\perp}$  aumenta, ainda achamos, como se pode ver nas curvas das figs. (6.1) e (6.2), para  $\epsilon_{\perp} = 1.5$ , um magnon de superfície acústico, mas ao mesmo tempo aparece um ramo óptico de magnon superficial a energias por cima do contínuo, e isto produz um efeito ressonante similar sobre os estados do volume com energia próxima ao limite superior do contínuo, que aparece no pico menor no extremo de altas energias.

Os resultados obtidos aqui são similares aos de Harriague et al.<sup>(27)</sup>, para o ferromagneto cúbico centrado no corpo, no que se refere à forma geral das curvas, a baixas temperaturas. Em nosso caso, calculamos a seção diferencial de choque para a estrutura CFC e os valores da magnetização empregados são os obtidos autoconsistentemente.

O efeito da temperatura, fora um fator de escala devido à magnetização em IM  $g_{00}$  (Eq. (3.20), é de reduzir a magnetização de superfície e do segundo plano em relação ao valor do volume, como já foi discutido no capítulo 5 (ver figs. 5.1, 5.2 e 5.3).

Esta redução de  $\langle S_0^Z \rangle$  e  $\langle S_1^Z \rangle$  quando T aumenta é de alguma maneira equivalente a reduzir ambos  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ .

Outro efeito da temperatura finita é a possibilidade de absorção de magnons pelo elétron incidente.

Os cálculos da seção 5.3 foram feitos visando interpretar experimentos de espalhamento com elétrons polarizados.

Como já foi mencionado na seção 4 deste capítulo, a seção diferencial de choque elástico dependerá, na aproximação RPA, de  $(\langle S_0^Z \rangle)^2$ . Aproveitando esta dependência, Wolfram et al<sup>(29)</sup> obtiveram a magnetização de superfície de NiO anti-ferromagnético em uma experiência de choque elástico.

Saldaña et al<sup>(30)</sup> calculam a seção diferencial de choque elástico e inelástico em níquel.

Assim, através de medições simultâneas de seção de choque elástico e inelástico de elétrons com polarização de spin, podemos obter  $\langle S_0^Z \rangle$  e a densidade espectral local de magnons  $\text{Im } g_{00}(\Delta \vec{k}_n, \omega)$ .

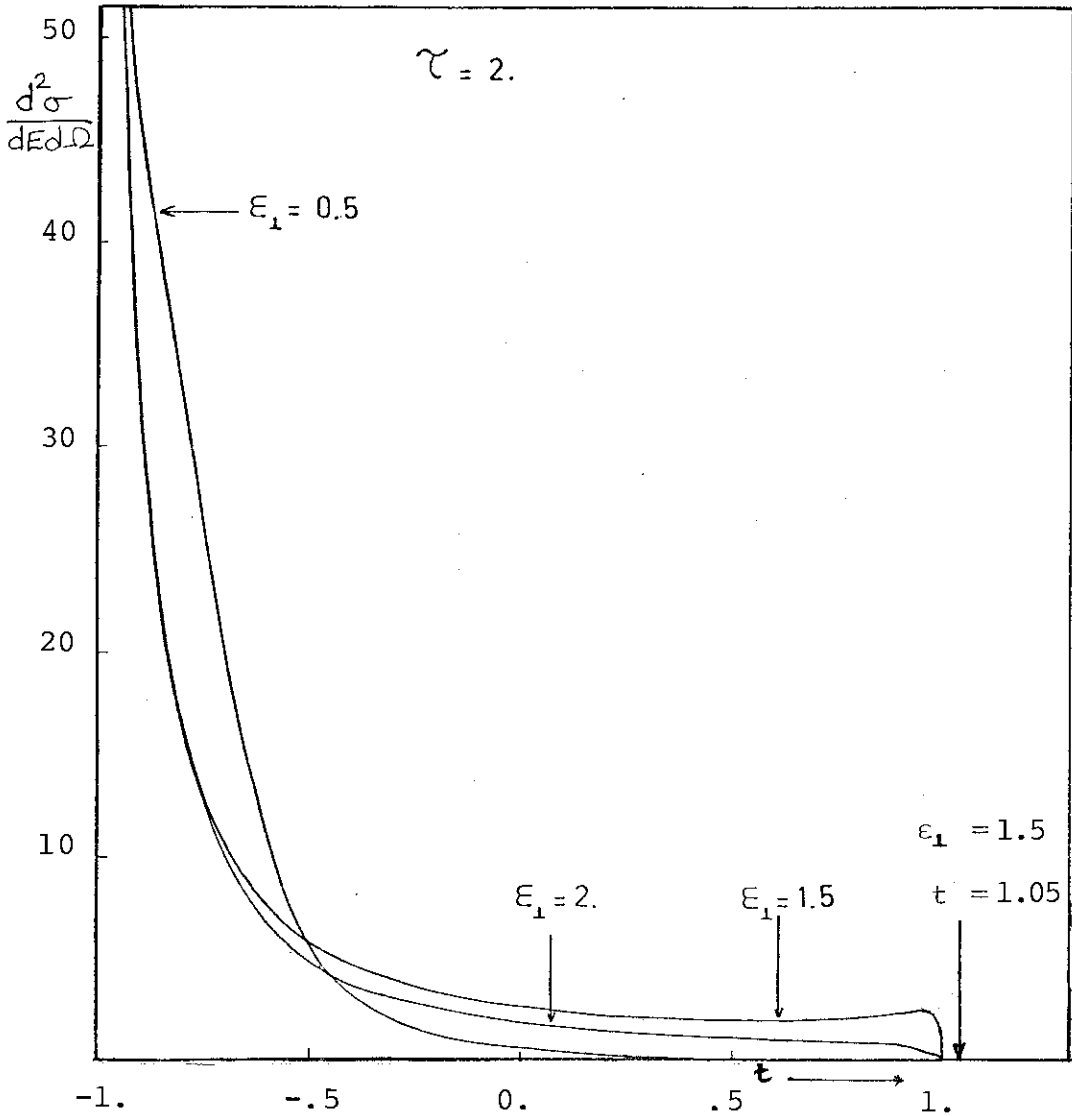


Fig. 6.1 - Seção diferencial de espalhamento inelástico de elétrons. Estrutura CFC, com superfície (111).  $\tau = 2.$  As ordenadas são proporcionais a  $\text{Im } g_{00}(t) (1 + 1/(e^{-\beta\hbar\nu} - 1))$ , com  $\nu < 0$ , correspondendo à emissão de magnons. A abscissa é a variável  $t$ , ligada com  $\nu$  pela Eq. (4.59).  $\epsilon_{\parallel} = 1.$   $t = 1.05$  corresponde ao modo localizado com  $\epsilon_{\perp} = 1.5.$

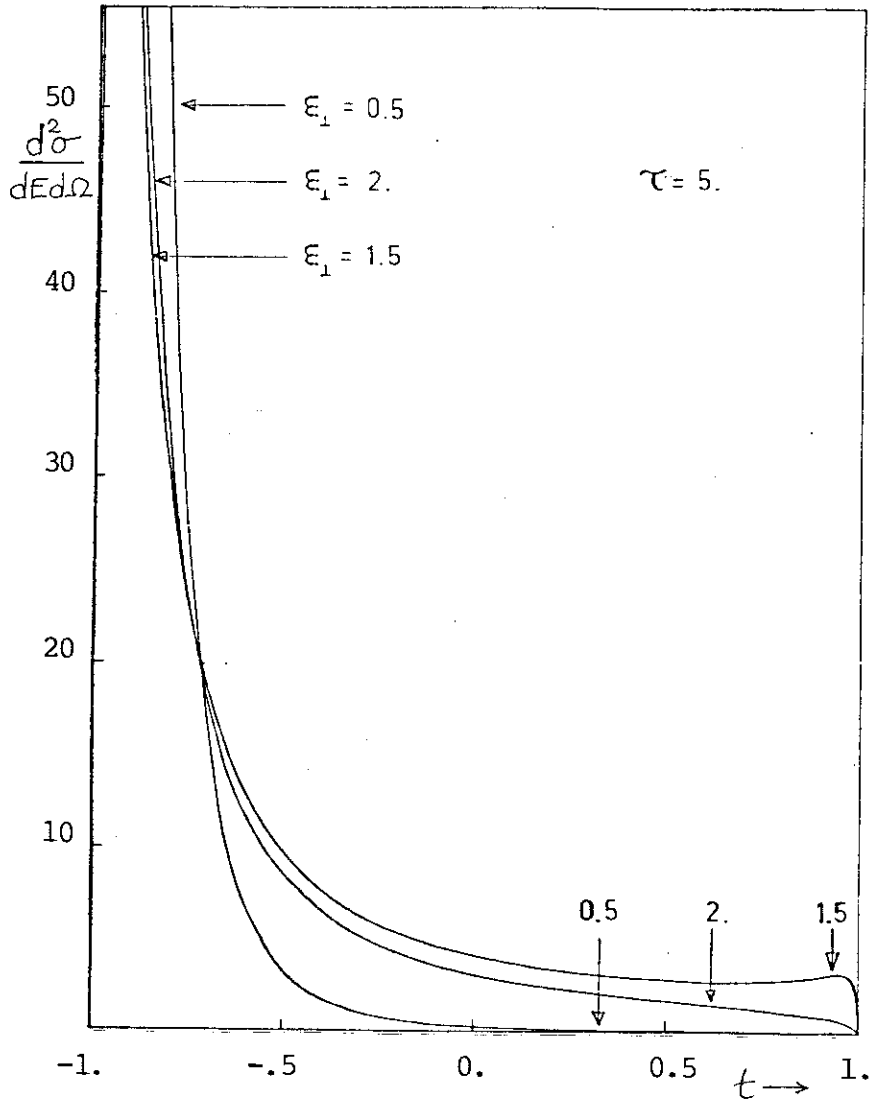


Fig. 6.2 - Idem Fig. 6.1, para  $\tau = 5$ .

CAPÍTULO 7

EFETOS DA ANISOTROPIA SUPERFICIAL NA INTERAÇÃO DE INTERCÂMBIO

Até agora estudamos sistemas semi-infinitos representados pelo Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico.

Vamos agora considerar o caso em que se tem anisotropia na constante de intercâmbio<sup>(31)</sup> no plano da superfície, e em particular, na direção z, por simplicidade. Veremos qual o efeito dessa anisotropia sobre a magnetização da superfície.

Para isso aplicaremos o método das funções de Green desenvolvido no capítulo 3 e neste capítulo.

O Hamiltoniano que escolheremos é:

$$\begin{aligned}
 H &= - \sum_{i \neq j} I_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \eta_{ij} S_i^z S_j^z) = \\
 &= - \sum_{i \neq j} \left\{ \frac{I_{ij}}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + \eta_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \right\} \quad (7.1)
 \end{aligned}$$

O sistema de equações de movimento para as funções de Green  $\tilde{e}$ , neste caso:

$$\sum_m \left[ \left\{ \omega - 2 \sum_{\ell} \langle S_{\ell}^z \rangle \eta_{i\ell} I_{i\ell} (\vec{k}_n = 0) \right\} \delta_{im} + 2 \langle S_i^z \rangle \sum_{\ell} I_{\ell m} (\vec{k}_n) \delta_{i\ell} \right] G_{mj}(\omega, \vec{k}_n) = \frac{\langle S_i^z \rangle}{\pi} \delta_{ij} \quad (7.2)$$

com



$$\Omega_{im}(\omega, \vec{k}_n) = \left\{ \omega - 2 \sum_{\ell} \langle S_{\ell}^Z \rangle \eta_{i\ell} I_{i\ell}(\vec{k}_n=0) \right\} \delta_{im} + 2 \langle S_i^Z \rangle \sum_{\ell} I_{\ell m}(\vec{k}_n) \delta_{i\ell} \quad (7.3)$$

onde

$$\eta_{i\ell} = \begin{cases} \eta & \text{se } i=\ell=0 \\ 1 & \text{se } i \text{ ou } \ell \neq 0 \end{cases} \quad (7.4)$$

O valor do parâmetro  $\alpha_{00}$  definido na Eq. (4.59) fica modificado com relação ao caso isotrópico:

$$\alpha_{00}^{anis} = \alpha_{00}^{isot} + 2\varepsilon_n \sigma_0 (1-\eta) \quad (7.5)$$

O resto dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  não mudam.

Se consideramos o volume paramagnético  $T > T_C^V$ ,  $\langle S_V^Z \rangle \equiv 0$  e a matriz  $\Omega$  se reduz a (lembrando que o terceiro plano, na nossa aproximação, se comporta como o volume):

$$\Omega = \begin{vmatrix} \omega - \alpha_{00} & \beta_{01} & 0 & & & \\ \beta_{10} & \omega - \alpha_{11} & \beta_{12} & & & \\ & 0 & \omega - \alpha_{22} & 0 & & \\ & & 0 & \omega & 0 & \\ & & & 0 & \omega & 0 \\ & & & & & \ddots \end{vmatrix} \quad (7.6)$$

com

$$\text{Det } \Omega = \lim_{N \rightarrow \infty} \omega^{N-3} (\omega - \alpha_{22}) \left[ (\omega - \alpha_{11}) (\omega - \alpha_{00}) - \beta_{10} \beta_{01} \right] \quad (7.7)$$

As raízes do  $\text{Det } \Omega = 0$  são:

$$\omega = \omega_0 = \alpha_{22} \quad (7.8a)$$

$$\omega_{\frac{1}{2}} = \frac{\alpha_{00} + \alpha_{11}}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\alpha_{00} + \alpha_{11}}{2} \right)^2 - (\alpha_{00} \alpha_{11} - \beta_{10} \beta_{01})} \quad (7.8b)$$

Agora

$$\text{Adj } \Omega_{00} = \omega^{N-3} \cdot (\omega - \alpha_{11}) (\omega - \alpha_{22}) \quad (7.9)$$

$$\text{Adj } \Omega_{11} = \omega^{N-3} \cdot (\omega - \alpha_{00}) (\omega - \alpha_{22}) \quad (7.10)$$

e  $(\Omega^{-1})_{00}$  e  $(\Omega^{-1})_{11}$  são respectivamente:

$$(\Omega^{-1})_{00} = \frac{\omega - \alpha_{11}}{(\omega - \alpha_{11}) (\omega - \alpha_{00}) - \beta_{10} \beta_{01}} \quad (7.11)$$

$$(\Omega^{-1})_{11} = \frac{\omega - \alpha_{00}}{(\omega - \alpha_{11}) (\omega - \alpha_{00}) - \beta_{10} \beta_{01}} \quad (7.12)$$

onde  $\alpha_{ij}$  e  $\beta_{ij}$  são os definidos nas Eqs. (4.53) a (4.55).

Agora temos que

$$\text{Im}(\Omega^{-1})_{mn}(\omega, \vec{k}_n) = -\pi \sum_{\alpha} \text{Res}(\omega_{\alpha}) = -\pi \sum_{\alpha} \frac{N_n(\omega_{\alpha})}{\left[ \text{Det}'(\omega) \right]_{\omega=\omega_{\alpha}}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) \quad (7.13)$$

$$\text{Im}(\Omega^{-1})_{00} = -\pi \left\{ \left( \frac{\omega_1 - \alpha_{11}}{\omega_1 - \omega_2} \right) \delta(\omega - \omega_1) + \left( \frac{\omega_2 - \alpha_{11}}{\omega_2 - \omega_1} \right) \delta(\omega - \omega_2) \right\} \quad (7.14a)$$

$$\text{Im}(\Omega^{-1})_{11} = -\pi \left\{ \left( \frac{\omega_1 - \alpha_{00}}{\omega_1 - \omega_2} \right) \delta(\omega - \omega_1) + \left( \frac{\omega_2 - \alpha_{00}}{\omega_2 - \omega_1} \right) \delta(\omega - \omega_2) \right\} \quad (7.14b)$$

e

$$\phi_0(S) = \frac{a^2}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}_\parallel}{\omega_1 - \omega_2} \left[ \frac{\omega_1^{-\alpha_{11}}}{e^{\beta\omega_{1-1}}} - \frac{\omega_2^{-\alpha_{11}}}{e^{\beta\omega_{2-1}}} \right] \quad (7.15)$$

$$\phi_1(S) = \frac{a^2}{2\pi^2} \int d\vec{k}_\parallel \frac{1}{\omega_1 - \omega_2} \left[ \frac{\omega_1^{-\alpha_{00}}}{e^{\beta\omega_{1-1}}} - \frac{\omega_2^{-\alpha_{00}}}{e^{\beta\omega_{2-1}}} \right] \quad (7.16)$$

Para obter os valores autoconsistentes da magnetização  $\langle S_0^Z \rangle, \langle S_1^Z \rangle$ , as quantidades  $\phi_0(S)$  e  $\phi_1(S)$  devem ser substituídas nas Eqs. (3.49).

Os resultados que aparecem na fig. 7.1 mostram que, com anisotropia superficial, é possível que, para certos valores das constantes de intercâmbio, a temperatura crítica da superfície seja maior que a do volume. Para  $\eta = 2$  e  $\epsilon_\parallel = 1.5$ ,  $T_C^S$  é praticamente o dobro da temperatura crítica  $T_C^V$  do volume infinito.

Estes resultados estão de acordo com os de Sarmiento et al<sup>(13)</sup>, para um ferromagneto de Ising semi-infinito com spin 1/2, para temperaturas  $T < T_C^V$ , e com os de Diep-The-Hung et al<sup>(32)</sup>, que obtêm curvas de magnetização para filmes finos magnéticos, com diferentes valores da anisotropia de intercâmbio, tanto de volume como de superfície. Em ambos os casos, o comportamento é qualitativamente idêntico ao do nosso sistema.

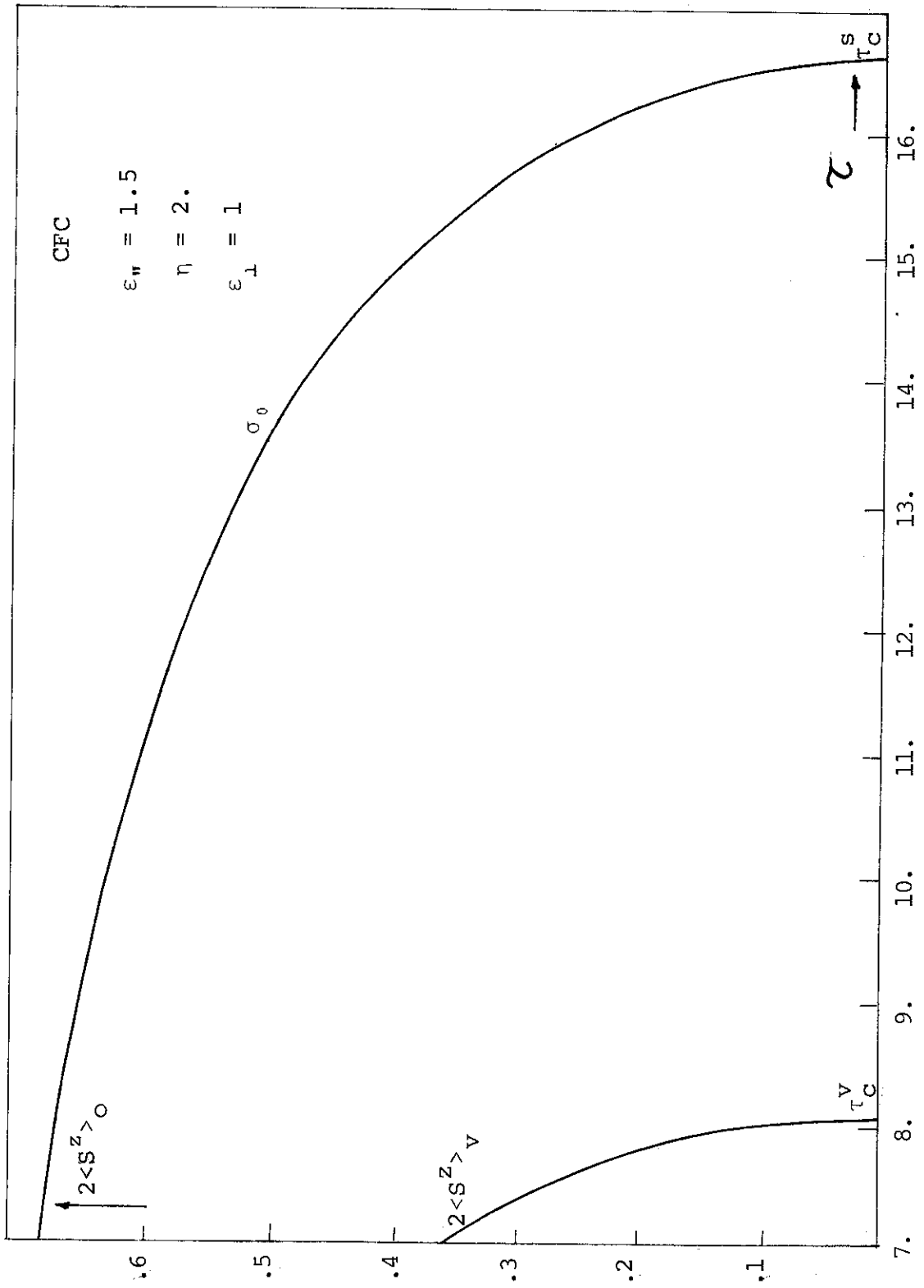


Fig. 7.1 - Magnetização de superfície com anisotropia.

CAPÍTULO 8DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Neste trabalho generaliza-se a formulação da RPA de Hewson e Ter-Haar<sup>(18)</sup> para antiferromagnetos isolantes Heisenberg, para aplicá-la a um ferromagneto semi-infinito com spin arbitrário  $S$ . Com isto, consegue-se ir além de uma série de cálculos anteriores de propriedades magnéticas de superfícies.

Foram obtidos resultados autoconsistentes para a magnetização por plano para todo o intervalo de temperaturas até a temperatura crítica e qualquer valor de spin. Mas para isso tivemos que nos limitar a considerar variações de  $\langle S^Z \rangle$  somente sobre uns poucos planos a partir da superfície.

Os resultados de Binder et al<sup>(33)</sup>, obtidos com cálculos de Monte Carlo, embora mostrem que um pequeno desvio da magnetização pode se estender a distâncias maiores, concordam qualitativamente com os do presente trabalho. Em particular, eles mostram que  $\sigma_2$  difere de  $\sigma_V$  em menos de 7% até temperaturas  $T$  da ordem de 77% de  $T_C$ .

A restrição a dois planos variados pode ser a causa de que a magnetização do segundo plano, para valores de  $\epsilon_1 > 1.5$ , chegue a ser maior que os valores do volume, como vimos na seção 5.3.

Também o comportamento da superfície, perto da temperatura crítica, aparentemente depende desta aproximação, desde que o efeito de impor  $\sigma_2 = \sigma_V$  é aumentar artificialmente os

valores autoconsistentes de  $\sigma_0$  e  $\sigma_1$ .

Outras limitações do presente formalismo são inerentes à RPA e deverão ser superadas desenvolvendo um tratamento melhor das flutuações longitudinais, isto é, considerando o efeito da diferença  $S_n^Z - \langle S_n^Z \rangle$  e eventualmente também o efeito da vida média finita dos estados de magnons. Cottam<sup>(34)</sup> formulou o problema de um ferromagneto semi-infinito, na representação de férmions fictícios válida para  $S = 1/2$ , na qual é possível calcular correções perturbativas à RPA, mas ele não obtém resultados numéricos além da RPA para a rede CS. Este método não pode ser aplicado para  $S > 1/2$ , havendo restrições quanto ao intervalo de temperaturas.

Os resultados do presente trabalho dão um expoente crítico da magnetização de superfície menor que um.

O cálculo da magnetização com anisotropia na superfície foi feito para  $T$  menor que a temperatura crítica do volume  $T_C^V$ , usando-se o mesmo formalismo e modificando-se os parâmetros da superfície adequadamente. Para temperaturas maiores que a  $T_C$  do volume,  $\langle S_{VOL}^Z \rangle = 0$ , e o sistema fica reduzido a uma lâmina de duas camadas com diferentes parâmetros. Para  $\epsilon_{\parallel}$  e  $\epsilon_{\perp}$  maiores que 1 a temperatura crítica da superfície  $T_C^S$  é maior que  $T_C^V$ .

Concluiu-se também que, incluindo a seção diferencial de espalhamento elástico e inelástico para elétrons com o spin polarizado, diversas informações podem ser obtidas sobre as interações de intercâmbio na superfície plana de ferromagnetos isolantes e devemos esperar que as Eqs. (6.21) e (6.22) sugiram

um modelo útil para interpretar tais experimentos.

Em particular, o efeito de mudar a temperatura e os parâmetros de superfície determina o aparecimento de picos de ressonância na seção diferencial de choque, que por sua vez está relacionada de uma maneira muito simples com a função de distribuição espectral das excitações magnéticas.

APÊNDICE ACÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ DO HAMILTONIANO DE HEITLER E LONDON

Calculemos em primeiro lugar

$$\begin{aligned} (\psi_0 | H | \psi_0) &= (\psi_0 | H_1(r_1) | \psi_0) + (\psi_0 | H_2(r_2) | \psi_0) + \\ &+ (\psi_0 | V_2(r_1) | \psi_0) + (\psi_0 | V_1(r_2) | \psi_0) + (\psi_0 | V^{\text{int}}(r_1, r_2) | \psi_0) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$(\psi_0 | H_1 | \psi_0) = \varepsilon = (\psi_0 | H_2 | \psi_0) \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} (\psi_0 | V_2(r_1) | \psi_0) &= \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) V_2(r_1) \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= \int \phi_2(r_2) \phi_2(r_2) d\vec{r}_2 \int \phi_1(r_1) V_2(r_1) \phi_1(r_1) d\vec{r}_1 = V_{21} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$(\psi_0 | V_1(r_2) | \psi_0) = \int \phi_2(r_2) V_1(r_2) \phi_2(r_2) d\vec{r}_2 = V_{12} \quad (\text{A.4})$$

$$V_{21} = V_{12} = V \quad (\text{por hipótese}) \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} (\psi_0 | V^{\text{int}}(r_1, r_2) | \psi_0) &= \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= C_{12} = C \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

é a repulsão coulombiana entre os elétrons.

Calculemos agora o elemento



$$(\psi_1 | H | \psi_1)$$

Separamo-no da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \left\{ \psi_1 | H_1(r_1) + V_2(r_1) | \psi_1 \right\} + \left\{ \psi_1 | H_2(r_2) + V_1(r_2) | \psi_1 \right\} + \\ & + \left\{ \psi_1 | V^{\text{int}}(r_1, r_2) | \psi_1 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

O primeiro termo

$$\begin{aligned} (\psi_1 | H_1(r_1) + V_2(r_1) | \psi_1) &= \iiint \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) \left\{ H_1(r_1) + V_2(r_1) \right\} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= \int \phi_1(r_2) \phi_1(r_2) d\vec{r}_2 \int \phi_2(r_1) \left\{ H_1(r_1) + V_2(r_1) \right\} \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 = \\ &= \int \phi_2(r_1) \left\{ -\nabla^2(r_1) + V_1(r_1) + V_2(r_1) \right\} \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 = \varepsilon + \int \phi_2(r_1) V_1(r_1) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 = \\ &= \varepsilon + V \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

O segundo termo é também  $\varepsilon + V$ . O terceiro,

$$(\psi_1 | V^{\text{int}} | \psi_1) = \iiint \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = C \quad (\text{A.9})$$

Logo

$$(\psi_1 | H | \psi_1) = (\psi_0 | H | \psi_0) = 2\varepsilon + 2V + C \quad (\text{A.10})$$

Agora, os elementos não diagonais:

$$\begin{aligned}
(\psi_0 | H | \psi_1) &= \iiint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \left\{ H_1(r_1) + H_2(r_2) + V_2(r_1) + V_1(r_2) + \right. \\
&+ \left. v^{\text{int}}(r_1, r_2) \right\} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\
&= \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \left\{ H_1(r_1) + V_2(r_1) \right\} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \\
&+ \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \left\{ H_2(r_2) + V_1(r_2) \right\} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \\
&+ \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) v^{\text{int}}(r_1, r_2) \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) = \\
&= \int \phi_2(r_2) \phi_1(r_2) d\vec{r}_2 \int \phi_1(r_1) \left\{ H_1(r_1) + V_2(r_1) \right\} \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 + \\
&+ \int \phi_1(r_1) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 \left\{ \int \phi_2(r_2) V_2(r_2) \phi_1(r_2) d\vec{r}_2 + \right. \\
&+ \left. \epsilon \int \phi_1(r_2) \phi_2(r_2) \right\} d\vec{r}_2 + \\
&+ \iint \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_1(r_2) \phi_2(r_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 2St + 2\epsilon S^2 + I \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

APÊNDICE BINTERPRETAÇÃO DA APROXIMAÇÃO DE BOGOLYUBOV E TYABLIKOVAPLICADA AO SISTEMA SEMI-INFINITO

Expressamos os operadores  $S_{\ell}^{+}$  e  $S_{m}^{-}$  em termos das componentes de Fourier:

$$S_{\vec{\ell}}^{+}(t) = \frac{1}{N_S} \sum_{\vec{k}_n} S_{\ell}^{+}(t, \vec{k}_n) e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n} \quad (\text{B.1})$$

$$S_{\vec{m}}^{-}(t) = \frac{1}{N_S} \sum_{\vec{k}'_n} S_{m}^{-}(t, \vec{k}'_n) e^{i\vec{k}'_n \cdot \vec{m}_n} \quad (\text{B.2})$$

O Hamiltoniano de Heisenberg, em termos de  $S^{+}(t, \vec{k}_n)$  e  $S^{-}(t, \vec{k}_n)$  é:

$$H = - \sum_{i \neq j} \sum_{\vec{q}_n} I_{ij}(\vec{q}_n) \left\{ \frac{1}{2} \left[ S_i^{+}(\vec{q}_n) S_j^{-}(-\vec{q}_n) + S_i^{-}(-\vec{q}_n) S_j^{+}(\vec{q}_n) \right] + S_i^Z(-\vec{q}_n) S_j^Z(\vec{q}_n) \right\} \quad (\text{B.3})$$

Substituindo nas equações de movimento para a função de Green (Eq. 3.9),  $S_{\vec{\ell}}^{+}(t)$ ,  $S_{\vec{m}}^{-}(t)$  e  $H$  dados pelas Eqs. (B.1), (B.2) e (B.3), respectivamente, obtemos:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle S_{\vec{\ell}}^{+}(\vec{k}_n, t); S_{\vec{m}}^{-}(-\vec{k}_n, t_0) \rangle\rangle =$$

$$\delta(t-t_0) \langle [ S_{\vec{\ell}}^{+}(t, \vec{k}_n), S_{\vec{m}}^{-}(t_0, -\vec{k}_n) ] \rangle +$$

$$+ \sum_{\vec{q}_n, ij} I_{ij}(\vec{q}_n) \langle\langle [ S_{\vec{\ell}}^{+}(\vec{k}_n, t), S_j^{-}(-\vec{q}_n, t) ] S_i^{+}(\vec{q}_n, t); S_{\vec{m}}^{-}(-\vec{k}_n, t_0) \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_{\vec{q}_n, ij} I_{ij}(\vec{q}_n) \ll \left[ S_\ell^+(\vec{k}_n, t), S_i^Z(-\vec{q}_n) S_j^Z(\vec{q}_n) \right] ; S_m^-(\vec{k}_n, t_0) \gg \quad (\text{B.4})$$

Calculamos os comutadores que aparecem no 2º membro da Eq. (B.4):

$$\begin{aligned} \left[ S_\ell^+(\vec{k}_n, t), S_i^-(\vec{q}_n, t) \right] &= \sum_{\vec{\ell}_n, \vec{i}_n} \left[ S_{\vec{\ell}_n, \ell}^+, S_{\vec{i}_n, i}^- \right] e^{-i(\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n - \vec{q}_n \cdot \vec{i}_n)} = \\ &= 2 \sum_{\vec{\ell}_n, \vec{i}_n} S_{\vec{\ell}_n, \ell}^Z \delta_{\vec{\ell}_n, \vec{i}_n} \delta_{\ell i} e^{-i(\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n - \vec{q}_n \cdot \vec{i}_n)} = \\ &= 2 \delta_{\ell i} \sum_{\vec{i}_n} S_{i, \vec{i}_n}^Z e^{-i(\vec{k}_n - \vec{q}_n) \cdot \vec{i}_n} = 2 \delta_{\ell i} S_i^Z(\vec{k}_n - \vec{q}_n) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

e

$$\begin{aligned} \left[ S_\ell^+(\vec{k}_n), S_i^Z(-\vec{q}_n) \right] &= - \sum_{\vec{\ell}_n, \vec{i}_n} S_{\vec{i}_n, i}^+ \delta_{\vec{\ell}_n, \vec{i}_n} \delta_{\ell i} e^{-i(\vec{k}_n \cdot \vec{\ell}_n - \vec{q}_n \cdot \vec{i}_n)} = \\ &= - \delta_{\ell i} \sum_{\vec{i}_n} S_{i, \vec{i}_n}^+ e^{-i(\vec{k}_n - \vec{q}_n) \cdot \vec{i}_n} = - \delta_{\ell i} S_i^+(\vec{k}_n - \vec{q}_n) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

usando as relações de comutação (Eq. (3.12)).

Escrevemos os somatórios do segundo membro da Eq. (B.3) dividindo-os em duas partes: um termo com  $\vec{q}_n = \vec{k}_n$  e o resto da soma com  $\vec{q}_n \neq \vec{k}_n$ :

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{q}_n} \ll S_\ell^Z(\vec{k}_n - \vec{q}_n) S_i^+(\vec{q}_n) ; S_m^-(\vec{k}_n) \gg &= \ll S_\ell^Z(0) S_i^+(\vec{k}_n) ; S_m^-(\vec{k}_n) \gg + \\ + \sum_{\vec{q}_n \neq \vec{k}_n} \ll S_\ell^Z(\vec{k}_n - \vec{q}_n) S_i^+(\vec{q}_n) ; S_m^-(\vec{k}_n) \gg \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$S_{\ell}^Z(0) \equiv \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{\ell}''} S_{\vec{\ell}'', \ell}^Z \quad (\text{B.8})$$

é o operador do spin total no plano  $\ell$ . A aproximação que faremos consiste em substituir este operador pela média térmica:

$$S_{\ell}^Z(0) \equiv \langle S_{\ell}^Z \rangle \quad (\text{B.9})$$

A componente z do spin total do cristal  $\sum_{\vec{\ell}'', \ell} S_{\vec{\ell}'', \ell}^Z \equiv S_{\text{tot}}^Z$  se conserva identicamente, e então  $\langle S_{\text{tot}}^Z \rangle \equiv S_{\text{tot}}^Z$ . Porém, isto não acontece com o spin total por plano da Eq. (B.8) e a Eq. (B.9) é aproximada.

Além dessa aproximação desprezamos o resto do somatório na Eq. (B.7), o que equivale a supor que a soma de produtos de componentes de Fourier com vetores de onda diferentes se cancela, devido às diferenças de fase dos diversos termos, que se consideram incoerentes. É por esta razão que a aproximação recebe o nome de "fases aleatórias", ou RPA.

Aplicando esta aproximação a todos os termos da Eq. (B.4), e transformando Fourier em relação ao tempo, se chega à equação

$$\begin{aligned} \sum_j \{ (\omega - 2 \sum_i I_{ij} \langle S_i^Z \rangle) \delta_{\ell j} + 2 \sum_i I_i(\vec{k}'') \langle S_{\ell}^Z \rangle \delta_{ij} \} G_{jm} &= \\ = \frac{1}{\pi} \langle S_{\ell}^Z \rangle \delta_{\ell m} & \quad (\text{B.10}) \end{aligned}$$

que é idêntica à Eq. (3.17).

REFERÊNCIAS

- (1) D.L. Mills e A.A. Maradudin. Some Thermodynamic Properties of a Semi-Infinite Heisenberg Ferromagnet. J. Phys. Chem. Solids 28 (1967) 1855.
- (2) R.E. De Wames e T. Wolfram. Theory of Spin Waves in the Heisenberg Ferromagnet. Phys. Rev. 185 (1969) 720.
- (3) T. Takeda e H. Fukuyama. Surface Magnetism of f.c.c. Heisenberg Ferromagnets. I. Temperature and Spatial Dependences of Magnetization. J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) 925.
- (4) S. Harriague e N. Majlis. Magnons Localized on Stacking Faults in Heisenberg Ferromagnets. Int. J. of Mag. 6 (1974) 269.
- (5) D.T. Pierce e F. Meier. Photoemission of Spin-Polarized Electrons from Ga As. Phys. Rev. B 13 (1976) 5484.
- (6) D.L. Mills. On the Magnetic Scattering of Low Energy Electrons from the Surface of a Ferromagnetic Crystal. J. Phys. Chem. Solids 28 (1967) 2245.
- (7) S. Selzer e N. Majlis. Self-Consistent Calculation of the Surface Magnetization Profile and the Localized Magnons in a Heisenberg Ferromagnet. J. Mag. and Mag. Mat. 15-18 (1980) 1095.

- (8) E.R. Jones, J.T. McKinney e M.B. Webb. Low Energy Electron Debye-Waller Factor. *Phys. Rev.* 151 (1966) 479.
- (9) H.A. Kramers. L'interaction entre les Atomes Magnéto-gènes dans un Cristal Paramagnétique. *Physica* 1 (1934) 182.
- (10) P.W. Anderson. Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction. *Phys. Rev.* 79 (1950) 350.
- (11) J.B. Goodenough. Magnetism and the Chemical Bond. John Wiley and Sons (1963), Cap. 3, p. 166.
- (12) G.G. Shull e J.S. Smart. Detection of Antiferromagnetism by Neutron Diffraction. *Phys. Rev.* 76 (1949) 1256.
- (13) E.F. Sarmiento, R.A. Tahir-Kheli, I.P. Fittipaldi e T. Kaneyoshi. Propriedades Termodinâmicas de um Ferromagneto de Ising em um Meio Semi-Infinito. Anais do 1º Colóquio Latino-Americano de Superfícies. Editor: Centro Latino-Americano de Física, RJ, Brasil. A ser publicado.
- (14) R.M. White. Quantum Theory of Magnetism. Mc-Graw Hill-New York, 1970), Cap. 2, p. 51.
- (15) P. Wachter. The Optical, Electrical and Magnetic Properties of the Europium Chalcogenides and the Rare Earth Pnictides. CRC Critical Reviews in

Solid State Sciences (1972)209.

- (16) D.N. Zubarev. Double-Time Green Functions in Statistical Physics. Soviet Physics Uspekhi 3 (1960) 320.
- (17) R.A. Tahir-Kheli e D. Ter Haar. Use of Green Functions in the Theory of Ferromagnetism. I. General Discussion of the Spin-S Case. Phys. Rev. 127 (1962) 88.
- (18) A.C. Hewson e D. Ter-Haar. The Green Function Method in the Theory of Antiferromagnetism. Physica 30 (1964) 890.
- (19) H.S. Wall. Analytic Theory of Continued Fractions. D. Van Nostrand (1948) Cap. 1, p. 13.
- (20) C.M.G.F. Chaves. Cálculo de Estados Superficiais em Semicondutores. Tese de Doutorado. PUC, RJ, 1973.
- (21) A. Baldereschi. Mean-Value Point in the Brillouin Zone. Phys. Rev. B 7 (1973) 5212.
- (22) D.J. Chadi and M. L. Cohen. Special Points in the Brillouin Zone. Phys. Rev. B 8 (1973) 5747.
- (23) S.L. Cunningham. Special Points in the Two Dimensional Brillouin Zone. Phys. Rev. B 10 (1974) 4988.
- (24) L. Flax and J.C. Raich. Calculation of the Generalized Watson Sums with an Application to the Generalized Heisenberg Ferromagnet. Phys. Rev. 185 (1969) 797.



- (25) M.E. Lines. Magnetism in Two Dimensions. J. App. Phys. 40 (1969) 1352.
- (26) G.P. Felcher, S.D. Bader, R.J. Celotta, D.T. Pierce e G.C. Wang. Magnetic State at the Surface of a Ferromagnet by Polarized Electron Diffraction. Ordering in two Dimensions. Elsevier North Holland, Inc., Sinha ed. (1980), 107.
- (27) S. Harriague, N. Majlis, S.A. Makler e A.M. Olmedo. Inelastic Scattering of Slow Electrons from a Heisenberg Ferromagnet. Phys. Stat. Sol. 66 (1974) 377.
- (28) P.G. de Gennes e J. Friedel. Anomalies de Résistivité dans Certains Métaux Magnétiques. J. Phys. Chem. Solids 4 (1958) 71.
- (29) T. Wolfram, R.E. De Wames, W.F. Hall e P.W. Palmberg. Surface Magnetization near the Critical Temperature Dependence of Magnetic-Electron Scattering from NiO. Surf. Sci. 28 (1971) 45.
- (30) X.I. Saldaña e J.S. Helman. Elastic and Magnon Inelastic Differential Cross-Section of Spin-Polarized Low Energy Electrons in Magnetic Nickel and Iron. Phys. Rev. B 16 (1977) 4978.
- (31) F. Keffer. Spin Waves. Handbuch der Physik. S. Flügge. Vol. XVIII (1966), Cap. 1, p. 4 e Cap. 2, p. 33 e 36.
- (32) Diep-The-Hung, J.C.S. Levy e O. Nagai. Effects of


Surface Spin Waves and Surface Anisotropy in  
Magnetic Thin Films at Finite Temperatures.


Phys. Stat. Sol. (b) 93, (1979) 351.

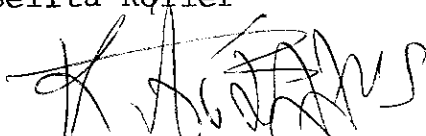
(33) K. Binder e P.C. Hohenberg. Surface Effects on Magnetic Phase Transitions. Phys. Rev. B 9 (1974) 2194.

(34) M.G. Cottam. The Spin Correlation Functions of a semi-infinite Heisenberg ferromagnet. J. Phys. C: Solid State Physics 9 (1976) 2121.

Tese apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:

  
\_\_\_\_\_  
Norberto Majlis - Presidente

  
\_\_\_\_\_  
Belita Koiler

  
\_\_\_\_\_  
Constantino Tsallis

Ximenes, Alexandrino de L<sup>ta</sup>  
\_\_\_\_\_  
Ximenes Alexandrino da Silva

  
\_\_\_\_\_  
Alberto Passos Guimarães Filho

Rio de Janeiro, 11 de setembro de 1981