

UNIVERSIDADE DO BRASIL
CURSOS DE PÓS-GRADUAÇÃO
CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

"CONTRIBUIÇÃO À TEORIA DO
ANTIFERROMAGNETISMO"

ERNESTO LÓPEZ CARRANZA

Tese apresentada à banca examinadora do C. B. P. F.,
para a obtenção do
GRÁU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (FÍSICA)

Orientador: Prof. A. M. de GRAAF

UNIVERSIDADE DO BRASIL

CURSOS DE PÓS - GRADUAÇÃO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

"CONTRIBUIÇÃO À TEORIA DO
ANTIFERROMAGNETISMO"

ERNESTO LÓPEZ CARRANZA

Tese apresentada à banca examinadora do
C. B. P. F., para a obtenção do GRÁU DE
MESTRE EM CIÊNCIAS (FÍSICA)

Orientador: Prof. A. H. de GRAAF

CONTRIBUIÇÃO À TEORIA DO ANTIFERRO-MAGNETISMO

TESE DE MESTRADO

defendida por

ERNESTO LOPEZ CARRANZA

no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: A. M. de Graaf

em 25 de Agosto de 1965

perante a banca integrada pelos senhores professores:

A. M. de Graaf

John Sullivan

Richard Prange

Michel L. Savelli

"CONTRIBUIÇÃO À TEORIA DO ANTIFERROMAGNETISMO"

RESUMO

Overhauser considerou o problema das ondas estáticas de densidade de spin (ODS) em um gás de elétrons em interação. No presente trabalho aplica-se essa teoria à banda d dos isolantes antiferromagnéticos. Reformulamos a teoria de Overhauser utilizando as equações de movimento ψ , introduzindo a representação de Wannier, definimos três parâmetros: a energia de correlação U entre dois elétrons no mesmo íon; a integral b de transferência de elétrons entre íons vizinhos, e Δ , a zona proibida no espectro das excitações. Quando Δ é muito maior que a largura da banda d , obtém-se uma descrição dos isolantes antiferromagnéticos convencionais, como NiO, bem como dos óxidos de Vanádio e Titânio que sofrem uma transição térmica de um estado antiferromagnético, isolante, a um estado metálico, não-magnético. Dedicamos especial atenção à análise dessa transição. O cálculo da densidade de corrente e da constante dielétrica real, usando a teoria de perturbação de segunda ordem, mostra que o estado ODS abaixo de uma temperatura crítica T_c representa um isolante. Acima de T_c , o estado é metálico, caso Δ seja da ordem de U ; será isolante, se Δ for menor que U . Calculamos, além disso, a temperatura crítica, o calor específico, a suscetibilidade de spin e a condutividade elétrica. Para valores razoáveis dos parâmetros, obtém-se concordância satisfatória com os dados experimentais existentes para o sesquióxido de Titânio.

1. INTRODUÇÃO

O PROBLEMA da origem do intercâmbio em materiais magnéticos tem sido muito investigado desde a introdução da Hamiltoniana de spin de Heisenberg-Dirac ^(1,2) na teoria do magnetismo em geral, e da ideia de supercâmbio ⁽³⁾ na teoria dos isolantes antiferromagnéticos, em particular. É costume distinguir entre substâncias magnéticas metálicas e isolantes, estas sendo consideradas mais acessíveis à teoria. Além disso, supõe-se, usualmente, que as propriedades magnéticas dos metais e isolantes devem ser descritas por mecanismos inteiramente diversos.

Uma contribuição importante à teoria do supercâmbio em isolantes foi dada recentemente por Anderson, ⁽⁴⁾ ao introduzir o intercâmbio cinético, um mecanismo completamente diferente do supercâmbio original de Kramers. Este tipo de intercâmbio ocorre em sais de metais de transição, nos quais os íons magnéticos estão separados por grupos diamagnéticos. Segundo Anderson, devemos primeiro resolver, pelo menos em princípio, o problema complexo do movimento de um único elétron d na rede diamagnética, eliminando desse modo a interação com os grupos diamagnéticos. O problema da interação entre esses elétrons d renormalizados torna-se então relativamente fácil. Usando a representação de Wannier e a teoria de perturbação de segunda ordem, Anderson mostrou que a ocupação virtual dos estados ionizados representa a contribuição mais importante à interação dependente do spin, entre os elétrons d pertencentes a íons vizinhos. Os dois parâmetros necessários à teoria são a integral b de transferência e a

(3)

repulsão Coulombiana U entre dois elétrons d , no mesmo íon. A interação é antiferromagnética pois a transferência de elétrons d ocorre apenas entre vizinhos com spins antiparalelos. Além disso torna-se impossível a ocupação permanente dos estados ionizados pois U é usualmente muito maior que b . Desses modo esses sais de metais de transição são, em geral, isolantes. Este fato é verificado experimentalmente. Para uma exposição mais completa dessa teoria indicamos o artigo de Anderson, ⁽⁴⁾ onde também se pode encontrar uma discussão da antiga e controversa literatura existente sobre o assunto.

Alguns sais de metais de transição são altamente interessantes, do ponto de vista teórico, por que sofrem uma transição térmica entre um estado isolante antiferromagnético, à baixa temperatura ⁽⁵⁾ e um estado metálico não-magnético. Queremos nos referir aos óxidos de Vanádio e Titânio. Se a integral b de transferência se torna comparável à energia de correlação U , os elétrons d caminham livremente por todo o cristal. Assim, pelo menos qualitativamente, esses óxidos podem ser descritos pela teoria de Anderson. Esse modo de encarar o problema é semelhante às considerações qualitativas feitas por Mott sobre o estado magnético isolante dos óxidos de metais de transição. ⁽⁶⁾ Recentemente as idéias de Mott foram formuladas de um modo mais exato por Kohn. ⁽⁷⁾

Uma teoria quantitativa e completa do antiferromagnetismo deveria, na nossa opinião, descrever simultaneamente:

(i) O antiferromagnetismo em metais (como o Cr).

(ii) A transição térmica entre um estado isolante antiferromagnético-

tico o um estado metálico não-magnético (óxidos de V e Ti)

(iii) O antiferromagnetismo dos óxidos isolantes de metais de transição, que permanecem isolantes acima da temperatura de Néel (como o NiO).

Neste trabalho tentaremos concretizar este objetivo. Para isso usamos as idéias recentemente formuladas por Overhauser.⁽⁸⁾ Começaremos com uma banda de Bloch de elétrons $\tilde{\epsilon}$ em interação cuja degenerescência desprezamos, por simplicidade. Overhauser previu que em um gás de elétrons em interação, uma onda estática de densidade de spin (ODS) é mais estável que o estado paramagnético não polarizado. A essa onda de densidade de spin corresponde um desdobramento da banda de excitações em duas bandas, separadas por uma zona proibida 2Δ ("gap"). Precisamos introduzir agora a transformação de Wannier conservando apenas a correlação U entre elétrons no mesmo íon e a integral de transferência b entre vizinhos mais próximos. Os parâmetros da nossa teoria são agora U , b e Δ .

O próprio Overhauser aplicou sua teoria ao Cromo metálico. Nós mostraremos que variando as grandezas relativas dos três parâmetros, U , b e Δ , podemos descrever também os casos (ii) e (iii). Em particular mostramos que se Δ for grande comparado com a largura da banda o estado de Overhauser representa, na verdade, um estado isolante capaz de sofrer uma transição térmica a um estado metálico não-magnético.

No capítulo segundo reformulemos a teoria de Overhauser, usando as equações de movimento e a notação de segunda quantização. Mostre-

(5)

nos que no estado de Overhauser tanto as quantidades $n_{k\sigma} = c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$ e $l - n_{k\sigma} = c_{k\sigma} c_{k\sigma}^+$ quanto a quantidade $c_{k+Q}^+ c_{k\uparrow}$ possuem valores médios finitos que são essencialmente números-c. Aqui $c_{k\sigma}^+$ é o operador de criação para elétrons de momentum \underline{k} e spin σ e Q é o número de onda da ODS. Dêsse modo o estado de Overhauser corresponde a um emparelhamento de elétrons e buracos com spins opostos, com uma diferença fixa de momentos, igual a Q .

Na aproximação de Hartree-Fock, o estado ODS é mais estável que o estado não polarizado porque a atração coulombiana entre elétrons e buracos pode ser maior que as interações regulares existentes entre os elétrons e entre os buracos.

Continuando, estabeleceremos uma Hamiltoniana reduzida, que resulta semelhante à Hamiltoniana reduzida de Bardeen-Cooper-Schrieffer, ⁽⁹⁾ já bem conhecida. A partir dêsse ponto todos os métodos usados na teoria da supercondutividade podem ser aplicados para diagonalizar esta Hamiltoniana reduzida. Entretanto, não discutiremos êsses métodos em detalhe.

No capítulo terceiro discutimos as propriedades térmicas e a seguir, no capítulo quarto, as propriedades eletromagnéticas. Finalmente no capítulo quinto faz-se uma breve comparação com alguns dados experimentais.

2. ESTADO FUNDAMENTAL ODS

Começaremos com a Hamiltoniana de um sistema de elétrons de Bloch em interação, da forma

(6)

$$\mathcal{H}^0 = \sum_{\mathbf{k} \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \sum_{\sigma \sigma'} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ c_{\mathbf{k}_2 \sigma'}^+ c_{\mathbf{k}_3 \sigma} c_{\mathbf{k}_4 \sigma'} \quad (1)$$

onde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ é a energia de Bloch e $\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle$ são os elementos da matriz do potencial inter-eletrônico. $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente, para elétrons em estados do Bloch $|\mathbf{k}\sigma\rangle$. Desprezaremos a interação entre bandas de Bloch diferentes.

Consideremos, agora, as equações de movimento dos operadores $c_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ e $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}$, em seguida, procuraremos torná-los lineares, definindo os números- α :

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow} = \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (2)$$

onde $\tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q = \langle \mathbf{k}+\mathbf{Q} \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \mathbf{k}'+\mathbf{Q} \rangle$. O resultado é

$$[\mathcal{H}^0, c_{\mathbf{k}\uparrow}^+] = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ = \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^+ \quad (3a)$$

e

$$[\mathcal{H}^0, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^+] = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^+ = \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \quad (3b)$$

As energias de Bloch renormalizadas $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ e $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ são

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}} \quad (4a)$$

e

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q n_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow} \quad (4b)$$

com $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \mathbf{k}' \rangle$ e $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q = \langle \mathbf{k}+\mathbf{Q} \mathbf{k}'+\mathbf{Q} | V | \mathbf{k} \mathbf{k}'+\mathbf{Q} \rangle$ e

(7)

onde $n_{k\uparrow}$ e $n_{k+Q\downarrow}$ são os valores médios dos operadores $c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow}$ e $c_{k+Q\downarrow}^+ c_{k+Q\downarrow}$ no estado fundamental. As energias ω_k das excitações elementares são determinadas a partir da equação secular -

$$\begin{vmatrix} \tilde{\epsilon}_k - \omega_k & \Delta_k \\ \Delta_k & \tilde{\epsilon}_{k+Q} - \omega_k \end{vmatrix} = 0$$

que nos dá

$$\omega_k^\pm = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_{k+Q}) \pm \left[\frac{1}{4} (\tilde{\epsilon}_{k+Q} - \tilde{\epsilon}_k)^2 + \Delta_k^2 \right]^{1/2} \quad (5)$$

Assim a banda das excitações se dobra em duas bandas, separadas por uma zona proibida $2\Delta_k$.

Os operadores de quasi-partículas correspondentes, A_k e B_k , podem ser então determinados, de modo que satisfaçam às equações lineares (3a,b), isto é

$$A_k = v_k c_{k\uparrow}^+ + u_k c_{k+Q\downarrow}^+ \quad (6a)$$

e

$$B_k = -u_k c_{k\uparrow} + v_k c_{k+Q\downarrow} \quad (6b)$$

onde u_k e v_k são reais. Esses operadores de quasi-partículas satisfazem às regras de comutação de férmions se $u_k^2 + v_k^2 = 1$, como é fácil verificar. Representando u_k e v_k por $\cos \theta_k$ e $\sin \theta_k$ respectivamente, obtém-se, substituindo (6) em (3) :

$$\tan 2\theta_k = 2\Delta_k / (\tilde{\epsilon}_{k+Q} - \tilde{\epsilon}_k) \quad (7)$$

(8)

A função de onda do estado fundamental $|\phi_0\rangle$, isto é, o vácuo das quasi-partículas, se define por:

$$A_{\mathbf{k}}|\phi_0\rangle = B_{\mathbf{k}}|\phi_0\rangle = 0 \quad *$$

que nos leva à função de prova

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}|\phi_{\text{vac}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger})|\phi_{\text{vac}}\rangle \quad (8)$$

Aqui \mathbf{k} assume todos os valores possíveis na primeira zona de Brillouin. Calculando o valor médio do operador $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ nêsse estado e substituindo o resultado em (2), encontramos uma equação para a zona proibida no espectro das excitações:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \text{sen } \theta_{\mathbf{k}'} \text{cos } \theta_{\mathbf{k}'} \quad (9)$$

Nesta equação $\tilde{E}_{\mathbf{k}}$ e $\tilde{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$, que entram implicitamente através de $\theta_{\mathbf{k}}$, são dados por

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{cos}^2 \theta_{\mathbf{k}'} \quad (10a)$$

e

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}'} \quad (10b)$$

A fim de calcular a energia do estado fundamental, introduziremos a Hamiltoniana reduzida

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{red}} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (11) \end{aligned}$$

(9)

Como é fácil verificar, \mathcal{H}_{rod} nos conduz às mesmas equações de movimento que (3a,b). A energia do estado fundamental é definida agora por $\langle \phi_0 | \mathcal{H}_{\text{rod}} | \phi_0 \rangle$. Obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = & \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} (k + Q) v_{\mathbf{k}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^2 v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{v}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^2 v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (12)$$

Minimizando \mathcal{E} com respeito a $\theta_{\mathbf{k}}$ e usando a equação (7) obtém-se novamente a equação para o "gap". Dessa modo (9) representa, de fato, a condição para que o estado $|\phi_0\rangle$ seja estacionário.

Até agora não fizemos, realmente, nada de novo. As fórmulas (5), (7), (9), (10a,b) e (12) foram estabelecidas já por Overhauser,⁽⁸⁾ que considerou elétrons em movimento em um potencial periódico, independente do spin, com um período igual a $\frac{Q}{k}$. Determinando em seguida este potencial, auto-consistentemente. Nesse procedimento demonstra claramente que uma onda de densidade de spin, auto-consistente, corresponde a um acoplamento de elétrons e buracos com spins opostos e com diferenças fixas em seus momentos. Overhauser também mostrou que o estado ODS é mais estável que o estado normal não-polarizado de Hartree-Fock, comparando a energia \mathcal{E} do estado fundamental com a energia do estado normal.

Deve-se notar que o formalismo aqui utilizado é muito semelhante ao da teoria da supercondutividade.^(9,10) Naquanta na teoria de BCS-Bogoliubov o produto $\alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^+$ tem valor finito, que é um número-c,

(10)

aqui o producto $c_{k+Q}^{\dagger} c_{k\uparrow}$ é que é considerado um número-c.

É óbvio que a Hamiltoniana reduzida (11) nos permite aplicar o método "spin-analog" de Anderson. Não vamos, entretanto, desenvolvê-lo, pois isso somente nos conduziria a resultados já obtidos. No próximo capítulo vamos estudar as propriedades térmicas, discutindo os estados excitados e determinando a energia livre.

3. ESTADOS EXCITADOS

Primeiramente, é conveniente distinguir entre excitações de uma partícula e excitações de pares. Para tornar clara esta distinção, escreveremos a função de onda do estado fundamental $|\phi_0\rangle$ como

$$|\phi_0\rangle = \prod_k A_k |\phi_{vac}\rangle = \prod_k (v_k + u_k c_{k+Q}^{\dagger}) c_{k\uparrow}^{\dagger} |\phi_{vac}\rangle, \quad (13)$$

onde os pares $(k\uparrow, k+Q\downarrow)$ elétron-buraco não agora apresentados explicitamente. Consideremos então o produto $B_{KK}^{\dagger} |\phi_0\rangle$, o qual se torna, por extensão, em

$$(-u_k + v_k c_{k+Q}^{\dagger}) c_{k\uparrow}^{\dagger} \prod_k A_k |\phi_{vac}\rangle \quad (14)$$

Aqui separamos o termo em K , do produto \prod_k . A função $B_{KK}^{\dagger} |\phi_0\rangle$ é um estado excitado, ortogonal ao estado fundamental, com um par real excitado e um par virtual ausente de $|\phi_0\rangle$. A energia necessária à excitação de um par pode agora ser facilmente calculada à partir do \mathcal{H} red e sendo dado por $2 \left[(1/4)(\tilde{\epsilon}_{k+Q} - \tilde{\epsilon}_k)^2 + \Delta_k^2 \right]^{1/2}$. A menor

(11)

energia de excitação do paros δ , conseqüentemente, $2\Delta_k$. Analogamente, um estado $B_{K'}^+ A_{K'}^+ |\phi_0\rangle$, com $K \neq K'$, corresponde à uma excitação de uma só partícula, com energia de excitação $\omega_{K'}^+ = \omega_{K'}^-$. Portanto uma função de onda de um estado excitado típico poderia ser escrita como

$$|\phi_{\text{exc}}\rangle = \prod_{K''} B_{K''}^+ \prod_{K'''} A_{K'''}^+ |\phi_0\rangle \quad (15)$$

Energia livre

Devemos agora definir as funções de distribuição

$$x_k^- = \langle A_k A_k^+ \rangle \quad \text{and} \quad x_k^+ = \langle B_k B_k^+ \rangle$$

em termos das quais a energia total E ficará

$$\begin{aligned} E = \langle \psi_0 | \text{red} \rangle &= \sum_K \epsilon_K (u_{K,K}^2 x_K^+ + v_{K,K}^2 x_K^-) + \sum_{K'} \epsilon_{K'+Q} (v_{K',K'}^2 x_{K'}^+ + u_{K',K'}^2 x_{K'}^-) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{K,K'} \tilde{v}_{K,K'} (u_{K,K'}^2 x_{K'}^+ + v_{K,K'}^2 x_K^-) (u_{K',K'}^2 x_{K'}^+ + v_{K',K'}^2 x_{K'}^-) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{K,K'} \tilde{v}_{K,K'}^Q (v_{K,K'}^2 x_K^+ + u_{K,K'}^2 x_K^-) (v_{K',K'}^2 x_{K'}^+ + u_{K',K'}^2 x_{K'}^-) \\ &+ \sum_{K,K'} \tilde{v}_{K,K'}^Q u_K v_{K'} (x_K^- - x_K^+) (x_{K'}^- - x_{K'}^+) u_{K'} v_{K'} \quad (16) \end{aligned}$$

Considerando que as excitações elementares são fórmulas independentes, se tem imediatamente para a entropia

(22)

$$E_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \pm} \left[\frac{z_{\mathbf{k}, \pm}^+}{z_{\mathbf{k}, \pm}^-} \ln \frac{z_{\mathbf{k}, \pm}^+}{z_{\mathbf{k}, \pm}^-} + (1 - \frac{z_{\mathbf{k}, \pm}^+}{z_{\mathbf{k}, \pm}^-}) \ln(1 - \frac{z_{\mathbf{k}, \pm}^+}{z_{\mathbf{k}, \pm}^-}) \right] \quad * \quad \pm = \pm, - \quad (17)$$

O "gap" termodinâmico

Definindo

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{(\mp)} = \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \sin \theta_{\mathbf{k}'}^{(\mp)} \cos \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{(\mp)} (z_{\mathbf{k}'}^{\mp} - z_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\mp}) \quad * \quad (18)$$

como o "gap" termodinâmico e em seguida minimizando a energia E com respeito a $\theta_{\mathbf{k}}^{(\mp)}$ obtém-se

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}}^{(\mp)} = 2\Delta_{\mathbf{k}}^{(\mp)} / \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(\mp)} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\mp)} \quad (19)$$

Aqui $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\mp)}$ e $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(\mp)}$ são dados por

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\mp)} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[z_{\mathbf{k}'}^{\mp} \cos^2 \theta_{\mathbf{k}'}^{(\mp)} + z_{\mathbf{k}'}^{\pm} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'}^{(\mp)} \right] \quad (20a)$$

e

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(\mp)} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \left[z_{\mathbf{k}'}^{\mp} \cos^2 \theta_{\mathbf{k}'}^{(\mp)} + z_{\mathbf{k}'}^{\pm} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'}^{(\mp)} \right] \quad (20b)$$

Além disto, minimizando a energia livre total com respeito a $z_{\mathbf{k}}^{\pm}$ e usando (18), (19) e (20) obtém-se corretamente para as funções de distribuição

$$z_{\mathbf{k}}^{\mp} = 1 / \exp[\beta \omega_{\mathbf{k}}^{\mp}(\mp)] + 1 \quad (21a)$$

e

$$z_{\mathbf{k}}^{\pm} = 1 / \exp[\beta \omega_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mp)] + 1 \quad (21b)$$

onde agora

$$\omega_k^{\pm(T)} = \frac{1}{2} [\tilde{\epsilon}_k^{(T)} + \tilde{\epsilon}_{k+Q}^{(T)}] \pm \left\{ \frac{1}{4} [\tilde{\epsilon}_{k+Q}^{(T)} - \tilde{\epsilon}_k^{(T)}]^2 + [\Delta_k^{(T)}]^2 \right\}^{1/2} \quad (22)$$

Eqs. (18), (19), (20), (21) e (22) determinam a equação autoconsistente para o "gap" termodinâmico. Fazendo, nestas equações, o "gap" igual a zero, obtém-se a equação para a temperatura crítica.

Calor específico

O calor específico deduz-se da entropia (17):

$$C_m = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta} = k_B \beta^2 \sum_k \left\{ f_k^+(1-f_k^+) [\omega_k^{(+)}]^2 + \frac{\beta}{(x_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}} \frac{d\Delta_k^2}{d\beta} \right\} + \frac{\beta}{2} \frac{\omega_k^{(-)}}{(x_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}} \frac{d\Delta_k^2}{d\beta} + f_k^-(1-f_k^-) [\omega_k^{(-)}]^2 - \frac{\beta}{2} \frac{\omega_k^{(-)}}{(x_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}} \frac{d\Delta_k^2}{d\beta} \quad (23)$$

onde $x_k \equiv x_k^{(T)} \equiv \frac{1}{2} [\tilde{\epsilon}_{k+Q}^{(T)} - \tilde{\epsilon}_k^{(T)}]$. O índice (T) foi omitido em Δ e ω_k^{\pm} para simplificar a notação. Vemos que o calor específico consta de contribuições dos dois tipos de quasi-partículas com os espectros $\omega_k^{+(T)}$ e $\omega_k^{-(T)}$, e da mudança com a temperatura da energia de "condensação".

Na temperatura de transição, onde o "gap" é zero, o salto no calor específico associado à transição de segunda ordem é dado por

$$(C_m - C_n)|_{T_c} = k_B \beta_c^3 \sum_k \left\{ \tilde{\epsilon}_{k+Q}^{(n)} [f_k^+(1-f_k^+)]_{T_c} - \tilde{\epsilon}_k^{(n)} [f_k^-(1-f_k^-)]_{T_c} \right\} \frac{1}{\tilde{\epsilon}_{k+Q}^{(n)} - \tilde{\epsilon}_k^{(n)}} \left(\frac{d\Delta_k^2}{d\beta} \right)_{T_c} \quad (24)$$

(14)

onde $C_n = 2k_B \beta \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{f_{\mathbf{k}}}{1 - f_{\mathbf{k}}} \right] \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(n)}}{n}$ é o calor específico do

estado normal. Em princípio todas estas fórmulas podem ser aplicadas nos metais (representação de Bloch) bem como nos isolantes (representação de Wannier).

Introduziremos agora a representação de Wannier, para descrever os sais e óxidos antiferromagnéticos.

Banda "d" estreita

Suponhamos que a largura da banda é pequena comparada com o "gap" $\Delta_{\mathbf{k}}$. Como consequência temos $|\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}| \ll \Delta_{\mathbf{k}}$. Além disto introduzimos a representação de Wannier e conservamos somente a interação entre eletrons no mesmo íon magnético. Essa interação será denotada por U e é dada por

$$U = \int |w(x)|^2 \frac{e^2}{|x - x'|} |w(x')|^2 dx dx' \quad (25)$$

onde $w(x)$ é a função de Wannier na posição x . Em consequência, o "gap" é independente do \mathbf{k} . Podemos então desenvolver em série de potências em termos de $|\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}|/\Delta$. Expandindo até segunda ordem em $|\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}|/\Delta$ encontramos a equação do "gap"

$$(2\Delta/U)^3 - (2\Delta/U)^2 = -2a(b/U)^2 \quad (26)$$

onde

$$ab^2 = (1/U) \sum_{\mathbf{k}} (1/4)(\epsilon_{\mathbf{k}+Q} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 \quad (27)$$

Aqui b é a integral de transferência de eletrons de um íon a outro.

(15)

Consideramos apenas a transferência a primeiros vizinhos, e desse modo obtém-se

$$b = \int w^*(x) \mathcal{H}_{\text{cin}} w(x-R) dx \quad , \quad (28)$$

onde R é a posição de um vizinho mais próximo e \mathcal{H}_{cin} é o operador da energia cinética. Nessas condições a é dado por

$$a = \sum_i \cos^2 \left(\frac{Q \cdot R_i}{2} \right) \quad , \quad (29)$$

onde a soma estende-se somente sobre os primeiros vizinhos. Para obter (26) tivemos que supor que $\tilde{\epsilon}_k$ é aproximadamente dada por ϵ_k . Até o fim deste trabalho faremos $\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k$.

Analogamente encontra-se a equação para a temperatura crítica T_c .

$$(4k_B T_c / U)^3 - (4k_B T_c / U)^2 = - (4/3)(g)(b/U)^2 \quad , \quad (30)$$

onde

$$gb^2 = (1/N) \sum_k (\epsilon_k^2 + \epsilon_{k+Q}^2 + \epsilon_k \epsilon_{k+Q}) \quad (31)$$

Na figura 1 representamos as equações (26) e (30).

Da figura 1 conclui-se, antes de mais nada, que não há solução para valores de b e U tais que $2a(b/U)^2 > 4/27$. Assim para esses valores não é possível estabilizar uma ODS, mesmo para $T = 0$. Para valores menores de $(b/U)^2$, contudo, há duas soluções com temperaturas de transição correspondentes. Se b/U é muito pequeno, $k_B T_c$ é aproximadamente dado por $b(g/12)^{1/2}$ e $U/4$. Afim de obter uma expressão aproximada de T_c para valores intermediários de $(b/U)^2$

no ramo inferior da figura 1, representaremos a equação (30) pela reta que passa pelos pontos $(0,0)$ e $(4/27, 2/3)$. Obtém-se para T_c

$$k_{B_c}^T \approx (3/2)g(b^2/U) \quad (32)$$

Deve-se notar que uma fórmula deste tipo foi anteriormente obtida por Anderson. (4)

Interpretaremos o ramo inferior da figura 1 como correspondente a uma transição antiferromagnética do tipo convencional, tal como ocorre em NiO. Durante a transição os eletrons permanecem localizados em seus respectivos ions. Isso é plausível pois a energia térmica por eletron é aproximadamente igual a $k_{B_c}^T \approx (3/2)g(b^2/U)$, ou seja é muito menor que a energia de correlação U . Por outro lado, o ramo superior deve corresponder a uma transição do tipo das que ocorrem nos óxidos de V e Ti. Acima da temperatura de transição do estado antiferromagnético ao estado não-polarizado, os eletrons podem passar de um ion a outro pois, a energia térmica por eletron é, agora, comparável à energia de correlação U . Entretanto a priori não é evidente que as duas soluções representam estados isolantes abaixo da temperatura de transição. Isto será provado no próximo capítulo, pelo cálculo direto da condutividade e da constante dielétrica real.

Antes de concluir esse capítulo, quereamos chamar a atenção para um ponto. Dado um certo valor de $(b/U)^2$, pode-se perguntar qual das duas soluções é a escolhida pelo sistema: a que corresponde ao ramo inferior ou a correspondente ao ramo superior. Pelo cálculo direto

(17)

da segunda derivada da energia livre para $T = 0$, com respeito a Δ , achamos que no ramo superior $\partial^2 F / \partial \Delta^2$ é positivo, enquanto que no ramo inferior é negativo. Isso prova que, pelo menos no nosso modelo, a solução superior é mais estável e a inferior, apenas estacionária. Esta situação se reflete também no fato de que, para o ramo inferior, o "gap" aumenta com a temperatura, enquanto que para o ramo superior decresce, à baixa temperatura, como $(U/2)[1 - 2 \exp(-\beta \Delta)]$ e a temperaturas próximas a T_c , como $2(3)^{1/2}(k_B T_c)(1 - T/T_c)^{1/2}$, como é fácil verificar a partir da equação (18). Dêsse modo também temos aqui o problema fundamental bem conhecido e, ainda, sem solução, do estado fundamental antiferromagnético. Foi sugerido que essas complicações poderiam ser evitadas, tomando-se em conta a anisotropia. Em uma investigação futura estudaremos o efeito da anisotropia em nosso modelo.

4. PROPRIEDADES ELETROMAGNÉTICAS

Condutividade elétrica

Vamos agora calcular a parte imaginária $\sigma''(\omega)$ da condutividade

$$\sigma(\omega) = \sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega)$$

a temperatura zero no estado ODS. Aqui ω é a frequência do campo elétrico aplicado. Na teoria de perturbação de segunda ordem $\omega\sigma''(\omega)$ é dado por (7)

$$\omega\sigma''(\omega) = -\frac{e^2}{m\Omega} \left[\sum_{\alpha} \frac{1}{m} |\langle \alpha | P | 0 \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_{\alpha} - E_0 - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{\alpha} - E_0 + \hbar\omega} \right) \right], \quad (33)$$

(18)

onde P é o momento total na direção do campo aplicado, $|0\rangle = |\phi_0\rangle$ e $|\alpha\rangle$ são estados excitados $|\phi_{\alpha zc}\rangle$. A única contribuição aos elementos da matriz vem de estados excitados do tipo $E_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}}^+ |\phi_0\rangle$ que correspondem a uma energia de excitação $E_{\alpha} = E_0 = \omega_{\mathbf{k}}^+ = \omega_{\mathbf{k}}^{\alpha}$. Pelo cálculo direto, encontra-se imediatamente que

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \sigma''(\omega) \approx - (\hbar c^2 / n \Omega) \left[1 - T/2\Delta + (3/4)(T/\Delta^3)(ab^2) \right] \quad (34)$$

onde

$$T = \frac{\hbar}{2n\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{k}}^2 |\nabla_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})|^2$$

com $\lambda_{\mathbf{k}}$ igual ao cosseno do ângulo entre o campo aplicado e $\nabla_{\mathbf{k}}$. Segundo Kohn, (7) o estado isolante é definido por $\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \sigma''(\omega) = 0$, o que nos leva a escrever (34) como

$$(2\Delta/T)^3 = (2\Delta/T)^2 + 6a(b/T)^2 \quad (35)$$

A quantidade T é aproximadamente a energia cinética necessária para se formar um estado ODS. Além disso, no equilíbrio, temos certamente $T < U$. Assim, vê-se que (35) é compatível com a condição de estabilidade (26).

Estas considerações constituem uma prova qualitativa de que o estado ODS representa um estado isolante, pelo menos sob as hipóteses restritivas que fizemos.

Constante dielétrica

Outro modo de provar que o estado ODS representa um estado isolante é o cálculo da constante dielétrica real $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ que, na teoria

(19)

de perturbação é dada por (11)

$$\frac{1}{\epsilon(\omega, q)} = 1 - \frac{4\pi e^2}{q} \sum_{\alpha} |\langle \alpha | \rho_{\alpha} | 0 \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_{\alpha} - E_0 - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{\alpha} - E_0 + \hbar\omega} \right) \quad (36)$$

Aqui os símbolos têm o mesmo significado que no caso da condutividade de q

$$\rho_q = \sum_{k, \sigma} c_{k+\frac{q}{2}, \sigma}^{\dagger} c_{k, \sigma} \int u_{k+\frac{q}{2}}^*(z) u_k(z) dz = \sum_{k, \sigma} c_{k+\frac{q}{2}, \sigma}^{\dagger} c_{k, \sigma} I(k, q) \quad (37)$$

onde $u_k(z)$ é a parte periódica das funções de Bloch. Usando as mesmas aproximações que conduziram à condutividade (34), encontra-se

$$1/\epsilon(0, q) = 1 - (\pi e^2/q^2 \Delta^3) \sum_k |I(k, q)|^2 (\epsilon_{k+\frac{q}{2}} - \epsilon_k)^2 \quad (38)$$

onde

$$\epsilon_k = (1/2)(\epsilon_{k+q} + \epsilon_k)$$

Este resultado mostra que $\epsilon(0, q)$ é finito e prova, de um modo muito mais rigoroso, que o estado ODS representa, com as nossas aproximações, um estado isolante. Deve-se notar que no cálculo de σ^H e $\epsilon(0, q)$ tem sido desprezados os processos Umklapp.

Suscetibilidade de spin

Consideraremos agora a magnetização do estado ODS em um campo magnético homogêneo H na direção q . Para isso escreveremos a expressão da energia livre na presença de um campo magnético fraco. Isso

(20)

pode ser feito facilmente. Todos os resultados dos capítulos 2 e 3 permanecem os mesmos, exceto $(1/2) [\bar{\epsilon}_{k+Q}^{(T)} - \bar{\epsilon}_k^{(T)}]$ que deve ser sempre substituído por $(1/2) [\bar{\epsilon}_{k+Q}^{(T)} - \bar{\epsilon}_k^{(T)}] + \mu H$. A magnetização M é definida por

$$M = \mu \sum_k (n_{k\uparrow} - n_{k+Q\downarrow}) \quad (39)$$

que se torna

$$M = \mu \sum_k \cos 2\theta_k^{(T)}(H) [\bar{x}_k^-(H) - \bar{x}_k^+(H)] \quad (40)$$

Próximo a $T = 0$, encontra-se para a susceptibilidade $\chi(T)$, após alguma álgebra

$$\chi(T) = M/H = (\mu^2 N / \Delta^2) [1 - 2 \exp(-\beta \Delta)] [1 - (3/2) \alpha(b/\Delta^2)^2] \quad (41)$$

Caso $\Delta(T)$ permaneça praticamente constante com a temperatura, digamos até $T = T_1$, (41) ainda representa uma boa aproximação para $\chi(T)$ até T_1 .

Para $T = T_0$, temos

$$\chi(T_0) = (\mu^2 N / 2k_B T_0) \left[1 - (1/8) k_B^2 T_0^2 / N \sum_k (\epsilon_k^2 + \epsilon_{k+Q}^2) \right] \quad (42)$$

Desprezando completamente as integrais de transferência, as equações (41) e (42) acarretam $\chi(0) = \chi(T_0)$. Caso as integrais de transferência não sejam nulas, $\chi(0)$ é menor ou maior que $\chi(T_0)$, conforme a forma particular de ϵ_k . Deve-se assinalar que as fórmulas (41) e (42) são válidas somente no ramo superior da figura 1. Resulta que tais expansões em ϵ/Δ não convergem rapidamente no ramo

inferior. Em consequência seria necessário resolver exatamente a equação do "gap".

5. COMPARAÇÃO COM OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Vamos agora aplicar, rapidamente, a teoria acima desenvolvida, ao caso do Ti_2O_3 , para o qual existem dados experimentais suficientes.

A susceptibilidade de spin do Ti_2O_3 ⁽¹²⁾ é aproximadamente constante para uma grande variação de temperatura e sobe, rapidamente, próximo à temperatura crítica. Supondo que, nesse caso, Δ ^(T) permanece aproximadamente constante até uma temperatura próxima a T_c e em seguida cai rapidamente a zero, vê-se que o comportamento da susceptibilidade está qualitativamente indicado por (41) e (42). A susceptibilidade subirá o cairá, próximo a T_c , em função da forma particular de ϵ_K , que não conhecemos no caso de Ti_2O_3 . De $T_c = 450^\circ K$ e $\Delta_0 \approx 2k_B T_c$, acha-se que $\Delta_0 \approx 0.08$ eV e $\chi(0) = (\mu^2/\Delta_0) N \approx 2.8 \times 10^{-6}$ cgs/gr. Além disso $U \approx 2\Delta_0 \approx 0.15$ eV. Estamos tãoitamente supondo que as integrais de transferência não mudam a ordem de grandeza desses valores. Experimentalmente $\chi(0) \approx 0.8 \times 10^{-6}$ cgs/gr.* A concordância é satisfatória, além disso também acreditamos que o valor de U seja razoável.

A condutividade elétrica σ varia exponencialmente, para temperaturas abaixo da temperatura crítica. Faremos a hipótese de que se po-

* $\chi(T)$ sobe abruptamente por debaixo dos $20^\circ K$, devido provavelmente as impurezas paramagnéticas da mostra. Obtem-se $\chi(0)$ por extrapolação da parte aproximadamente constante da curva experimental.

(22)

de descrever esse comportamento supondo que há dois tipos de elétrons, super-elétrons e elétrons normais portadores de corrente. O número de super-elétrons deveria variar, às baixas temperaturas, como $[1 - \exp(-\beta\Delta)]$. Portanto, propomos que σ' pode ser representado por

$$\sigma' = \sigma'_{\frac{n}{g}} \exp(-\beta\Delta) \quad (43)$$

A comparação com a curva experimental⁽¹³⁾ indica que $\Delta_c \approx 0,11$ eV. Considerando a natureza aproximada desse modelo, Δ_c concorda bastante bem com o "gap" obtido a partir da susceptibilidade. Próximo a T_c a susceptibilidade cai rapidamente. Esse fato dá um apoio adicional à nossa hipótese de que Δ varia muito pouco para uma grande variação de temperatura. Deve-se notar que há uma certa semelhança com o modelo dos "dois fluidos" da supercondutividade. Contudo não se deve emprestar muito significado a essa analogia.

Finalmente comparamos o salto no calor específico para $T = T_c$, dado por (24), com o valor experimental. Passando a uma banda estreita e supondo que as correções devidas às integrais de transformação podem ser desprezadas, (24) se torna:

$$(c_m - c_n)|_{T_c} = 3k_B N \quad (44)$$

que nos dá $0,04$ cal/ $^{\circ}$ K-gr, enquanto, experimentalmente,⁽¹³⁾ se encontra $0,016$ cal/ $^{\circ}$ K-gr. A concordância é boa.

6. CONCLUSÃO

O modelo que apresentamos nos capítulos precedentes representa uma tentativa de colocar o fenômeno do antiferromagnetismo em bases mais gerais. É aplicável a metais, como Cromo; a isolantes, como NiO e, em particular, às substâncias que sofrem uma transição de isolante a metal, como Ti_2O_3 . Propomos que as substâncias que sofrem uma transição magneto-metálica, sejam denominadas super-antiferromagnetos. No caso de isolantes antiferromagnetos e super-antiferromagnetos, o modelo começa com uma banda d , na qual os elétrons já estão hibridizados com os grupos diamagnéticos, que separam os íons magnéticos. Dê-se modo, subentendendo-se que a parte do problema referente ao campo cristalino, já foi resolvida. Assim podemos postular a existência de um estado ODS e determiná-lo auto-consistentemente, obtendo a equação do "gap". Os parâmetros da nossa teoria são a correlação U entre dois elétrons no mesmo íon magnético, a integral b de transferência eletrônica de um íon aos seus primeiros vizinhos e o "gap" Δ . A concordância com os dados experimentais é satisfatória.

O modelo é, naturalmente, muito aproximado, pois, desprezamos a interação entre bandas, os efeitos de anisotropia e a correlação entre elétrons em íons diferentes. Embora acreditemos que a influência desses efeitos não é grande, seria necessário prová-lo.

Finalmente queremos acentuar que os super-antiferromagnetos constituem o sistema ideal para o estudo das propriedades de um gás diluído de elétrons em interação. Seria portanto interessante procurar outros

superantiferromagnatos e obter mais dados experimentais.

AGRADECIMENTOS

Desejo expressar aqui meu sincero agradecimento ao Dr. A. M. do Graaf pela sugestão da presente tese e pela sua constante orientação e alento.

Agradeço também a meus colegas Roberto Luzzi por seus numerosos e úteis comentários, e Roberto H. Xavier pela ajuda na preparação do manuscrito.

Quero igualmente exprimir meu reconhecimento ao Centro Latinoamericano de Física pela bolsa que permitira a elaboração deste trabalho e ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas pela sua gentil acolhida.

REFERENCIAS

1. HEISENBERG W., Z. Phys. 38, 411 (1926).
2. VAN VLECK J. H., "Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities", Chapt. XII. Oxford Univ. Press, London and New York (1932).
3. KRAMPERS H. A., Physica 1, 182 (1934).
4. ANDERSON P. W., Phys. Rev. 115, 2 (1959); Solid State Physics, Vol. 14, P. 99. Academic Press, New York (1963).
5. ABRAHAIS S. C., Phys. Rev. 130, 2230 (1963).
6. MOTT N. F., Advances in Phys. 13, 325 (1964).
7. KOHN W., Phys. Rev. 133, A171 (1964).
8. OVERHAUSER A. W., Phys. Rev. 128, 1437 (1962).
9. BARDEEN J., COOPER L. N. e SCHRIEFFER J. R., Phys. Rev. 108,

1175 (1957).

10. BOGOLUBOV N. N., J. Exptl. Theoret. Phys., 34, 58 (1958); Sov. Phys. J.E.T.P., 34, 41 (1958).
11. NOZIÈRES P. e PINES D., Nuovo Cim., 2, 470 (1958).
12. GARR P. H. e FONER S., J. Appl. Phys., 31, 3448 (1960).
13. MORIN P. J., Phys. Rev. Letters 3, 34 (1959).

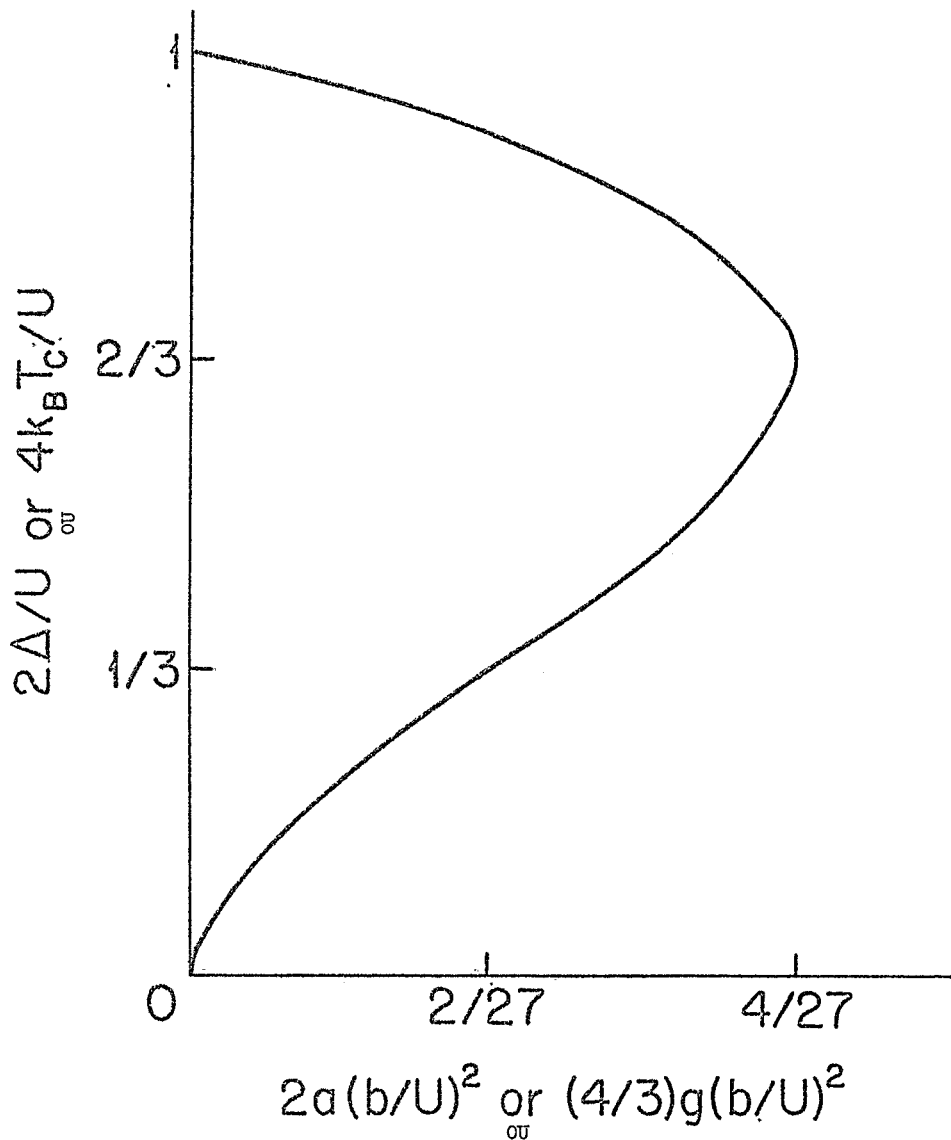


Fig. 1. Condição de estacionariedade para o estado antiferromagnético isolante com as temperaturas críticas correspondentes.