



PROBLEMAS DE TRANSPORTE
EM MATERIAIS MAGNÉTICOS

Luiz Carlos Soares do Nascimento

INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

CAMPINAS - SÃO PAULO
BRASIL



COORDENAÇÃO DOS CURSOS DE PÓS-GRADUAÇÃO

UNICAMP

AUTORIZAÇÃO PARA QUE A UNICAMP POSSA FORNECER, A PRE-
ÇO DE CUSTO, CÓPIAS DA TESE A INTERESSADOS

Nome do Aluno: LUIZ CARLOS SOARES DO NASCIMENTO

Nº de Identificação:

Endereço para Correspondência: AV. PRINCESA D'OESTE, 1847 apto. 92.

Curso: DOUTORAMENTO - FÍSICA

Nome do Orientador: GUILLERMO G. CABRERA OYARZUN

Título da Dissertação ou Tese: PROBLEMAS DE TRANSPORTE EM MATERIAIS
MAGNÉTICOS.

Data proposta para a Defesa:

(O Aluno deverá assinar um dos 3 itens abaixo)

1) Autorizo a Universidade Estadual de Campinas a partir des-
ta data, a fornecer, a preço de custo, cópias de minha Dissertação ou
Tese a interessados.

19/03/80

Data

Luiz Carlos S. do Nascimento

assinatura do aluno

2) Autorizo a Universidade Estadual de Campinas, a fornecer, a
partir de dois anos após esta data, a preço de custo, cópias de minha
Dissertação ou Tese a interessados.

1/1

Data

assinatura do aluno

3) Solicito que a Universidade Estadual de Campinas me consul-
te, dois anos após esta data, quanto à minha autorização para o forne-
cimento de cópias de minha Dissertação ou Tese, a preço de custo, a in-
teressados.

1/1

Data

assinatura do aluno

De acordo:

Para Emília, Bruno, Laura, e José, profundamente ligados a minha existência, e conseqüentemente a deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Guillermo G. Cabrera Oyarzun pela orientação deste trabalho, e pela excelente pessoa que é.

À CAPES, pelo suporte financeiro através do PICD.

Ao Departamento de Física da UFRN pela concessão do meu afastamento.

Aos colegas da UNICAMP, e em particular ao meu amigo Ray pela camaradagem desses anos.

Ao Nilson, César, e Ray, pela ajuda na montagem e correção da tese.

Ao Augusto e à Rosa pelo rápido e bem feito trabalho de datilografia.

Aos meus pais, que com amor e dedicação me encaminharam na vida.

À Emília e ao Bruno por manterem vivos em mim o gosto pela vida e o espírito de luta.

RESUMO

Estuda-se o problema da dependencia da resistividade com a temperatura em metais ferromagnéticos com estruturas de domínios tipo parede de Bloch de 180° , e da magnetoresistividade para estruturas helicoidais de spin.

O formalismo utilizado no cálculo da resistividade se baseia na teoria de resposta linear de Kubo, para o qual se propoe uma extensao que leva em conta os efeitos do banho térmico no processo de relaxação do sistema para o equilíbrio.

O mecanismo de espalhamento proposto é o de interação "s-f" ou "s-d", entre os elétrons de condução e os spins localizados da rede.

Os resultados obtidos explicam satisfatoriamente os dados experimentais, e prevem outros efeitos nao obtidos em trabalhos teóricos anteriores.

ABSTRACT

A twofold study of the transport properties of magnetic materials is presented:

a) A calculation of the temperature dependence of the resistivity of ferromagnetic metals with domain structures (with 180° Bloch walls); and

b) a calculation of the magnetoresistivity for helicoidal spin structures as those presented by the rare earth metals.

The formalism used involves an extension of the Kubo theory of linear response, which takes into account the role of the heat bath in the process of relaxation to equilibrium.

The scattering mechanism proposed in both cases is the "s-d" or "s-f" interaction between conduction electrons and localized magnetic moments.

The results obtained explain satisfactorily experimental data, and predict other effects that are not obtained by previous theoretical works.

INDICE

INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I: O Método de Cálculo e o Modelo Utilizados	9
1.1 - A Teoria de Kubo-Nakano	9
1.2 - O Modelo	21
CAPÍTULO II: Resistividade de Metais com Estrutura de Domínios	25
2.1 - Magnons em Parede de Bloch de 180°	26
2.2 - Cálculo da Resistividade	36
2.3 - Conclusões	42
CAPÍTULO III: Magnetoresistividade em Estruturas Heli- coidais de Spins	44
3.1 - Cálculo da Magnetoresistividade	45
3.2 - Aplicação a um Modelo de Terra Rara	53
3.3 - Conclusões	68
APÊNDICES	74
TABELAS	101
FIGURAS	106
BIBLIOGRAFIA	118

INTRODUÇÃO

As propriedades de transporte de certos materiais, como os metais de transição e de Terras Raras, apresentam características que evidenciam claramente a influência da estrutura magnética nos fenômenos de transporte.

No caso particular da resistividade, pode-se observar várias dessas características peculiares, tais como as que são descritas abaixo.

As curvas experimentais de variação da resistividade com a temperatura, apresentam certas anomalias, caracterizadas por variações bruscas de valor ou de inclinação, justo nas temperaturas críticas (temperaturas de Curie ou Neel) para as quais se observa também uma mudança radical no comportamento magnético do material.

A aplicação de campos magnéticos externos alteram a dependência da resistividade com a temperatura, e inclusive a resistividade residual (independente de T), na qual se observa uma abrupta magnetoresistência negativa para campos magnéticos baixos, quando a amostra ainda apresenta estrutura de multidomínios. Esses fenômenos mostram a forte dependência da resistividade com a estrutura de domínios do material magnético.

A resistividade depende também da orientação da magnetização do material e do tipo de estrutura magnética (ferro-magnetismo, helimagnetismo, etc.). No caso, por exemplo das Terras Raras (estrutura h cp) a resistividade é altamente anisotrópica

O estudo desses fenômenos de transporte é complicado, não só pela complexidade dos cálculos, como também pela presença de vários mecanismos de espalhamento, tais como: elétron-fonon, interação s-f ou s-d, acoplamento spin-orbita, espalhamento dos elétrons por impurezas ou defeitos, etc.

Neste trabalho queremos estudar essencialmente dois problemas dos enunciados acima. No caso de um ferromagneto com estrutura de multidomínios queremos calcular a dependência da resistividade com a temperatura levando em conta a presença de paredes de Bloch que separam os diferentes domínios. O espalhamento dos elétrons de condução pelas paredes produz na resistividade uma dependência com a temperatura diferente do caso do ferromagneto uniforme.

O outro problema de nosso interesse refere-se ao cálculo da magnetoresistividade num metal de terra rara na presença das diferentes estruturas magnéticas típicas destes materiais. O campo externo aplicado modifica a estrutura magnética e isso reflete-se na magnetoresistência.

Os resultados experimentais (Taylor et al, 1968 ; Dyakina and Volkenstheyn, 1968) para baixas temperaturas no Ferro 1 a 4°K) indicam que na presença de múltiplos domínios, a resistividade apresenta uma dependência em T e $T^{3/2}$, além do termo em T^2 , característico do estado ferromagnético saturado (Beitchman et al, 1970). Cumpre notar que no caso de múltiplos domínios, as experiências não são bem conclusivas quanto a dependência em $T^{3/2}$.

Utilizando o mecanismo de espalhamento s-d (Kasuya, 1956), calculado na aproximação de ondas de spin (mag-

nons), e não levando em conta transições interbandas consegue-se obter a dependência em T^2 , como mostrado nos trabalhos de Kasuya (1959) e Mannari (1959), para o caso de um ferromagneto uniforme. Entretanto, quantitativamente não se consegue um acordo com os resultados experimentais, devido em parte às aproximações que são feitas para contornar a complexidade do problema de transporte, e a dificuldade de se considerar os detalhes da superfície de Fermi, exata de metais ferromagnéticos.

Turov (1958) mostrou que a interação spin-órbita, entre os elétrons de condução e os spins localizados, produz uma dependência linear da resistividade com a temperatura. Entretanto, o valor do coeficiente linear difere do valor experimental em uma ordem de grandeza, e não depende do estado magnético da amostra.

Em estrutura com múltiplos domínios, a presença de paredes de Bloch, que separam os mesmos, dá origem a um espectro de magnons com relações de dispersão e funções de onda que diferem substancialmente do caso uniforme.

No caso de paredes de Bloch de 180° (figura 1), Winter (1961) mostrou que o espectro de magnons se divide em dois ramos. Um deles representa magnons de superfície com vetores de onda paralelos à parede, e portanto localizados predominantemente nas vizinhanças da mesma. O outro corresponde a magnons que se propagam em todo o volume do cristal (magnons de volume), semelhantes ao caso de um ferromagneto uniforme, mas com funções de onda que, ao contrário dos do caso uniforme, apresentam distorções nas proximidades da parede.

A contribuição para a resistividade, proveniente do espalhamento dos elétrons de condução por magnons de superfície, foi calculada por Cabrera (1977). De acordo com esse trabalho (Cabrera, 1977), a resistividade é anisotrópica, com dependências em $T^{1/2}$ e $T^{3/2}$ para as direções perpendicular e paralela à parede de Bloch, respectivamente. Efeitos diamagnéticos, e estruturas complicadas de domínios (distribuição aleatória de domínios) podem atenuar esse comportamento anisotrópico.

Supõe-se também, no trabalho acima citado, que a contribuição dos magnons de volume contribui aditivamente para a resistividade, de forma semelhante ao caso de um ferromagneto uniforme. Na presença de domínios, entretanto, devido à distorção das funções de onda nas vizinhanças da parede de Bloch, é de se esperar que os magnons de volume produzam dependências com a temperatura diferentes das que se obtém no caso uniforme, que poderiam ser de mesma ordem de grandeza das provenientes dos magnons de superfície.

No capítulo 2 do nosso trabalho calculamos a contribuição para a resistividade proveniente do mecanismo acima citado. Os nossos resultados apresentam de fato um comportamento bastante diferente do termo quadrático do caso uniforme com $\rho_{||} = C_1 T^2 - C_2 T^{3/2} + C_3 T - C_4 T^{1/2}$, e $\rho_{\perp} = C_1 T^2 - C_3 T + C_4 T^{1/2}$, onde $\rho_{||}$ e $\rho_{\perp}$ são as resistividades nas direções paralela e perpendicular à parede de Bloch, respectivamente. A comparação dos coeficientes dos nossos resultados, com os de mesma dependência na temperatura no caso de magnons de superfície, reforçam a importância dos últimos no me

canismo de espalhamento. Como caso particular dos nossos resultados no limite da amostra saturada obtemos a dependência em T^2 característica do caso uniforme.

Existe um trabalho semelhante, feito anteriormente baseado na resolução da equação de Boltzmann (Khlebopros et al, 1974), que nos parece incorreto, uma vez que nele, a resistividade é isotrópica e possui dependência apenas em T^2 e $T^{3/2}$.

No capítulo 3 do presente trabalho estudamos o problema da magnetoresistividade em estruturas helicoidais de spin (figura 2). Experiências (Koehler and Wollan, 1955; Cable et al, 1965) com difração de nêutrons evidenciam esses tipos de estruturas em ligas e metais de Terras Raras pesados (Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm). Nesses metais, o tipo de estrutura apresentado depende da faixa de temperatura no qual se encontram, e no caso de estarem submetidos a campos magnéticos externos, do valor desse campo. No Holmio (Ho) por exemplo (Koehler et al, 1966 e 1967), a estrutura é do tipo hélice para temperaturas na faixa $20^\circ\text{K} < T < 132^\circ\text{K}$, e do tipo cone para $T < 20^\circ\text{K}$ (ver figura 2). A temperatura de Neel é de 132°K , acima do qual o Ho se torna paramagnético. Dependendo da estrutura inicial, a aplicação de campos magnéticos externos induz transições para outros tipos de estrutura, como mostra o diagrama de fases (figura 3) do trabalho de Koehler et al (1967).

Experimentalmente se observam certas anomalias nas propriedades de transporte dos metais de Terras Raras (Legvold, 1972). No caso particular da resistividade, como se po

de observar na figuras 4 e 5, notamos certas peculiaridades como o salto brusco na curva de ρ_c do Dy, os pontos de máximo de ρ_c torno da temperatura de Néel, e a mudança acentuada na inclinação das curvas de resistividade do plano basal. As curvas de magnetoresistividade (Akhavan e Blackstead, 1974); MacKintosh e Spaniel, 1964), mostrados nas figuras 6-12 apresentam anomalias semelhantes. Cumpre aqui observar certos de sacordos entre os resultados experimentais, especialmente pa ra temperaturas baixas.

A explicação desses fenômenos está ligada à ordem magnética peculiar das Terras Raras. Novamente, o mecanismo proposto é o do espalhamento dos elétrons de condução pelos spins localizados da rede (interação s-f).

Devido à periodicidade das estruturas helicoidais, a interação s-f acopla estados de Bloch com vetores de onda $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ tais que $\vec{k}' - \vec{k} = \pm \vec{Q} + \vec{R}$, onde $\vec{Q}$ é o vetor associado à periodicidade da estrutura, e $\vec{R}$ um vetor da rede recíproca. O efeito desse acoplamento é o de produzir modificações na estrutura de bandas, calculados na ausência da interação s-f, e na superfície de Fermi, introduzindo as chamadas "super zonas magnéticas" (Elliot and Wedgwood, 1963, 1964).

— Cálculos teóricos (Elliot, 1965; Elliot and Wedgwood, 1963 e 1964; Edward and Legvold, 1968), que levam em conta os efeitos de "Superzonas", explicam qualitativamente os resultados experimentais de resistividade (Legvold, 1972), para certos tipos de estruturas.

Para explicar o comportamento de magnetoresistividade, existem apenas discussões qualitativas baseadas no com

portamento do espectro de magnons em estruturas helicoidais (Mackintosh, 1972).

Na segunda parte do nosso trabalho, desenvolvemos um método de cálculo da magnetoresistividade de estruturas helicoidais genéricas. Como caso particular dos nossos resultados, ($\vec{H}_{\text{ext}} = 0$) obtemos a contribuição magnética para a resistividade. Embora no nosso modelo não consideremos efeitos de "super zonas", nossos resultados se assemelham aos dos trabalhos teóricos citados anteriormente, mas predizem outros efeitos.

No capítulo 1, seção 1.1, desenvolvemos o formalismo utilizado no cálculo da resistividade. Em particular, propomos uma extensão para o problema da teoria de resposta linear de Kubo que leva em conta a influência do banho térmico no processo de relaxação para o equilíbrio.

Na aproximação linear, a matriz densidade obtida coincide com o operador de quase equilíbrio de Mori (1965), estando as variáveis de grão grosso, agora, ligadas a potenciais efetivos que descrevem os efeitos de perturbação dos campos externos. No caso da resistividade, o potencial efetivo é um potencial vetorial que leva em conta os efeitos de memória desde que o campo externo foi ligado. Sob outras hipóteses simplificadoras, no regime linear, obtemos a fórmula de Nakano (1957), para a resistividade. Na seção 2.2., descrevemos o modelo genérico adequado aos tipos de sólidos cujas resistividades queremos estudar.

No capítulo 2, seção 2.1., rederivamos, de uma

maneira mais formal, o espectro de magnons obtido por Winter (1961), para uma estrutura de domínios tipo parede de Bloch de 180° . Na seção 2.2., determinamos a contribuição do espalhamento eletrôn-magnon para a resistividade. Na seção 2.3., apresentamos nossas conclusões, comentários e sugestões.

No capítulo 3, seção 3.1., calculamos a contribuição do espalhamento s-f em estruturas helicoidais de spins. Como caso particular, obtemos os resultados de uma estrutura ferro-magnética. Nesse caso, nossos cálculos mostram a presença de um termo, não obtido em qualquer trabalho anterior, de relevância na explicação de certos dados experimentais. A seguir, na seção 3.2., propomos um modelo fenomenológico para aplicação dos nossos resultados a um metal de Terra Rara (em particular ao Holmio). Na seção 3.3., apresentamos a comparação com resultados experimentais, comentários e sugestões.

CAPÍTULO I

O Método de Cálculo e o Modelo Utilizados.1.1. A Teoria de Kubo-Nakano

O cálculo de grandezas físicas que caracterizam um processo de transporte pode ser feito por diferentes métodos, e em vários graus de aproximação. O método mais tradicional é aquele que parte da equação de transporte de Boltzmann. A partir dessa equação, a primeira aproximação que se faz é a de considerar um tempo de relaxação para os processos de não equilíbrio que se estabelecem no sistema. Entretanto, essa equação já é em si uma aproximação do problema, pois seu estabelecimento se baseia na hipótese Markoffiana de localização espaço-temporal das interações (Fujita, 1966).

Nesse trabalho usaremos um método, baseado na teoria de Kubo (Kubo, 1957), e desenvolvido por Nakano (Nakano, 1957) para o problema específico do cálculo da resistividade em um material. Essa teoria é baseada na equação de movimento da matriz densidade do sistema na aproximação linear, ou seja, supondo que os processos irreversíveis que se estabelecem no sistema não o afastam muito da situação de equilíbrio. A menos da aproximação linear, os resultados dessa teoria são exatos (para sistemas isolados), e se aplicam de modo geral a uma extensa gama de problemas de transporte.

Consideremos um sistema, cuja Hamiltoniana seja

H , em equilíbrio térmico. Como sabemos, no equilíbrio térmico os valores médios das grandezas macroscópicas que caracterizam o sistema não variam no tempo. Esse fato se traduz na constância da matriz densidade, cuja equação de movimento é:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho] = 0 \quad (1.1.1)$$

Suponhamos agora que uma perturbação, descrita pelo Hamiltoniano $H'(t) = -AF(t)$, age adiabaticamente ($F(-\infty) = 0$) sobre o sistema. A nova matriz densidade passará a ser $\rho(t)$; obedecendo à equação

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H + H'(t), \rho(t)] \quad (1.1.2)$$

com a condição inicial $\rho(-\infty) = \rho$.

Na aproximação linear, podemos escrever:

$$\rho(t) = \rho + \Delta\rho(t) \quad (1.1.3)$$

onde $\Delta\rho(t)$ satisfaz à equação

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Delta\rho(t) = [H, \Delta\rho(t)] - F(t)[A, \rho] \quad (1.1.4)$$

Essa equação tem como solução

$$\begin{aligned} \Delta\rho(t) = & -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t-t')H\right\} [A, \rho] \\ & \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t-t')H\right\} F(t') dt' \quad (1.1.5) \end{aligned}$$

Consideremos uma grandeza física do sistema repre-

sentada pelo operador B.

O valor médio estatístico dessa grandeza em um instante t é dado por:

$$\langle B \rangle_t = \text{Tr}(\rho(t)B) = \text{Tr}(\rho B) + \text{Tr}(\Delta\rho(t)B), \quad (1.1.6)$$

onde $\text{Tr}(X)$ significa o traço da matriz X . Mas $\text{Tr}(\rho B)$ é o valor médio $\langle B \rangle_{t=-\infty}$, de modo que a variação $\Delta B(t) = \langle B \rangle_t - \langle B \rangle_{t=-\infty}$ obedece a equação $\Delta B(t) = \text{Tr}(\Delta\rho(t)B)$. Usando (1.1.5), e a propriedade cíclica $\text{Tr}(xyz) = \text{Tr}(yzx)$, obtemos:

$$\Delta B(t) = -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ \int_{-\infty}^t [A, \rho] B(t-t') F(t') dt' \right\}. \quad (1.1.7)$$

onde $B(t)$ é a representação de Heisenberg do operador B.

Podemos encarar a equação (1.1.7) como a resposta do sistema a uma série de impulsos aplicados no instante t' , e reescrevê-lo como:

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^t \phi_{BA}(t-t') F(t') dt', \quad (1.1.8)$$

onde

$$\phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}[\rho, A] B(t) \quad (1.1.9)$$

é a chamada "função resposta" do sistema.

No caso em que $F(t)$ é periódica i.e., $F(t) = F_0 \cos \omega t$, podemos definir a admitância do sistema definida por:

$$\Delta B(t) = \text{Re} \{ \chi_{AB}(\omega) F_0 e^{i\omega t} \}. \quad (1.1.10)$$

Comparando (1.1.10) com (1.1.8), obtemos que:

$$\chi_{AB}(\omega) = \int_0^\infty \phi_{BA}(t) e^{-i\omega t} dt . \quad (1.1.11)$$

Supondo que a perturbação introduzida pela medida da grandeza B seja desprezível (não se conhece condições exatas para isso), identificamos as médias estatísticas $\Delta B(t)$ com as variações reais observadas no sistema.

Suponhamos agora que o sistema seja descrito inicialmente por um ensemble canônico, no qual a matriz densidade é:

$$\rho = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{Tr } e^{-\beta H}} , \quad \beta = \frac{1}{K_B T} . \quad (1.1.12)$$

Usando a identidade

$$\begin{aligned} [A, \exp(-\beta H)] &= \exp(-\beta H) \int_0^\beta \exp(\lambda H) [H, A] \exp(-\lambda H) d\lambda = \\ &= \frac{\hbar}{i} \exp(-\beta H) \int_0^\beta \exp(\lambda H) \dot{A} \exp(-\lambda H) d\lambda \\ &= \frac{\hbar}{i} \exp(-\beta H) \int_0^\beta \dot{A}(-i\hbar\lambda) d\lambda , \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

como se verifica escrevendo em forma matricial ambos os membros da primeira igualdade acima, e onde usamos $[H, A] = \dot{A}$ e a representação de Heisenberg $\dot{A}(t) = \exp(\frac{it}{\hbar} H) \dot{A} \exp(-\frac{it}{\hbar} H)$, podemos escrever $\phi_{BA}(t)$ dado por (1.1.9) como:

$$\phi_{BA}(t) = \int_0^\beta \text{Tr} \{ \rho \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) \} d\lambda ,$$

ou

$$\phi_{BA}(t) = \int_0^\beta \langle \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle d\lambda , \quad (1.1.14)$$

e a admitância (1.1.11) como:

$$\chi_{BA}(t) = \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} dt \int_0^{\beta} \langle A(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle d\lambda \quad (1.1.15)$$

No caso específico do cálculo da condutividade, o termo de perturbação é:

$$H'(t) = - \sum_i e_i \vec{r}_i \cdot \vec{E}(t) \quad (1.1.16)$$

A corrente na direção μ devido a um impulso na direção v é dado por:

$$\begin{aligned} \phi_{\mu v}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left[\rho, \sum_i e_i x_{iv} \right] \sum_i e_i \dot{x}_{i\mu}(t) \\ &= \int_0^{\beta} \langle J_v(-i\hbar\lambda) J_{\mu}(t) \rangle d\lambda, \end{aligned}$$

onde $J_{\mu} = \sum_i e_i \dot{x}_{i\mu}$ é o operador de corrente total do sistema.

Em um volume unitário, o tensor de condutividade, para um campo periódico é dado pela admitância (1.1.13):

$$\sigma_{\mu v}(\omega) = \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} dt \int_0^{\beta} \langle J_v(-i\hbar\lambda) J_{\mu}(t) \rangle d\lambda \quad (1.1.17)$$

As expressões anteriores refletem o caráter geral do chamado "teorema de flutuação - dissipação", onde as constantes de amortecimento que aparecem nas equações que dão conta da variação macroscópica do sistema, são calculadas em termos de correlações de grandezas microscópicas que flutuam "rapidamente" no tempo. Rapidamente aqui significa que o tempo médio entre flutuações, que chamaremos τ_0 , é muito

menor que o tempo característico T durante o qual as grandezas macroscópicas variam apreciavelmente (isto é $\tau_0 \ll T$).

A teoria até aqui estabelecida apresenta alguns pontos discutíveis (Zubarev, 1974). A condição inicial (1.1.12) significa que o sistema estava inicialmente $t = -\infty$ em equilíbrio com um reservatório térmico. Entretanto, o uso da equação de Liouville, $i\hbar \partial \rho / \partial t = [H, \rho]$, é válido apenas para sistemas isolados. Desse modo, supõe-se que ao ligar a interação mecânica (campo externo), desliga-se o contato com o reservatório. O ato de desligar o reservatório deve, no entanto, ter alguma influência sobre o sistema, e esse fato não é levado em conta dentro desse formalismo.

Uma outra interpretação (Bernard and Callen, 1959), supõe que o reservatório não é desligado, e adiciona um pequeno termo à Hamiltoniana, que representa a influência do banho térmico sobre o sistema. Essa interpretação não é de todo satisfatório, uma vez que a influência do reservatório não é efetivamente levada em conta, supondo-se apenas que o termo de interação causa transições incoerentes entre os estados do sistema.

Um outro tratamento possível (Mc Lennan, 1961; Zubarev, 1974) seria adicionar um termo de fonte na equação de Liouville, para o subsistema considerado na forma de um termo de relaxação, que conduziria ao equilíbrio final com o banho térmico.

Do que foi exposto acima, concluímos que a matriz densidade que realmente descreve o subsistema em contato com o reservatório térmico não satisfaz à equação de Liouville.

Sugerimos, assim, uma nova interpretação, na qual podemos usar a equação de Liouville, modificando entretanto a perturbação mecânica externa. Ou seja, podemos dizer que a evolução real do sistema, submetida à perturbação $F(t')$, coincide com a evolução dada pela matriz densidade que satisfaz à equação de Liouville, para uma perturbação $F(t, t') = F(t') f'(t, t')$. Ou equivalentemente, podemos achar um campo efetivo $F(t, t')$ que forneça uma matriz densidade (satisfazendo à equação de Liouville) tal que no instante t o valor médio de uma determinada grandeza física obtido, usando aquela matriz, coincida com o valor médio real da grandeza.

Desse modo, usando a eq. (1.1.5) obtemos:

$$\Delta\rho(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t-t')H\right\} [A, \rho] \times \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t-t')H\right\} F(t') f(t, t') dt' \quad (1.1.19)$$

Suponhamos agora que a perturbação $F(t')$ aplicada ao sistema seja um impulso de área $A(t_0)$, ou seja,

$$F(t') = A(t_0) \delta(t' - t_0) \quad (1.1.20)$$

Da equação (1.1.17), obtemos que:

$$\Delta\rho(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right\} [A, \rho] \times \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right\} A(t_0) f(t, t_0) \theta(t - t_0), \quad (1.1.21)$$

onde $\theta(t - t_0)$ é a função de Heavieside.

Especializando (1.1.19) para o caso em que $F(t')$ seja um campo elétrico, vemos que a matriz densidade, na aproximação linear é dada por:

$$\rho(t) = \begin{cases} \exp(-\beta H) & \text{para } t < t_0, \\ \exp(-\beta H) \left[1 + \int_0^\beta d\lambda J_\mu(-i\hbar\lambda) A_\mu(t_0, t_0) \right] & \text{para } t = t_0 \\ \exp(-\beta H) \left[1 + \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H \right\} \int_0^\beta d\lambda J_\mu(-i\hbar\lambda) A_\mu(t, t_0) \right. \\ \left. \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar}(t - t_0)H \right\} \right] & \text{para } t > t_0. \end{cases} \quad (1.1.22)$$

Na expressão (1.1.22) acima, usamos a expansão (1.1.12) para $[A, \rho]$, lembrando que $\dot{A} = J_\mu$, e generalizamos, para o caso de um sistema não isotrópico, em que o tempo de relaxação depende da direção do campo aplicado, a relação $A(t, t_0) = A(t_0) f_{v\mu}(t, t_0)$, escrevendo

$$A_\mu(t, t_0) = \sum_v A_v(t_0) f_{v\mu}(t, t_0). \quad (1.1.23)$$

A condição inicial para $A_\mu(t, t_0)$ deve ser:

$$A_\mu(t_0, t_0) = A_\mu(t_0), \quad (1.1.24)$$

ou seja, $f_{v\mu}(t_0, t_0) = \delta_{v\mu}$, o que representa fisicamente o fato de que o não isolamento do sistema, devido ao contato com o reservatório, não se manifesta instantaneamente. Assim, em $t = t_0$, o sistema se comporta como se estivesse isolado, e sua matriz densidade deve dar um salto devido à energia recebida do impulso elétrico.

As expressões (1.1.22) coincidem com a expansão

em primeira ordem da matriz, semelhante à matriz densidade no equilíbrio,

$$\rho(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H \right\} \exp \left\{ -\beta [H - J_\mu A_\mu(t, t_0)] \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar}(t - t_0)H \right\}, \quad (1.1.25)$$

como se observa, usando a expansão

$$\begin{aligned} \exp \{-\beta(H - H')\} &= \exp \{-\beta H\} \exp \left\{ \int_0^\beta e^{\lambda H} H' e^{-\lambda H} d\lambda \right\} \\ &= \exp \{-\beta H\} \left\{ 1 + \int_0^\beta e^{\lambda H} H' e^{-\lambda H} d\lambda + (H')^2 \right\}. \end{aligned} \quad (1.1.26)$$

Desse modo, o potencial vetor efetivo $A_\mu(t, t_0)$ satisfaz a equação:

$$\begin{aligned} \exp \{-\beta [H - J_\mu A_\mu(t + \Delta t, t_0)]\} &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \Delta t H \right\} \times \\ &\times \exp \{-\beta [H - J_\mu A_\mu(t, t_0)]\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Delta t H \right\}. \end{aligned} \quad (1.1.27)$$

Expandindo ambos os membros de (1.1.27) até primeira ordem no potencial vetor, obtemos a seguinte equação:

$$\sum_v \frac{d}{dt} A_v(t, t_0) a_{v\mu} = \sum_v A_v(t, t_0) b_{v\mu}, \quad (1.1.28)$$

onde

$$a_{v\mu} = \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \{ \rho e^{\lambda H} J_v e^{-\lambda H} J_\mu \}, \quad (1.1.28.a)$$

e

$$b_{v\mu} = \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \{ \rho e^{\lambda H} J_v e^{-\lambda H} \{ J_\mu - J_\mu(\Delta t) \} / \Delta t \}, \quad (1.1.28.b)$$

sujeita à condição inicial

$$A_v(t_0, t_0) = A_v(t_0) = F_v(t_0) dt_0. \quad (1.1.29)$$

Podemos reescrever a equação (1.1.26) na forma:

$$\frac{d}{dt} A_v(t, t_0) = \sum_v A_v(t, t_0) c_{v\mu}, \quad (1.1.30)$$

onde

$$C_{\nu\mu} = \sum_{\rho} b_{\nu\rho} a_{\rho\mu}^{-1} \quad (1.1.31)$$

Utilizando a transformação que diagonaliza a matriz $C_{\nu\mu}$:

$$\sum_{\rho} \sum_{\sigma} S_{\nu\rho} C_{\rho\sigma} S_{\sigma\mu}^{-1} = C_{\nu} \delta_{\nu\mu} \quad (1.1.32)$$

obtemos a solução de (1.1.26), com a condição inicial (1.1.27) na forma:

$$A_{\mu}(t, t_0) = \sum_{\nu} F_{\nu}(t_0) dt_0 \sum_{\rho} S_{\nu\rho}^{-1} S_{\rho\mu} e^{-c_{\rho}(t-t_0)} \quad (1.1.33)$$

Comparando (1.1.33) com (1.1.23) vemos que:

$$f_{\nu\mu}(t, t_0) = \sum_{\rho} S_{\nu\rho}^{-1} S_{\rho\mu} e^{-c_{\rho}(t-t_0)} \quad (1.1.34)$$

cuja forma havíamos previsto anteriormente.

Considerando agora que $F_{\nu}(t)$ não mais seja um impulso, mas sim uma função contínua do tempo, e usando o princípio de superposição consequente da linearidade das equações, obtemos que:

$$A_{\mu}(t) = \int_{-\infty}^t A_{\mu}(t, t_0) dt_0 = \sum_{\nu} F_{\nu}(t) \sum_{\rho} S_{\nu\rho}^{-1} S_{\rho\mu} (C_{\rho} + i\omega)^{-1} \quad (1.1.35)$$

Usando (1.1.29) e (1.1.30), podemos escrever:

$$A_{\mu}(t) = \sum_{\nu} F_{\nu}(t) (ba^{-1} + i\omega)_{\nu\mu}^{-1} \quad (1.1.36)$$

A corrente $\langle J_{\mu}(t) \rangle = \text{Tr} \{ \rho(t) J_{\mu} \}$, pode ser escri-

ta, em termos do potencial $A_\mu(t)$, na aproximação de primeira ordem, como:

$$J_\mu(t) = \sum_\nu A_\nu(t) a_{\nu\mu} \quad (1.1.37)$$

Assim, para um campo periódico $F_\nu(t) = F_\nu e^{i\omega t}$,

$$J_\mu(t) = \sum_\nu F_\nu e^{i\omega t} [(ba^{-1} + i\omega)^{-1} a]_{\nu\mu} \quad (1.1.38)$$

de modo que a condutividade $\sigma_{\nu\mu}(\omega)$ é dada por:

$$\sigma_{\nu\mu}(\omega) = [(ba^{-1} + i\omega)^{-1} a]_{\nu\mu} \quad (1.1.39)$$

No caso em que o Hamiltoniano H seja a soma de um termo H_0 , que comuta com $\vec{J}$, mais um termo de interação H_{int} , as matrizes $a_{\nu\mu}$ e $b_{\nu\mu}$ podem ser aproximadas (Nakano 1956) por

$$\begin{aligned} a_{\nu\mu} &= \beta \langle J_\nu J_\mu \rangle, \quad e \\ b_{\nu\mu} &= \frac{\beta\pi}{\hbar^2} \langle [J_\nu, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_\mu] \rangle \Big|_{\omega=0} \\ &+ \frac{i}{\hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2} \langle [[J_\nu, H_{int}(\omega)], [H_{int}(-\omega), J_\mu]] \rangle, \end{aligned} \quad (1.1.40)$$

onde

$$\langle \chi \rangle = \frac{\text{Tr} (e^{-\beta H_0} \chi)}{\text{Tr} (e^{-\beta H_0})}, \quad (1.1.40.a)$$

e

$$H_{int}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H_{int}(t) e^{-i\omega t} dt \quad (1.1.40.b)$$

com

$$H_{int}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} t H_0\right) H_{int} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t H_0\right) \quad (1.1.40.c)$$

Para um sistema com simetria esférica, e um campo estático ($\omega = 0$), a condutividade é diagonal, e dada por

$$\sigma_{\mu\mu} = \frac{\hbar^2}{\pi K_B T} \langle J_\mu J_\mu \rangle^2 \cdot \langle [J_\mu, H_{\text{int}}(\omega)] [H_{\text{int}}(-\omega), J_\mu] \rangle^{-1} \Big|_{\omega=0} \quad (1.1.41)$$

Assim, a resistividade $\rho = \sigma^{-1}$ é obtida por:

$$\rho_{\mu\mu} = \frac{\pi K_B T}{\hbar^2} \frac{\langle [J_\mu, H_{\text{int}}(\omega)] [H_{\text{int}}(-\omega), J_\mu] \rangle \Big|_{\omega=0}}{\langle J_\mu J_\mu \rangle^2} \quad (1.1.42)$$

Comparando (1.1.42) com a expressão (1.1.17) da teoria de Kubo, vemos que a primeira apresenta menor dificuldade de cálculo, uma vez que nela, as correlações, dadas por (1.1.40.a), são calculadas com a Hamiltoniana H_0 em vez de da Hamiltoniana total do sistema.

1.2. O Modelo

A experiência mostra que certos sólidos magnéticos (como os metais de Terras Raras) apresentam, na fase paramagnética, momentos magnéticos muito próximos dos apresentados pelos íons dos átomos que o formam. Desse modo, um dos modelos fenomenológicos usados em Magnetismo supõe, que ao se formar o sólido, os elétrons das camadas atômicas mais externas formem bandos de condução enquanto que os elétrons de camadas incompletas dão lugar a momentos magnéticos localizados da rede.

A adoção desse modelo significa que podemos escrever a Hamiltoniana do sólido como

$$\hat{H} = H_C + H_S + H_{int} \quad , \quad (1.2.1)$$

onde H_C descreve os elétrons de condução, H_S descreve o sistema de spins localizados, e H_{int} a interação entre eles.

A parte H_C da Hamiltoniana (1.2.1) é dada pelo termo de energia cinética e de interação eletrostática entre os elétrons e os núcleos, podendo ainda incluir um termo de interação média entre os elétrons (aproximações de Hartree ou Hartree-Fock). Como sabemos, esse termo dá origem a um esquema de faixas de energia. Desse modo, usando o formalismo de segunda quantização, podemos escrever essa parte da Hamiltoniana como:

$$H_C = \sum_{n, \vec{k}, \sigma} E_{n\vec{k}\sigma} C_{n\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{n\vec{k}\sigma} \quad , \quad (1.2.2)$$

onde $C_{n\vec{k}\sigma}^{\dagger}$ cria, e $C_{n\vec{k}\sigma}$ destrói um elétron na faixa n com

momento $\vec{k}$, spin σ , e energia $E_{n\vec{k}\sigma}$.

Supomos no nosso modelo, que a aproximação de elétrons livres funciona bem para os elétrons de condução. De modo que tomaremos como relação de dispersão.

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.2.3)$$

onde m é a massa do elétron. Essa hipótese elimina o problema, em geral complicado, de se considerar a forma exata da superfície de Fermi, supondo-a esférica.

Os elétrons (estados eletrônicos) das camadas incompletas não se adaptam ao esquema de faixas devido às fortes interações eletrostáticas intra e interatômicas. Da primeira delas resultam as regras de Hund, que determinam o valor do momento angular J de cada íon. Das interações interatômicas consideramos somente aquelas devido ao campo cristalino produzido pelos vizinhos mais próximos, e (ou) a proveniente da superposição das funções de ondas dos estados localizado (interação de troca). Essas interações podem ser escritas em termos dos operadores equivalentes de momento angular dos íons (Stevens, 1952), como:

$$H_S = - \sum_{ij} J(\vec{R}_{ij}) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i H_{cc}(\vec{S}_i) \quad (1.2.4)$$

onde $J(\vec{R}_{ij})$ é uma integral envolvendo as funções de ondas dos estados localizados, e $H_{cc}(\vec{S}_i)$ o termo de campo cristalino, que depende da simetria dos primeiros vizinhos, (tipo da rede cristalina).

Como se observa, o primeiro termo de (1.2.4) é invariante por rotações. Essa simetria é quebrada pelo termo

H_{cc} , devido a sua simetria mais baixa. As formas explícitas desses termos serão vistos nos capítulos seguintes.

A parte H_{int} em (1.2.1) é o conhecido termo de interação "s-d" ou "s-f". Ele é obtido, tomando-se os elementos da matriz da interação Coulombiano que resultem em uma troca de estado entre elétrons de condução e elétrons localizados. Supondo-se funções de ondas atômicas não superpostas para os estados localizados, funções de Bloch para os estados de condução, e usando a representação de férmions para os operadores de Spins das camadas incompletas, podemos escrever (Kasuya, 1956):

$$H_{int} = - N^{-1} \sum_{k,p} J(\vec{k}, \vec{p}) \vec{S}(-p) \cdot \vec{S}_{c\vec{k}}(\vec{p}), \quad (1.2.5)$$

onde N é o número de íons por unidade de volume, $J(\vec{k}, \vec{p})$ é uma integral envolvendo os orbitais atômicos e as funções de Bloch (ou uma média no caso de vários estados localizados),

$\vec{S}(-\vec{p}) = \sum_n \vec{e}^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_n} \vec{S}_n$, a transformada de Fourier dos spins localizados, e $\vec{S}_{c\vec{k}}(\vec{p})$ é dado por:

$$\begin{aligned} S_{c\vec{k}}^+(\vec{p}) &= 2 C_{\vec{k},\uparrow}^+ C_{\vec{k}+\vec{p},\uparrow} \\ S_{c\vec{k}}^-(\vec{p}) &= 2 C_{\vec{k}+\vec{p},\uparrow}^+ C_{\vec{k},\uparrow} \\ S^z(\vec{p}) &= C_{\vec{k},\uparrow}^+ C_{\vec{k}+\vec{p},\uparrow} - C_{\vec{k},\downarrow}^+ C_{\vec{k}+\vec{p},\downarrow} \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

Em primeira aproximação, supomos $J(\vec{k}, \vec{p}) = \text{constante} = J$. E nos casos em que o campo cristalino não é suficiente para "congelar" o momento angular orbital ($\langle \vec{L} \rangle \neq 0$), usamos a re-

lação $\vec{S} = (g - 1)\vec{J}$, onde g é o fator de Landé.

Resumindo, a Hamiltoniana modelo que usaremos para descrever o sólido será:

$$H = \sum_{n\vec{k}\sigma} E_{n\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i H_{cc}(\vec{S}_i) - \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{p}} \vec{S}(-\vec{p}) \cdot \vec{S}_{c\vec{k}}(\vec{p}) \quad (1.2.7)$$

Nas seções seguintes explicitaremos os termos de (1.2.7) apropriados a cada problema.

CAPÍTULO II

Resistividade de Metais com Estrutura de Domínios

Suponhamos que no modelo, descrito no capítulo anterior, o conjunto de spins localizados apresente uma estrutura de domínios com parede de Bloch de 180° (fig. 1). Uma estrutura desse tipo pode ser descrita da seguinte maneira:

Consideremos uma família de planos da rede cristalina. No equilíbrio termodinâmico, as médias térmicas dos spins de todo os pontos, pertencentes a um mesmo plano, são paralelas e estão contidas nesse plano. Além disso, em um sistema de coordenadas, no qual se toma o eixo y perpendicular à família de planos, a média $\langle \vec{S}(y) \rangle$ em cada plano da rede obedece às condições:

$$\begin{aligned} \langle \vec{S}(-\infty) \rangle &= S \hat{z} , \\ \langle \vec{S}(+\infty) \rangle &= - S \hat{z} , \\ \langle S(y) \rangle &= S \hat{n}(y) , \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $\hat{n}(y)$ é um vetor unitário que forma um ângulo $\theta(y)$ com o eixo z . Na seção 2.1 veremos como aparece uma estrutura desse tipo, e determinaremos a função $\theta(y)$.

Como estamos interessados no cálculo da resistividade de a baixas temperaturas (1 a $4,2^\circ\text{K}$) iremos, também na seção 2.1, determinar o espectro de excitação de magnons desse sistema.

2.1. Magnons em Parede de Bloch de 180°

Consideremos, na Hamiltoniana (1.2.7) do nosso modelo, apenas os termos de troca entre vizinhos mais próximos, e uma anisotropia uniaxial devido ao campo cristalino:

$$H = - 2 J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + K \sum_i [(S_i^y)^2 + (S_i^x)^2], \quad (2.1.1)$$

onde $\langle i,j \rangle$ significa vizinhos mais próximos.

Supondo uma rede simples cúbica, podemos escrever:

$$\begin{aligned} -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j &= -2J \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^y S_j^y + \sum_{i,m} [S_i^x S_{i+m}^x + \right. \\ &\left. + S_i^z S_{i+m}^z] + \sum_{i,\ell} [S_i^x S_{i+\ell}^x + S_i^z S_{i+\ell}^z] \right\}, \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

onde os pontos $i+m$ e $i+\ell$ se referem aos vizinhos mais próximos do ponto i ao longo dos eixos y e z (figura 1), respectivamente.

Verifica-se facilmente que o estado fundamental da Hamiltoniana (2.2.1) é aquele no qual $\langle S_i^z \rangle = S$, e $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = 0$. Entretanto, devido a efeitos de superfície, que não estamos levando em conta, o estado fundamental do sistema pode se dar para uma estrutura magnética tipo parede de Bloch de 180° (eq. 2.1).

Para determinarmos o ângulo $\theta(y)$, façamos a transformação para o sistema de coordenadas (X, y, Z) , no qual a média $\langle \vec{S} \rangle$, em cada plano, seja $\langle \vec{S} \rangle = S \hat{z}$. Sendo $\vec{S}$ um operador vetorial, suas componentes se transformam como:

$$S_i^Y = S_i^Y$$

$$S_i^X = S_i^X \cos \theta_i + S_i^Z \sin \theta_i \quad (2.1.3)$$

$$S_i^Z = S_i^Z \cos \theta_i - S_i^X \sin \theta_i$$

A Hamiltoniana (2.1.2) no novo sistema é:

$$\begin{aligned} H = & - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Y S_j^Y - 2J \sum_{i,m} \sin(\theta_i - \theta_{i+m}) [S_i^Z S_{i+m}^X - \\ & - S_i^X S_{i+m}^Z] - 2J \sum_{i,m} \cos(\theta_i - \theta_{i+m}) [S_i^X S_{i+m}^X + S_i^Z S_{i+m}^Z] - \\ & - 2J \sum_{i,l} (S_i^X S_{i+l}^X + S_i^Z S_{i+l}^Z) + K \sum_i [(S_i^X)^2 \cos^2 \theta_i + \\ & + (S_i^Z)^2 \sin^2 \theta_i + (S_i^X S_i^Z + S_i^Z S_i^X) \sin \theta_i \cos \theta_i + (S_i^Y)^2] \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

O termo adicional mencionado acima, ao ser incluído em (2.2.4), nos permite tomar como estado fundamental do sistema, aquele no qual $S_i^Z |0\rangle = S |0\rangle$, para todo ponto i da rede. Assim, a energia do estado fundamental é:

$$\begin{aligned} E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle & = - 2J \sum_{i,m} \cos(\theta_i - \theta_{i+m}) S^2 - \\ & - 2J \sum_{i,l} S^2 + K \sum_i S^2 \sin^2 \theta_i \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Para se obter $\theta_i(y)$ devemos minimizar E_0 . Supondo uma variação contínua e suave para θ , podemos escrever

$$\cos(\theta_i - \theta_{i+m}) \approx 1 - \frac{(\Delta \theta_y)^2}{2} \quad (2.1.6)$$

Desse modo,

$$E_0 = - 2J \sum_{i,m} S^2 - 2J \sum_{i,l} S^2 + J \sum_{i,m} S^2 \Delta\theta^2 + \\ + K \sum_i S^2 \sin^2 \theta_i . \quad (2.1.7)$$

Sendo a o parâmetro de rede, podemos transformar as somatórias em integrais do tipo:

$$\sum_{i,m} (\Delta\theta)^2 \approx \sum_{i,m} \left(\frac{\Delta\theta}{\Delta y}\right)^2 (\Delta y)^2 = a \int (\theta')^2 dy ,$$

$$\text{e } \sum_i \sin^2 \theta_i \approx \sum_i \sin^2 \theta_i \frac{\Delta y}{\Delta y} = \frac{1}{a} \int \sin^2 \theta_i dy . \quad (2.1.8)$$

Devemos então minimizar o funcional

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha (\theta')^2 + \beta \sin^2 \theta] dy , \quad (2.1.9)$$

onde $\alpha = Ja$, e $\beta = K/a$.

Do cálculo variacional, temos a equação de Euler-Lagrange.

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{dF}{d\theta'} \right) - \frac{dF}{d\theta} = 0 , \quad (2.1.10)$$

onde $F = \alpha (\theta')^2 + \beta \sin^2 \theta$. Obtemos assim a condição

$$\alpha (\theta')^2 = \beta \sin^2 \theta + C . \quad (2.1.11)$$

Impondo as condições de contorno

$$\theta' = 0 \text{ para } y = \pm\infty ,$$

$$\theta = 0 \text{ para } y = -\infty , \quad (2.1.12)$$

$$\theta = \pi \text{ para } y = +\infty ,$$

obtemos que $C = 0$.

O ângulo θ deve, pois, satisfazer à condição:

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{1}{a} \left(\frac{K}{J}\right)^{1/2} \sin \theta = \frac{\sin \theta}{\lambda} \quad , \quad (2.1.13)$$

com $\lambda = a \left(\frac{J}{K}\right)^{1/2}$, ou à condição equivalentes (das equações (2.1.6) e (2.1.8))

$$2J(1 - \cos \Delta\theta) = K \sin^2 \theta \quad . \quad (2.1.14)$$

Integrando a equação (2.1.13) e usando as condições de contorno (2.1.12), obtemos a bem conhecida relação (Landau, 1935),

$$\cos \theta = - \tanh \left(\frac{Y}{\lambda}\right) \quad . \quad (2.1.15)$$

Vamos agora determinar as excitações acima do estado fundamental. Para isso, façamos as transformações de Holstein-Primakoff, na aproximação linear:

$$S_i^+ = (2S)^{1/2} a_i \quad , \quad S_i^- = (2S)^{1/2} a_i^+ \quad , \quad S_i^Z = S - a_i^+ a_i \quad . \quad (2.1.16)$$

Nessa aproximação, podemos escrever, tomando apenas os termos até segunda ordem em S^X e S^Y ,

$$\sum_{i,j} S_i^Z S_j^Z = \sum_i S_i^2 - (S_i^X)^2 - (S_i^Y)^2 \quad . \quad (2.1.17)$$

Usando (2.1.14) e (2.1.17), podemos escrever a Hamiltoniana (2.1.4), até termos de segunda ordem em S^X e S^Y , como:

$$\begin{aligned}
H = & - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Y S_j^Y - 2J \sum_{i,m} \cos(\Delta\theta_i) S_i^X S_{i+m}^X - \\
& - 2J \sum_{i,l} S_i^X S_{i+l}^X + K \sum_i [(S_i^X)^2 (\cos^2 \theta_i - \sin^2 \theta_i) + \\
& + (S_i^Y)^2 \cos^2 \theta_i] + 2J \sum_i \cos(\Delta\theta_i) [(S_i^X)^2 + (S_i^Y)^2] + \\
& + 4J \sum_i [(S_i^X)^2 + (S_i^Y)^2] \quad (2.1.18)
\end{aligned}$$

Na representação de Heisenberg, temos as equações de movimento,

$$i\hbar \frac{dS_i^\alpha}{dt} = [S_i^\alpha, H] \quad ; \quad (\alpha = x, y). \quad (2.1.19)$$

Usando a relação de comutação:

$$\begin{aligned}
[S_i^X, S_j^Y] &= [(2S)^{1/2} \frac{a_i + a_i^+}{2}, (2S)^{1/2} \frac{a_j - a_j^+}{2i}] = \\
&= -i \frac{S}{2} [a_i + a_i^+, a_j - a_j^+] = -i \frac{S}{2} (-\delta_{ij} - \delta_{ij}) = iS\delta_{ij}, \quad (2.1.20)
\end{aligned}$$

obtemos a equação de movimento para S_i^Y :

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dS_i^Y}{dt} &= (-2i)S S_i^X [K(\cos^2 \theta_i - \sin^2 \theta_i) + 2J \cos(\Delta\theta_i) + \\
&+ 4J] + (2i)SJ \sum_m [\cos(\Delta\theta_i) S_{i+m}^X + \cos(\Delta\theta_{i-m}) S_{i-m}^X] + \\
&+ (2i)SJ \sum_l (S_{i+l}^X + S_{i-l}^X). \quad (2.1.21)
\end{aligned}$$

Lembrando que os operadores S_i^X e S_i^Y são, agora, combinações de operadores de campo de bosons, e portanto funções de $\vec{r}$ e t , podemos fazer a aproximação contínua:

$$S_{i+\underline{\delta}}^X = S_i^X + \underline{\delta} \cdot \nabla S_i^X + \frac{1}{2} \sum_{kn} \delta_k \delta_n \frac{\partial^2 S_i^X}{\partial x_k \partial x_n} + \dots \quad (2.1.22)$$

Especializando a relação anterior para $\underline{\delta} = a\hat{y}$, $\underline{\delta} = a\hat{z}$, e $\delta = a\hat{x}$ e aproximando $\cos(\Delta\theta_i) \approx \cos(\Delta\theta_{i-m}) \approx 1$ em (2.1.21), obtemos a equação para o operador de campo $S^Y(\vec{r}, t)$:

$$\hbar \frac{dS^Y}{dt} = 2JSa^2 \nabla^2 S^X - 2KS(\cos^2\theta - \sin^2\theta)S^X. \quad (2.1.23)$$

De forma análoga, obtemos para $S^X(\vec{r}(t))$ a equação:

$$\hbar \frac{dS^X}{dt} = -2JSa^2 \nabla^2 S^Y + 2KS(\cos^2\theta - \sin^2\theta)S^Y. \quad (2.1.24)$$

Das equações (2.1.23) e (2.1.24) obtemos a equação de movimento para $S^+ = S^X + iS^Y$:

$$i\hbar \frac{dS^+}{dt} = -2JSa^2 \nabla^2 S^+ + 2KS(\cos^2\theta - \sin^2\theta)S^+. \quad (2.1.25)$$

O operador de campo S^+ pode ser expandido em termos de operadores de criação e destruição de bosons que diagonalizem a Hamiltoniana H . Essa expansão é:

$$S_{(\vec{r},t)}^+ = (2S)^{1/2} a(\vec{r},t) = (2S)^{1/2} \sum_q a_q(t) \phi_q(\vec{r}), \quad (2.1.26)$$

onde $a_q(t)$ é o operador de destruição de boson no estado representado pela função de onda $\phi_q(\vec{r})$, de tal modo que:

$$H = \sum_q E_q a_q^+ a_q. \quad (2.1.27)$$

Nessa representação, usando a regra de comutação $[a_q, a_{q'}^+] = \delta_{q,q'}$, obtemos que:

$$\begin{aligned}
i \hbar \frac{dS^+}{dt} &= (2S)^{1/2} \sum_q i \hbar \frac{da_q}{dt} \phi_q = \\
&= (2S)^{1/2} \sum_{k,k'} [a_q, E_q, a_q^+, a_q] \phi_q = \\
&= (2S)^{1/2} \sum_q E_q a_q \phi_q .
\end{aligned} \tag{2.1.28}$$

Desse modo, a equação (2.1.25) se torna:

$$\begin{aligned}
\sum_q E_q a_q \phi_q &= -2JSa^2 \sum_q a_q \nabla^2 \phi_q + 2KS(\cos^2 \theta - \\
&- \sin^2 \theta) \sum_q a_q \phi_q .
\end{aligned} \tag{2.1.29}$$

Sendo os ϕ_q^S linearmente independentes por constituírem um conjunto completo, a equação anterior acarreta que:

$$E_q \phi_q = -2JSa^2 \nabla^2 \phi_q + 2KS(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \phi_q . \tag{2.1.30}$$

Pelo método de separação de variáveis, podemos escrever:

$$\phi_q(\vec{r}) = X_q(x) Y_q(y) Z_q(z) , \tag{2.1.31}$$

As equações obtidas para X e Z nos fornecem ondas planas, de modo que:

$\phi_q(\vec{r}) = Y_q(y) e^{i(q_x x + q_z z)}$, com $Y_q(y)$ satisfazendo a equação:

$$\begin{aligned}
[E_q - 2JSa^2(q_x^2 + q_z^2)] Y_q(y) &= -2JSa^2 \frac{d^2}{dy^2} Y_q(y) + \\
+ 2KS [\cos^2 \theta(y) - \sin^2 \theta(y)] Y_q(y) .
\end{aligned} \tag{2.1.32}$$

Usando (2.1.14), obtemos que a solução geral de (2.1.32) é uma combinação linear de:

$$Y_q(y) = \exp \left[\pm \left(1 - \frac{\epsilon_q}{2KS} \right)^{1/2} \frac{y}{\lambda} \right] \left[\mp \tan\left(\frac{y}{\lambda}\right) + \left(1 - \frac{\epsilon_q}{2KS} \right)^{1/2} \right], \quad (2.1.33)$$

onde $\epsilon_q = E_q - 2JSa^2(q_x^2 + q_z^2)$.

Impondo a condição de que ϕ deve ser de quadrado integrável, e portanto que Y seja bem comportada quando $y \rightarrow \pm\infty$, vemos que os únicos valores possíveis para ϵ_q são $\epsilon_q = 0$, ou $\epsilon_q > 2KS$.

Quando $\epsilon_q = 0$,

$$E_q = 2JSa^2(q_x^2 + q_z^2), \quad (2.1.34)$$

$$e Y_q(y) = \frac{A}{\cosh(y/\lambda)} \quad (2.1.35)$$

Quando $\epsilon_q > 2KS$, de modo que $(1 - \epsilon_q/2KS)^{1/2} = i\lambda q_y$, obtemos:

$$E_q = 2JSa^2(q_x^2 + q_y^2 + q_z^2) + 2KS, \quad (2.1.36)$$

$$e Y_q(y) = b e^{i\lambda q_y y} [\tanh(y/\lambda) + i\lambda q_y] \quad (2.1.37)$$

Fisicamente, as expressões (2.1.34) e (2.1.35) representam, respectivamente, a relação de dispersão e a função de onda de magnons de superfície (vetores de onda bi-dimensionais; $q_y=0$), e, (2.1.36) e (2.1.37) se referem aos magnons de volume ($q_y \neq 0$).

Entretanto, devemos observar, de (2.1.34) e (2.1.35), que para o estado de um magnon com $\vec{q} = 0$, teremos

$E_0 = 0$, e $\phi_0 = \frac{A}{\cosh(y/\lambda)}$. Calculando o valor médio de S_i^Z nesse estado, obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \psi | S_i^Z | \psi \rangle &= \langle 1 | S - a_i^+ a_i | 1 \rangle = \langle 1 | S - \sum_{q,q'} a_q^+ a_{q'} \phi_q^* \phi_{q'} | 1 \rangle \\ &= S - |\phi_0|^2 = S - \frac{A^2}{\cosh(y/\lambda)}. \end{aligned} \quad (2.1.38)$$

Podemos reescrever (2.1.38), usando (2.1.14), como $\langle \psi | S_i^Z | \psi \rangle = S \cos \delta \theta_i$, com $\cos \delta \theta_i = 1 - \frac{A^2}{S} \sin^2 \theta_i$.

Esse resultado corresponde a termos um estado fundamental com distribuição angular indefinido. Isso corresponde, para pequenos valores de A , a uma situação instável da localização da parede de Bloch. De fato, arbitrando $A \ll S$, podemos escrever:

$$\cos \delta \theta_i = 1 - \frac{(\delta \theta_i)^2}{2} = 1 - \frac{A^2}{S} \sin^2 \theta_i.$$

De modo que $\delta \theta_i = (2/S)^{1/2} A \sin \theta_i$, e usando $\sin \theta_i = \lambda \Delta \theta_i / \Delta y$, vemos que (2.1.38) corresponde a um deslocamento $\Delta y = (2S)^{1/2} \lambda A$ da parede.

A inclusão de termos que levem em conta a rigidez da parede (Winter, 1961) traz como consequência o aparecimento de um pequeno "gap" no espectro de magnons de superfície. No nosso trabalho, desprezaremos as pequenas modificações nas funções de onda dos magnons devido a essas correções.

Assim, usaremos as seguintes relações de dispersão e funções de onda:

(magnons de superfície) $E_{\vec{Q}} = 2JSa^2Q^2 + \Delta s$,

$$e \quad \phi_{\vec{Q}} = \frac{A}{\cosh(y/\lambda)} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}}, \quad (2.1.39)$$

(magnons de volume) $E_{\vec{q}} = 2JSa^2q^2 + \Delta v$,

$$e \quad \psi_{\vec{q}} = B e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} [\tanh(y/\lambda) + i\lambda q_y] \quad (2.1.40)$$

Para o Fe, estima-se (Winter 1961) que $\Delta s \equiv K_B T_S$, com $T_S = 3,8 \times 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{K}$, e $\Delta v \equiv K_B T_V$, com $T_V = 10^{-2} \text{ } ^\circ\text{K}$.

As constantes A e B são obtidas impondo-se a condição de normalização $\int \phi(\vec{r}) d^3r = \int \psi(\vec{r}) d^3r = AL$, onde A é a área da parede e L o comprimento da amostra. Assim, obtemos:

$$A = \left[\frac{L/2\lambda}{\tanh(L/2\lambda)} \right]^{1/2}, \quad (2.1.41)$$

$$e \quad B = \left[\frac{L/2\lambda}{(L/2\lambda)(1 + \lambda^2 q_y^2) - \tanh(L/2\lambda)} \right]^{1/2}. \quad (2.1.42)$$

De posse dessas relações, iremos a seguir determinar a resistividade devido à interação elétron-magnon. Consideraremos apenas a contribuição dos magnons de volume.

2.2 - Cálculo da Resistividade

A Hamiltoniana (1.2.7) que descreve o nosso modelo de spins localizados em interação com os elétrons de condução pode ser reescrita em termos de operadores de magnons como:

$$H = \sum_{\vec{k}s} E_{\vec{k}s} C_{\vec{k}s}^+ C_{\vec{k}s} + \sum_{\vec{q}} \left(\hbar \omega_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} - \frac{J}{n_R} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \vec{S}(-\vec{p}) \cdot S_{C\vec{k}}(\vec{p}), \quad (2.2.1)$$

onde $b_{\vec{q}}^+$ e $b_{\vec{q}}$ são os operadores de criação e destruição de magnons de energia $E_{\vec{q}} = \hbar \omega_{\vec{q}}$, respectivamente.

O último termo em (2.2.1) representa a Hamiltoniana, H_{int} , de interação elétron-magnon. O operador $\vec{S}(-\vec{p})$, definido para o caso discreto como $\vec{S}(-\vec{p}) = \sum_{\vec{n}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{R}_n} \vec{S}_n$, é agora escrito em termos dos operadores de campos de magnons como:

$$S^+(-\vec{p}) = \frac{(2S)^{1/2}}{\Omega_0} \sum_{\vec{q}} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \phi_{\vec{q}}(\vec{r}) a_{\vec{q}}, \quad (2.2.2)$$

$$\vec{S}^-(\vec{p}) = \frac{(2S)^{1/2}}{\Omega_0} \sum_{\vec{q}} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{r}) a_{\vec{q}}^+, \quad (2.2.3)$$

e

$$S^z(-\vec{p}) = NS \delta_{\vec{p}, 0} - \frac{2S}{\Omega_0} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{q}'}(\vec{r}) b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}'}, \quad (2.2.4)$$

onde $\Omega_0 = (n_R)^{-1}$ é o volume ocupado por um ponto da rede.

Considerando somente processos que envolvam criação e destruição de apenas um magnon de volume, podemos des

prezar o segundo termo de (2.2.4). Usando a identidade $\vec{a} \cdot \vec{b} = \frac{1}{2} (a^+ b^- + a^- b^+) + a^z b^z$, e calculando as integrais acima (apêndice 1) com as funções de onda obtidas na seção anterior, podemos escrever a Hamiltoniana H_{int} na forma:

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, a_y} V(q_y, a_y) C_{\vec{k}-\vec{q}-a_y}^+ C_{\vec{k},+} a_{\vec{q}}^+ + H.C.,$$

onde

$$V(q_y, a_y) = iJ\Omega(S/2)^{1/2} \left[\frac{L/2\lambda}{L/2\lambda(1+\lambda^2 q_y^2) - \tanh(L/2\lambda)} \right]^{1/2} \{ \lambda q_y \delta a_{y,0} + \frac{2}{La_y} \left[\frac{\pi \lambda a_y / 2}{\sinh(\pi \lambda a_y / 2)} - \cos(La_y/2) \right] \}, \quad (2.2.6)$$

Ω é o volume da amostra, e L seu comprimento perpendicular à parede.

Devemos notar que a Hamiltoniana (2.2.5) descreve dois processos de espalhamento distintos. Um deles, dado pelo termo que contém $\delta a_{y,0}$, conserva o momento, e é devido à parte homogênea das funções de onda dos magnons de volume. O outro, corresponde a possibilidade da parede de Bloch poder absorver momento durante o processo. Notamos também que o potencial de interação (2.2.6) depende apenas das componentes do vetor de onda perpendiculares à parede, o que reflete a assimetria do problema nessa direção. Como é usual, o primeiro termo de (2.2.5) está associado a um processo de espalhamento que cria um magnon de volume e o segundo termo (H.C.) a um processo que destrói.

O primeiro termo de (2.2.4) quebra a degenerescência dos níveis de energia dos elétrons de condução com

relação ao spin, introduzindo uma separação $\Delta = 2SJ\Omega$ entre $E_{\vec{k}\uparrow}$ e $E_{\vec{k}\downarrow}$. Essa separação representa a contribuição estática da magnetização do cristal. Com isso, podemos escrever

$$E_{\vec{k}s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + s\Delta \quad \begin{cases} s = + \text{ para spin } \uparrow \\ s = - \text{ para spin } \downarrow \end{cases} \quad (2.2.7)$$

O operador de "corrente" do sistema, $\vec{J} = -e \sum_i \langle \vec{v}_i \rangle$ pode ser escrito como (Ashcroft and Mermin, 1976)

$$J_v = - (e/\hbar) \sum_{\vec{k}, \sigma} (\nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}\sigma})_v C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma}, \quad (2.2.8)$$

onde $-e$ é carga do elétron, e Ω o volume do cristal.

De posse da Hamiltoniana de interação e do operador corrente, podemos agora determinar as correlações necessárias para o cálculo da resistividade (1.1.42).

De acordo com (2.2.8), temos que

$$\langle J_v J_\mu \rangle = (e/\hbar)^2 \sum_{\substack{\vec{k}, \sigma \\ \vec{k}', \sigma'}} E_{\vec{k}\sigma, v} E_{\vec{k}'\sigma', \mu} \langle C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}'\sigma'}^+ C_{\vec{k}'\sigma'} \rangle, \quad (2.2.9)$$

onde usamos a notação $E_{\vec{k}\sigma, v} = (\nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}\sigma})_v$.

Usando o teorema de Wick-Bloch - de Dominiciis - (Tyablikov, 1967), podemos escrever (apêndice 2).

$$\langle C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}'\sigma'}^+ C_{\vec{k}'\sigma'} \rangle = f_{\vec{k}\sigma} f_{\vec{k}'\sigma'} + \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} f_{\vec{k}\sigma} (1 - f_{\vec{k}\sigma}), \quad (2.2.10)$$

onde $f_a = \{1 + \exp [\beta(E_a - E_F)]\}^{-1}$ é função de Fermi-Dirac.

Devido a simetria, por estarmos considerando a aproximação de elétrons livres, e portanto superfícies esféricas de mesma energia, o primeiro termo de (2.2.10) não contribui para a somatória em (2.2.9).

Usando a aproximação, (Ashcroft and Mermin, 1976) válida com uma precisão da ordem de $(K_B T/E_F)^2$,

$$f_a(1 - f_a) \approx K_B T \delta(E_a - E_F), \quad (2.2.11)$$

em (2.2.10), e levando em (2.2.9), obtemos que

$$\langle J_\nu J_\mu \rangle = k_B T (e/\hbar)^2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma,\nu} E_{k\sigma,\mu} \delta(E_{k\sigma} - E_F). \quad (2.2.12)$$

Fazendo a aproximação de contínuo, $\sum_k \rightarrow \Omega/(2\pi)^3 \int d^3k$, e calculando a integral, obtemos (apêndice 2).

$$\langle J_\nu J_\mu \rangle = k_B T e^2 \frac{N}{m} \delta_{\mu\nu}, \quad (2.2.13)$$

onde N é o número total dos elétrons de condução, e m a massa do elétron.

Devemos agora calcular os comutadores de J_ν com a transformada de Fourier, $H_{int}^{(+\omega)}$, da Hamiltoniana de interação (2.2.5). Para isso, usando a identidade de operadores (Merzbacher, 1970), $e^A B e^{-A} = e^{\gamma} B$ (se $[A, B] = \gamma B$), e as relações de comutação $[C_a^\dagger C_a, C_a^\dagger] = C_a^\dagger$ e $[C_a^\dagger C_a, C_a] = -C_a$, válidas tanto para fermions quanto para bosons, obtemos que,

$$C_a^\dagger(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_a t\right) C_a^\dagger, \quad (2.2.14)$$

e

$$C_a(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_a t\right) C_a, \quad (2.2.15)$$

o mesmo valendo para os operadores de magnons $a_q^+(t)$ e $a_q(t)$. Desse modo, a transformada de Fourier $H_{int}(\pm\omega)$ vem dada por

$$H_{int}(\pm\omega) = \sum_{k,k'} \hbar V(q_y, a_y) \{ \delta(\hbar\omega_q + E_{k',\uparrow} - E_{k,\uparrow} \pm \hbar\omega) C_{k',\uparrow}^+ C_{k,\uparrow} a_q^+ + \delta(E_{k,\uparrow} - E_{k',\uparrow} - \hbar\omega_q \pm \hbar\omega) C_{k',\uparrow} C_{k,\uparrow}^+ a_q \} , \quad (2.2.16)$$

$k' \equiv \vec{k}' = \vec{k} - \vec{q} - a_y \hat{y}$, e $\delta(x)$ a função delta de Dirac.

Usando novamente o teorema de Wick-Block de Dominicis, obtemos (apêndice 3) finalmente

$$\begin{aligned} & \langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle \Big|_{\omega=0} (2e^2 \hbar^3 \tau / \pi m^2) \\ & \sum_{k,k'} V^2(q_y, a_y) (k'_y + k_y)^2 \{ \delta(\hbar\omega_q + E_{k',\uparrow} - E_{k,\uparrow}) \\ & f_{k,\uparrow} (1 - f_{k',\uparrow}) (N_q + 1) + \delta(E_{k,\uparrow} - E_{k',\uparrow} - \hbar\omega_q) \\ & f_{k',\uparrow} (1 - f_{k,\uparrow}) N_q \} , \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

onde $f_a = \{1 + \exp [\beta(E_a - E_F)]\}^{-1}$ é, a função de distribuição de Fermi-Dirac, $N_q = [1 - \exp(\beta\hbar\omega_q)]^{-1}$, a função de distribuição de Bose-Einstein, e τ o tempo de vida dos magnons, o qual deve ser grande (exatidão elementar bem definida). O resultado final é dado em termos da relação (2.2.17) por unidade de tempo (Cabrera, 1976).

Usando a aproximação:

$$f_a (1 - f_b) \delta(E_a - E_b \pm X) \approx 2k_B T \delta(E_a - E_F)$$

$$f(E_F \pm X) \exp(\pm \beta X) , \quad (2.2.18)$$

a relação de dispersão de magnons de volume (2.1.40), e fazendo as integrais no espaço de momentos (apêndice 4) obtemos as expressões para a resistividade:

$$\rho_{\parallel} = C_1 T^2 - C_2 T^{3/2} + C_3 T - C_4 T^{1/2} , \quad (2.2.19)$$

e

$$\rho_{\perp} = C_1 T^2 - C_3 T + C_4 T^{1/2} , \quad (2.2.20)$$

onde $\rho_{\parallel}$ e $\rho_{\perp}$ são as resistividades medidas nas direções paralela e perpendicular à parede de Bloch, respectivamente.

Para uma amostra típica de Ferro (Cabrera, 1977), as constantes C_{1-4} são dadas por:

$$C_1 = 9,23 \times 10^{-4} (I_1/T_C^2) \mu\Omega \text{ cm } ^\circ K^{-2} \quad (2.2.21)$$

$$C_2 = 4,46 \times 10^{-1} (T_C/\chi^2)^{1/2} (I_2/I_1) C_1 \mu\Omega \text{ cm } ^\circ K^{-3/2} \quad (2.2.22)$$

$$C_3 = 2,84 \times 10^{-1} (T_C/\chi^2) (I_3/I_1) C_1 \mu\Omega \text{ cm } ^\circ K^{-1} \quad (2.2.23)$$

$$C_4 = 4,46 \times 10^{-1} (T_C/\chi^2)^{3/2} (I_4/I_1) C_1 \mu\Omega \text{ cm } ^\circ K^{-1/2} \quad (2.2.24)$$

onde $\chi = \lambda/a$ é a razão entre a largura média da parede e o parâmetro de rede, T_C a temperatura Curie ($\approx 10^3$ °K), e I_{1-4} integrais (apêndice 4) cujas razões, estão mostradas na tabela 1.

2.3 - Conclusões

Devido à presença da parede de Bloch, a dependência da resistividade com a temperatura, obtida na seção anterior, mostra um comportamento bastante diferente daquele apresentado por um ferromagneto uniforme. A resistividade é anisotrópica, e não possui apenas o termo quadrático característico do caso uniforme.

Os termos negativos presentes na resistividade são devidos à forma da função de onda dos magnons de volume. Na região da parede, a probabilidade de se encontrar um magnon de volume é menor do que no caso uniforme; e assim, esperamos que a resistividade seja menor. Analisando os termos não quadráticos da parte $\rho_1 = C_1 T^2 - C_3 T + C_4 T^{1/2}$, observamos que a função $-C_3 T + C_4 T^{1/2}$ é inicialmente positiva, se anula para $T_0 = (C_4/C_3)^2$, e a partir daí se torna negativa. Supondo $T_C = 1000$ °K, e $\chi = 100$, obtemos $T_0 \approx 2,6 \times 10^{-2}$ °K para $\epsilon_1 = 20$ e $T_0 \approx 40$ °K para $\epsilon_1 = 10^{-3}$. Desse modo, para ϵ_1 suficientemente grande obtemos uma resistividade menor que no caso uniforme, a partir de temperaturas da ordem do "gap" do espectro de magnons de volume ($T_g \approx 10^{-2}$ °K).

No caso limite $\lambda \rightarrow \infty$, o nosso resultado fornece uma resistividade isotrópica e com dependência quadrática como era de se esperar, já que esse limite corresponde a termos um ferromagneto uniforme. Uma estimativa da constante C_1 do termo quadrático fornece um valor bem menor do que o obtido experimentalmente (Beitchman et al, 1970). Isso se deve à

aproximação de elétrons livres para a banda s. No Fe essa aproximação não é boa devido a hibridização com a banda d, o que acarreta uma massa efetiva bem maior para os elétrons s.

Os valores máximos que podem tomar C_1 , C_2 , C_3 e C_4 , para diversos valores do parâmetro χ , são mostrados na tabela 1.

Comparando C_2 e C_4 com os correspondentes fatores no caso de magnons de superfície (Cabrera, 1977), obtemos a tabela 2.

Como observamos da tabela 2, as contribuições de mesma dependência em T são dominadas pelos magnons de superfície para valores de $\chi \leq 100$. Para valores de $\chi > 100$ os magnons de volume passam a dominar já que as razões $C_{2v}/C_{2s} = C_{4v}/C_{4s}$ são proporcionais a χ . No entanto, a partir de $\chi = 100$ a contribuição quadrática, que não depende de χ , passa a dominar, produzindo um comportamento do tipo ferromagneto uniforme.

Finalmente, devemos mencionar que existe na literatura um trabalho (Khlebopros et al, 1974) semelhante. Entretanto, parece haver um erro nesse trabalho, já que nele a resistividade é isotrópica e apresenta apenas dependências em T^2 e $T^{3/2}$.

CAPÍTULO III

Magnetoresistividade em Estruturas Helicoidais de Spins.

Consideremos o mesmo modelo usado no capítulo anterior. Entretanto, suponhamos agora que as médias térmicas dos spins localizados obedeçam às seguintes equações:

$$\begin{aligned} \langle S_n^x \rangle &= \langle S_0^x \rangle \cos (\vec{Q} \cdot \vec{R}_n) \\ \langle S_n^y \rangle &= \langle S_0^y \rangle \sin (\vec{Q} \cdot \vec{R}_n) \\ \langle S_n^z \rangle &= \langle S_0^z \rangle \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $\langle S_0 \rangle$ é a média térmica de um ponto da rede tomado como origem, $R_n \equiv (x_n, y_n, n_a)$ o vetor de posição do n -ésimo ponto, e $\vec{Q}$ um vetor cujas componentes no sistema de coordenadas (x, y, z) são $(0, 0, \phi/a)$. Podemos visualizar essa estrutura como um conjunto de planos perpendiculares ao eixo z , em cada um dos quais as médias dos spins são paralelas, havendo uma diferença de ângulo ϕ entre as direções dessas médias em dois planos consecutivos.

A possibilidade do aparecimento de estruturas desse tipo será estudada na seção 3.2. Ela se deve, como veremos, à forma particular da Hamiltoniana de interação entre os spins localizados. Por ora, como iremos trabalhar na aproximação de campo molecular, não nos interessa a forma explícita dessa interação. Supomos apenas que podemos escrever essa interação como $H = -\mu \sum_n \vec{H}_n \cdot \vec{S}_n$, onde $\vec{H}_n$ é o campo efetivo que age sobre o spin $\vec{S}_n$.

Desse modo, incluindo os elétrons de condução e a interação entre eles e os spins localizados, a Hamiltoniana

total do sistema pode ser escrita como (ver equação 1.2.7).

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^{\dagger} C_{\vec{k}} - \mu \sum_n \vec{H}_n \cdot \vec{S}_n - \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \vec{S}(-\vec{q}) \cdot \vec{S}(\vec{k}, \vec{q}), \quad (3.1)$$

onde $\vec{S}(-\vec{q}) = \sum_n e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \vec{S}_n$, e $\vec{S}(\vec{k}, \vec{q})$ é dado por (1.2.6).

3.1 - Cálculo da Magnetoresistividade

Nesta secção iremos determinar a resistividade na presença de um campo magnético. Desprezaremos os efeitos diamagnéticos sobre os elétrons de condução. Essa é uma boa aproximação desde que o tempo médio de colisões seja bem menor que o período de ciclotron ($\omega_c \tau \ll 1$). Desse modo, a energia E_k dos elétrons de condução será dada por:

$$E_{\vec{k}s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + s \mu_B H_e \quad (3.1.1)$$

onde:

$$\begin{aligned} s &= +1 \text{ para spin } \uparrow && (\text{sentido do campo}) \\ s &= -1 \text{ para spin } \downarrow && (\text{sentido contrário ao campo}), \\ \mu_B &= e\hbar/2mc && (\text{magneton de Bohr}), \\ H_e &&& (\text{o campo magnético externo}). \end{aligned}$$

A Hamiltoniana de interação, dada pelo último termo em (3.1), quando escrita na representação de interação, apresenta a seguinte forma:

$$H_{\text{int}}(t) = - \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \vec{S}(-\vec{q}, t) \cdot \vec{S}(\vec{k}, \vec{q}, t), \quad (3.1.2)$$

onde $\vec{S}(\vec{k}, \vec{q}, t)$ representa o spin do elétron de condução, e tem as componentes:

$$s^+(q,t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_{k+q} - E_k + 2D)t \right] s^+(k,q) \quad (3.1.3)$$

$$s^-(q,t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_{k+q} - E_k - 2D)t \right] s^-(k,q) \quad (3.1.4)$$

e

$$s^z(q,t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_{k+q} - E_k)t \right] s^z(k,q) , \quad (3.1.5)$$

onde $D = \mu_B H_e$. Os resultados acima são obtidos, usando-se a representação de $\vec{s}(k,q)$ dadas por (1.2.6), e a identidade $e^A B e^{-A} = e^{\gamma} B$, se $[A, B] = \gamma$ (γ = número complexo).

A transformada de Fourier de (3.1.2) é facilmente obtida usando-se o teorema de deslocamento para transformada de Fourier (Mathews and Walker; 1970), e é dada por:

$$H_{int}(\pm\omega) = - \frac{J}{N} \sum_{k,q} \frac{1}{2} [S^+(-q, \omega_{1\pm}) s^-(k,q) + \\ + S^-(-q, \omega_{2\pm}) s^+(k,q)] + S^z(-q, \omega_{3\pm}) s^z(k,q), \quad (3.1.6)$$

onde usamos a notação:

$$\omega_{1\pm} = \pm\omega + \hbar^{-1}(E_{k+q} - E_k - 2D), \quad (3.1.7)$$

$$\omega_{2\pm} = \pm\omega + \hbar^{-1}(E_{k+q} - E_k + 2D), \quad (3.1.8)$$

$$\omega_{3\pm} = \pm\omega + \hbar^{-1}(E_{k+q} - E_k), \quad (3.1.9)$$

e

$$S(-q \pm \omega_j) = F_{\omega_j} [S(-q,t)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_j t) S(-q,t) dt. \quad (3.1.10)$$

Como no capítulo anterior, o operador de corrente do sistema é dado por:

$$J_v = - \frac{e}{\hbar} \sum_{k,s} (\nabla_k E_{ks})_v C_{ks}^+ C_{ks}. \quad (3.1.11)$$

Calculando-se o comutador de J_v com $H_{int}(\pm\omega)$, obtemos (apêndice 5).

$$[J_v, H_{int}(\pm\omega)] = \frac{J_{he}}{Nm} \sum_{k,q} q_v \frac{1}{2} [S^+(-q, \omega_{1\pm}) s^-(k,q) + S^-(-q, \omega_{2\pm}) s^+(k,q)] + S^Z(-q, \omega_{3\pm}) s^Z(k,q) \quad (3.1.12)$$

O valor médio do produto desses comutadores, pode ser separado no produto de duas médias ($[S, s] = 0$) uma dos operadores de spin localizados, e outra dos elétrons de condução. Calculando-se a média sobre os elétrons de condução - (apêndice 6) ficamos com:

$$\begin{aligned} \langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle &= \left[\frac{J_{he}}{Nm} \right]^2 \sum_{k,q} q_v^2 [f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) \\ &\langle S^+(-q, \omega_{1+}) S^-(q, -\omega_{1+}) \rangle + f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) \langle S^-(-q, \omega_{2+}) S^+(q, -\omega_{2+}) \rangle \\ &+ [f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) + f_{k+q\downarrow} (1-f_{k\downarrow})] \langle S^Z(-q, \omega_{3+}) S^Z(q, -\omega_{3+}) \rangle] \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

As correlações que aparecem em (3.1.13), são dados por:

$$\begin{aligned} \langle S^a(\omega_j) S^b(-\omega_j) \rangle &= \langle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_j t} S^a(t) dt \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_j t} \\ S^b(t') dt' \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_j t} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_j t'} \right. \\ &\left. \langle S^a(t) S^b(t') \rangle dt' \right] dt. \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

Calculando-se as correlações temporais para um da do ponto $\vec{R}_0$ da rede (apêndice 6), obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle S_0^+(t) S_0^-(t') \rangle &= \langle S^2 \rangle \sin^2 \theta + [S(S+1) - \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \\
&\sin^4(\theta/2) \exp(-i\omega_0 \tau) + [S(S+1) + \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \cos^4(\theta/2) \\
&\exp(i\omega_0 \tau), \quad (3.1.15)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_0^-(t) S_0^+(t') \rangle &= \langle S^2 \rangle \sin^2 \theta + [S(S+1) + \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \\
&\sin^4(\theta/2) \exp(i\omega_0 \tau) + [S(S+1) - \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \cos^4(\theta/2) \\
&\exp(-i\omega_0 \tau), \quad (3.1.16)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_0^z(t) S_0^z(t') \rangle &= \langle S^2 \rangle \cos^2 \theta + \frac{\sin^2 \theta}{4} \left[[S(S+1) + \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \right. \\
&\left. \exp(i\omega_0 \tau) + [S(S+1) - \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \exp(-i\omega_0 \tau) \right], \quad (3.1.17)
\end{aligned}$$

onde $S_0^\pm = S_0^x \pm i S_0^y$ são as componentes do spin do ponto $\vec{R}_0$ no sistema de coordenadas (x,y,z), S a componente do spin desse ponto na direção do campo molecular, $\vec{H}_0 = H_0 \hat{Z}$, que sobre ele atua, θ o ângulo que $\vec{H}_0$ faz com o eixo z ($\cos \theta = \hat{Z} \cdot \hat{Z}$),

$$\tau = t' - t, \quad \text{e} \quad \omega_0 = \mu H_0 / \hbar. \quad (3.1.18)$$

Usando a definição, $\vec{S}(-q) = \sum_n \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n) \vec{S}_n$ vemos que as correlações em (3.1.13) são dadas por

$$\langle S^a(-q) S^b(q) \rangle = \sum_{n,n'} \exp[i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})] \langle S_n^a S_{n'}^b \rangle, \quad (3.1.19)$$

e como estamos trabalhando na aproximação de campo molecular, não há correlações entre pontos diferentes da rede, e as correlações em um mesmo ponto são todas iguais. Assim, podemos escrever

$$\langle S^a(-q) S^b(q) \rangle = \sum_{n \neq n'} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle S_n^a \rangle \langle S_{n'}^b \rangle + N \langle S_0^a S_0^b \rangle. \quad (3.1.20)$$

Para o tipo de estrutura periódica definido por (3.1), após fazermos as somas em (3.1.20) e a transformada de Fourier (3.1.14), obtemos finalmente (apêndice 6) que

$$\begin{aligned} \langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle &= \left[\frac{Jhe}{Nm} \right]^2 \frac{N}{2\pi} \sum_{k,q} q_v^2 \\ &\left[\sin^2 \theta \left[[D(k,q) \delta(\omega_1) + E(k,q) \delta(\omega_2)] [\langle S^2 \rangle + \langle S \rangle^2 (N\delta_{q,Q} - 1)] + \right. \right. \\ &\frac{1}{4} F(k,q) [B(S) \delta(\omega_3 - \omega_0) + C(S) \delta(\omega_3 + \omega_0)] \left. \right] + \cos^2 \theta (\langle S^2 \rangle - \\ &- \langle S \rangle^2) F(k,q) \delta(\omega_3) + \sin^4(\theta/2) [B(S)D(k,q) \delta(\omega_1 - \omega_0) + \\ &+ C(S) E(k,q) \delta(\omega_2 + \omega_0)] + \cos^4(\theta/2) [C(S)D(k,q) \delta(\omega_1 + \omega_0) + \\ &+ B(S) E(k,q) \delta(\omega_2 - \omega_0)] \left. \right], \quad (3.1.21) \end{aligned}$$

onde

$$D(k,q) = f_{k+q,\uparrow} (1 - f_{k\uparrow}), \quad (3.1.21.a)$$

$$E(k, q) = f_{k+q, \uparrow} (1 - f_{k\downarrow}) \quad (3.1.21b)$$

$$F(k, q) = f_{k+q, \uparrow} (1 - f_{k\uparrow}) + f_{k+q, \downarrow} (1 - f_{k\downarrow}) \quad (3.1.21c)$$

$$B(S) = S(S + 1) - \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle \quad (3.1.21d)$$

$$C(S) = S(S + 1) + \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle \quad (3.1.21e)$$

Fazendo as integrais em $\vec{k}$ e $\vec{q}$ (apêndice 6) podemos escrever (3.1.21) como

$$\begin{aligned} \langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle &= C [\sin^2 \theta [2 E_F (E_F^2 - b^2 H_e^2)^{1/2} \\ &(\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2) + F_1(H_0, -, H_e) + F_1(-H_0, +, H_e) + F_1(H_0, -, -H_e) + \\ &F_1(-H_0, +, -H_e)] + 2 \cos^2 \theta (E_F^2 + b^2 H_e^2) (\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2) + \\ &\sin^4 (\theta/2) [F_2(H_0, -, H_e) + F_2(-H_0, +, -H_e)] + \cos^4 (\theta/2) \\ &[F_2(H_0, -, -H_e) + F_2(-H_0, +, H_e)]], \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

onde

$$C = J^2 e^2 V_m^2 k_B T / 3\pi^5 N \hbar^3 \quad (3.1.22a)$$

$$F_1(H_0, \pm, H_e) = \frac{1}{4} (E_F - bH_e)^{1/2} f(E_F - \mu H_0) (E_F - bH_e - \mu H_0)^{1/2}$$

$$[2 (E_F - bH_e) - \mu H_0] [S(S+1) \pm \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle], \quad (3.1.22b)$$

e

$$F_2(H_0, \pm, H_e) = (E_F - bH_e)^{1/2} f(E_F - \mu H_0) (E_F + bH_e - \mu H_0)^{1/2}$$

$$(2 E_F - \mu H_0) [S(S+1) \pm \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] . \quad (3.1.22c)$$

Desprezando termos da ordem de (bH_e/E_F) e $(\mu H_0/E_F)$ obtemos

$$F_1(H_0, \pm, H_e) \approx \frac{1}{2} E_F^2 f(E_F - \mu H_0) [S(S+1) \pm \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle], \quad (3.1.23)$$

e

$$F_2(H_0, \pm, H_e) \approx 2 E_F^2 f(E_F - \mu H_0) [S(S+1) \pm \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \quad (3.1.24)$$

Com essas aproximações, podemos escrever a resistividade como

$$\begin{aligned} \rho_{VV} = C [2E_F^2 (\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2) + F_2(H_0, +, 0) + F_2(-H_0, -, 0) + \\ + \frac{3}{4} (\hbar^4/m^2) Q_V \delta_{V,z} \langle S \rangle^2 \sin^2 \theta] \end{aligned}$$

Somando os termos em F_2 , e sendo

$$f(E_F + \mu H_0) + f(E_F - \mu H_0) = 1, \quad (3.1.26)$$

e

$$f(E_F + \mu H_0) - f(E_F - \mu H_0) = - \tanh(\mu H_0 / 2 k_B T), \quad (3.1.27)$$

obtemos que

$$\begin{aligned} F_2(H_0, +, 0) + F_2(-H_0, -, 0) &= 2E_F [S(S+1) - \langle S^2 \rangle \\ &- \langle S \rangle \tanh(\mu H_0 / 2 k_B T)] . \end{aligned} \quad (3.1.28)$$

Finalmente, a resistividade é dada por

$$\begin{aligned} \rho_{VV} &= 2CE_F^2 [S(S+1) - \langle S \rangle^2 - \langle S \rangle \tanh(\mu H_0 / 2 k_B T) \\ &+ \frac{3}{4} (n\hbar^4 / m^2) Q_V \delta_{V,z} \langle S \rangle^2 \sin^2 \theta] . \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

A magnetoresistividade é definida por

$$\Delta \rho_{VV}(T, H) = \frac{\rho_{VV}(T, H_e) - \rho_{VV}(T, 0)}{\rho_{VV}(T, 0)} . \quad (3.1.28)$$

Na seção seguinte, faremos um modelo para determinar o campo efetivo em metais de Terras Raras.

3.2 - Aplicação a um modelo de Terra Rara

A estrutura eletrônica dos átomos dos elementos chamados Terras Raras é da forma $[Xe] 4f^n 5d^m s^2$ ($m=0$, ou 1), onde $[Xe]$ é a estrutura de camadas fechadas do gás nobre Xênonio. De acordo com o modelo da secção 1.2, os elétrons das camadas d e s vão constituir as bandas de condução, deixando ions tri-positivas, com camadas $4f$ incompletas, que formam os momentos magnéticos localizados da rede.

A experiência mostra que esses elementos se cristalizam na forma hexagonal perfeitamente compacta. Para os valores medidos dos parâmetros da rede, os cálculos das funções de onda dos orbitais $4f$ mostram que a sobreposição entre ions vizinhos é pequena. (Freeman, 1972)

Dessa forma, o mecanismo capaz de fornecer uma interação entre os spins localizados não é o de troca direta, mas sim o de troca indireta via interação "s-f". De facto, por teoria de perturbação em 2^a ordem, chega-se (Kasuya, 1956) a uma interação efetiva entre os spins localizados (interação de Rüderman-Kittel-Kasuya-Yosida) da forma

$$H_{ff'} = - \sum_{\ell, \ell'} j(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'}) \vec{S}_\ell \cdot \vec{S}_{\ell'} \quad (3.2.1)$$

onde

$$j(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'}) = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} |j_{sf}(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \frac{f_{\vec{k}}(1-f_{\vec{k}'})}{\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})}$$

$$(3.2.2)$$

O cálculo analítico fechado de $j(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})$ só é possível se fazemos várias aproximações. Assim, consideramos a aproximação de elétrons livres para as bandas de condução, a não sobreposição dos orbitais atômicos 4f, e consideramos $j_{sf}(\vec{k}, \vec{k}') = \text{constante} = j$. Com isso, obtemos a expressão

$$j(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'}) = 9\pi(j^2/\epsilon_F) F(2K_F |\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'}|) \quad (3.2.3)$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi, e

$$F(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4} \quad (3.2.4)$$

Obtemos assim uma interação de longo alcance e oscilante entre os spins localizados. A transformada de Fourier dessa interação,

$$j(\vec{q}) = \sum_{\ell'} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})} j(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'}) , \quad (3.2.5)$$

levando em conta a periodicidade do potencial da estrutura h.c.p., pode apresentar um máximo para $\vec{q} \neq 0$ (Yosida e Watabe, 1962). É essa particularidade do potencial de interação, como veremos mais adiante, que possibilita o aparecimento de estruturas helicoidais de spins.

Os elétrons localizados na camada 4f de um determinado íon interage também com os outros íons da rede. Em primeira aproximação, consideramos apenas a interação com os íons mais próximos.

Desprezando a sobreposição de funções de onda entre os íons, podemos escrever o potencial eletrostático na região do íon em questão, como solução da equação de Laplace $\nabla^2 V = 0$ com a simetria própria do cristal. Tomando o íon para origem de um sistema de coordenadas, o potencial é dado por

$$V(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_{\ell}^m r^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) . \quad (3.2.6)$$

Esse potencial pode ser reescrito em termos de certos polinômios proporcionais a combinações (3.2.7) lineares de Y_{ℓ}^m e $Y_{\ell}^{-m} = (-1)^m Y_{\ell}^{m*}$. A aplicação do teorema de Wigner-Eckart permite finalmente escrevermos o potencial em termos de operadores equivalentes, substituindo os tensoriais cartesianos por operadores de momento angular, (Abragam and Bleaner 1970; Hutchings, 1964) como

$$V = \sum_{\ell, m} V_{\ell}^m O_{\ell}^m(\vec{S}) \quad (3.2.7)$$

A forma final do potencial vai depender de simetrias da rede, definindo a forma de $O_{\ell}^m(\vec{S})$, e do estado eletrônico em estudo, que se reflete em V_{ℓ}^m . Para a simetria h.c.p. das Terras Raras, e para o estado eletrônico 4f, os únicos termos diferentes de zero (a menos de V_0^0 que é desprezado por dar uma contribuição constante à Hamiltoniana) são V_2^0 , V_4^0 , V_6^0 e V_6^6 . Para usos futuros, é conveniente agruparmos os termos em (3.2.7) de mesma potência das componentes do momento angular. Assim, a Hamiltoniana de campo cristalino pode

ser escrita na forma

$$H_{cc}(\vec{S}_i) = \sum_i V_2 (S_i^Y)^2 + V_4 (S_i^Y)^4 + V_6 (S_i^Y)^6 + V_6^6 [(S_i^+)^6 + (S_i^-)^6] , \quad (3.2.8)$$

onde S_i^Y é a componente de $\vec{S}$ no eixo cristalográfico c (Ver fig. 2) $S_i^\pm = S_i^\alpha \pm i S_i^\beta$, as componentes no plano perpendicular a c (chamado plano basal).

No nosso modelo consideramos apenas os termos de 2^a e 4^a ordem de H_{cc} . Assim, a Hamiltoniana que usaremos para descrever o sistema de spins localizados é

$$H_s = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \left[\frac{K_2}{2} (S_i^Y)^2 + \frac{K_4}{4} (S_i^Y)^4 \right] , \quad (3.2.9)$$

onde $K_2 = -2V_2$, e $K_4 = -4V_4$.

(os fatores numéricos $(-1/2)$ e $(-1/4)$ são introduzidos para simplificar fórmulas futuras).

Podemos reescrever (3.2.9) na forma

$$\begin{aligned} H_s = & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle) \cdot (\vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle) - \\ & \sum_{i \neq j} V_{ij} S_i^+ \langle S_j^+ \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle S_i^+ \rangle \cdot \langle S_j^+ \rangle \\ & - \frac{K_2}{2} \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^2 - K_2 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle + \\ & - \frac{K_2}{2} \sum_i \langle S_i^Y \rangle^2 - \frac{K_4}{4} \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^4 - \\ & - K_4 \sum_i (S_i^Y)^3 \langle S_i^Y \rangle + \frac{3}{2} K_4 \sum_i (S_i^Y)^2 \langle S_i^Y \rangle^2 - \end{aligned}$$

$$- K_4 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle^3 + \frac{1}{4} K_4 \sum_i \langle S_i^Y \rangle^4 . \quad (3.2.10)$$

Desenvolvendo novamente os termos $(S_i^Y)^2$ e $(S_i^Y)^3$ obtemos

$$\begin{aligned} H_S = & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} (S_i^{\vec{Y}} - \langle S_i^{\vec{Y}} \rangle) \cdot (S_j^{\vec{Y}} - \langle S_j^{\vec{Y}} \rangle) - \sum_{i \neq j} V_{ij} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle - \frac{K_2}{2} \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^2 - \\ & - K_2 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle + \frac{K_2}{2} \sum_i \langle S_i^Y \rangle^2 - \frac{K_4}{4} \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^4 \\ & - K_4 \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^3 \langle S_i^Y \rangle - \frac{3}{2} K_4 \sum_i (S_i^Y - \langle S_i^Y \rangle)^2 \langle S_i^Y \rangle^2 \\ & - K_4 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle^3 + \frac{3}{4} K_4 \sum_i \langle S_i^Y \rangle^4 . \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

Na aproximação de campo molecular desprezamos as flutuações $\langle (S - \langle S \rangle)^n \rangle$, de modo que tomaremos para Hamiltoniana do sistema

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{i \neq j} V_{ij} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle \\ & - K_2 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle + \frac{K_2}{2} \sum_i \langle S_i^Y \rangle^2 - K_4 \sum_i S_i^Y \langle S_i^Y \rangle^3 \\ & + \frac{3}{4} K_4 \sum_i \langle S_i^Y \rangle^4 . \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Podemos reescrever (3.2.12) na forma

$$H = C - \sum_i \mu \vec{H}_i \cdot \vec{S}_i, \quad (3.2.13)$$

onde

$$C = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + \frac{K_2}{2} \sum_i \langle S_i^Y \rangle^2 + \frac{3}{4} K_4 \sum_i \langle S_i^Y \rangle^4, \quad e$$

$$\vec{H}_i = \frac{1}{\mu} \left[\sum_j V_{ij} \langle \vec{S}_j \rangle + K_2 \langle S_i^Y \rangle \hat{Y} + K_4 \langle S_i^Y \rangle^3 \hat{Y} \right]. \quad (3.2.14)$$

Como podemos observar de (3.2.12),

$$[H, S_i^2] = [H, \sum_i S_i^2] = 0, \quad (3.2.15)$$

de modo que $\langle S_i^2 \rangle = S(S+1)$, independente do ponto da rede, e $\sum_i \langle S_i^2 \rangle = NS(S+1)$.

Fazendo as transformadas de Fourier:

$$V(\vec{q}) = N^{-1} \sum_j V_{ij} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (3.2.16)$$

e

$$\vec{S}(\vec{q}) = \sum_j \vec{S}_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j}, \quad (3.2.17)$$

podemos escrever a energia média U do sistema como

$$U = \langle H \rangle = - \frac{1}{2} \sum_q V(\vec{q}) \langle \vec{S}(\vec{q}) \rangle \cdot \langle \vec{S}(-\vec{q}) \rangle - \frac{K_2}{2} \langle S^Y(0) \rangle^2 - K_4 \langle S^Y(0) \rangle^4 \quad (3.2.18)$$

Vamos minimizar a energia U para obtermos as estrutu-

ras no equilíbrio térmico. Como veremos, essas estruturas se caracterizam por terem $|\langle \vec{S}_i \rangle| = C^{te}$, independente do ponto da rede e assim, não precisamos considerar as variações na entropia (Cooper, 1972). A condição $\sum_i \langle S_i^2 \rangle = \sum_q \langle \vec{S}(\vec{q}) \rangle \cdot \langle \vec{S}(-\vec{q}) \rangle = C^{te}$ acarreta que o mínimo do primeiro termo é obtido quando se toma apenas a componente de Fourier $V(\vec{Q})$, máxima absoluto de V_{ij} . Esse valor mínimo é $-(1/2)V(\vec{Q}) \langle \vec{S}(\vec{Q}) \rangle \cdot \langle \vec{S}(-\vec{Q}) \rangle$.

Usando a transformação inversa da (3.2.17), obtemos que

$$\langle \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S}(\vec{Q}) \rangle e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} + \langle \vec{S}(-\vec{Q}) \rangle e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i}, \quad (3.2.19)$$

ou seja,

$$\langle S_i^\alpha \rangle = A \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i + \alpha)$$

$$\langle S_i^\beta \rangle = B \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i + \beta) \quad (3.2.19a)$$

$$\langle S_i^\gamma \rangle = C \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i + \gamma)$$

onde A, B, C, α , β e γ são constantes arbitrárias.

As relações (3.2.19) mostram que as componentes de $\langle \vec{S}_i \rangle$, à medida que $\vec{R}_i$ avança na direção $\vec{Q}$, descrevem uma elipse em um plano perpendicular a $\vec{Q}$. A condição $\langle S_i^2 \rangle = C^{te}$ obriga a elipse a se tornar um círculo, de modo que, devemos ter

$$\langle S_i^\alpha \rangle = A \cos (\vec{Q} \cdot \vec{R}_i + \alpha)$$

$$\langle S_i^\beta \rangle = A \sin (\vec{Q} \cdot \vec{R}_i + \alpha) \quad (3.2.20)$$

$$\langle S_i^\gamma \rangle = C$$

A constante C acima é determinada pelos termos de anisotropia, dependendo desses termos, podemos ter uma estrutura tipo cone ($C \neq 0$), ou tipo hélice ($C = 0$), no equilíbrio termodinâmico, para o caso de $\vec{Q} = \phi/a \hat{\gamma}$.

Se o máximo $V(\vec{Q})$ se dá para $\vec{Q} = 0$ teremos uma estrutura ferromagnética. Se $\vec{Q}$ é um ponto no interior da zona de Brillouin, podemos ter as estruturas tipo cone e hélice. Para se determinar qual a estrutura mais estável, devemos minimizar a energia interna com relação ao ângulo θ . De acordo com (3.2.20), a energia interna é dada por

$$\frac{U}{N} = - \frac{1}{2} V(Q) \langle S \rangle \sin^2 \theta - \frac{[K_2 - V(0)]}{2} \langle S \rangle^2 \cos^2 \theta - \mu H_e \langle S \rangle \cos \theta, \quad (3.2.11)$$

onde $\langle S \rangle$ é a média térmica na direção do campo efetivo que atua em cada ponto da rede.

De (3.2.21) obtemos que

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = [V(0) + K_e - V(Q)] \sigma^2 \sin \theta \cos \theta + K_4 \sigma^4 \cos^3 \theta \sin \theta, \quad (3.2.22)$$

onde $u = \frac{U}{N}$, e $\sigma = \langle S \rangle$.

Impondo a condição de mínimo, $\frac{\partial u}{\partial \theta} = 0$, obtemos os tres casos possíveis:

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \sin \theta = 0 & (\text{ferromagnetismo}) \\ \cos \theta = 0 & (\text{héllice}) \\ \cos \theta = \frac{[V(Q) - V(0) - K_2]^{1/2}}{K_4 \sigma^2} & (\text{cone}) \end{cases} \quad (3.2.23)$$

A segunda condição, $\partial^2 u / \partial \theta^2 > 0$, fornece as seguintes condições:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} > 0 \quad \begin{cases} \text{ferromagnetismo: } V(Q) - V(0) - K_2 < K_4 \sigma^2 \\ \text{héllice} & : V(Q) - V(0) - K_2 > 0 \\ \text{cone} & : K_4 < V(Q) - V(0) - K_2 < 0 \end{cases} \quad (3.2.24)$$

A aplicação de um campo magnético modifica essas estruturas de maneiras diferentes, dependendo da direção em que é aplicado. Por exemplo, se o campo é aplicado na direção do eixo-c, isto é, $\vec{H}_e = H_e \hat{\gamma}$, esperamos que as estruturas cônicas e de héllice variem de modo que o ângulo vá diminuindo, até que para um determinado campo crítico a estrutura se torne ferromagnética. Para campos aplicados no plano basal a situação é mais complicada. Nesse caso, esperamos que as estruturas inicialmente se deformem um pouco, depois, a medida que o campo cresce, passemos a ter estrutura em forma de "leques", e finalmente para campos críticos, que dependem da direção no plano basal, a estrutura passe a ser ferromagnética. Existem casos, como por exemplo no Dy, em

que as estruturas mudam diretamente de cone ou hélice para o estado ferromagnético.

Passemos a estudar o caso em que $\vec{H}_e = H_e \hat{\gamma}$. Nesse caso, devemos acrescentar à energia, dada por (3.2.21), o termo $-\mu\vec{H}_e \cdot \sum_i \vec{S}_i$. Com isso, a energia se torna

$$u = -\frac{1}{2} V(Q) \sigma^2 \sin^2 \theta - \frac{1}{2} [V(0) + K_2] \sigma^2 \cos^2 \theta - \frac{1}{4} K_4 \sigma^4 \cos^4 \theta - \mu H_e \sigma \cos \theta. \quad (3.2.25)$$

Minimizando com relação a θ ,

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = [V(0) + K_2 - V(Q)] \sigma^2 \sin \theta \cos \theta + K_4 \sigma^4 \cos^3 \theta \sin \theta + \mu H_e \sigma \sin \theta = 0. \quad (3.2.26)$$

No caso de termos inicialmente uma estrutura cônica ($\sin \theta \neq 0$), obtemos a equação cúbica

$$[V(0) + K_2 - V(Q)] \sigma^2 \cos \theta + K_4 \sigma^4 \cos^3 \theta + \mu H_e = 0. \quad (3.2.27)$$

As raízes de uma equação desse tipo são $x_1 = S_1 + S_2$, $x_2 = -1/2 (S_1 + S_2) + i\sqrt{3}/2 (S_1 - S_2)$, e $x_3 = -1/2 (S_1 + S_2) - i\sqrt{3}/2 (S_1 - S_2)$, onde $S_1 = [r + (q^3 + r^2)^{1/2}]^{1/3}$, e $S_2 = [r - (q^3 + r^2)^{1/2}]^{1/3}$, com $q = -1/3 [V(Q) - V(0) - K_2]/K_4 \sigma^2$, e $r = -1/2 \mu H_e / K_4 \sigma^3$. A solução física é dada por $x_1 = S_1 + S_2$. Enquanto $q^3 + r^2 < 0$, podemos escrever a solução $x_1 = S_1 + S_2$ como $x_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \theta_0 \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{r}{\sqrt{-q^3}} \right) \right]$.

Como esperávamos, a solução (3.2.38) indica uma mudança na estrutura cônica inicial, com o ângulo θ decrescendo a partir de θ_0 , quando $H_e = 0$, até o valor $\theta = \arccos\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \cos \theta_0\right)$, quando $r^2 = -q^3$. A partir daí, $q^3 + r^2 > 0$, e a solução física de (3.2.27) é dada por $x_1 = S_1 + S_2$, até que H_e atina um valor tal que $2r = 1 + 3q$, quando a segunda condição de mínimo, $\partial^2 u / \partial \theta^2 > 0$, é satisfeita para $\theta = 0^\circ$. A partir desse campo a estrutura se torna ferromagnética.

O campo molecular (3.2.14) tem, nesse caso, as seguintes componentes:

$$\begin{aligned} H_i^\alpha &= \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \sin\theta \cos \phi_i \\ H_i^\beta &= \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \sin\theta \sin \phi_i \\ H_i^\gamma &= H_e + \frac{\sigma}{\mu} [V(0) + K_2] \cos\theta + \frac{\sigma^3}{\mu} K_4 \cos^3\theta . \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

Como se observa, o campo molecular tem módulo dado por

$$|\vec{H}_i| = \frac{\sigma}{\mu} V(Q) , \quad (3.2.31)$$

enquanto a estrutura é cônica ($\sin\theta \neq 0$). Quando a estrutura se torna ferromagnética ($\sin\theta = 0$), o módulo de $\vec{H}_i$ se torna

$$|\vec{H}_i| = H_e + \frac{\sigma}{\mu} [V(0) + K_2] + \frac{\sigma^3}{\mu} K_4 . \quad (3.2.32)$$

A magnetoresistividade (MRS), dada por (3.1.22), enquanto $|\vec{H}_i|$, e consequentemente $\sigma = S B_S (\mu S H_i \beta)$ é constante, tem para componentes

$$\Delta\rho_{xx} = \Delta\rho_{yy} = 0 ,$$

$$e \quad (3.2.33)$$

$$\Delta\rho_{zz} = A \sigma^2 (\sin^2 \theta - \sin^2 \theta_0) .$$

Na fase ferromagnética ($\sin \theta = 0$), a MRS se torna

$$\Delta\rho_{xx} = \Delta\rho_{yy} = C [S(S+1) - \sigma^2 - \sigma \tanh (\mu H_i \beta / 2)]_{H_e=0}^{H_e=H} ,$$

$$e \quad \Delta\rho_{zz} = - A \sigma^2 \sin^2 \theta_0 + B [S(S+1) - \sigma^2 - \sigma \tanh (\mu H_i \beta / 2)]_{H_e=0}^{H_e=H} \quad (3.2.34)$$

O caso de uma estrutura tipo hélice é obtido fazendo-se $\theta_0 = \pi/2$ nos resultados anteriores. Nesse caso, em quanto a estrutura não se torna ferromagnética,

$$\Delta\rho_{xx} = \Delta\rho_{yy} = 0 ,$$

$$e \quad \Delta\rho_{zz} = -A \sigma^2 \cos^2 \theta . \quad (3.2.35)$$

E na fase ferromagnética ($\cos \theta = 1$)

$$\Delta\rho_{xx} = \Delta\rho_{yy} = C [S(S+1) - \sigma^2 - \sigma \tanh (\mu H_i \beta / 2)]_{H_e=0}^{H_e=H} ,$$

e

$$\Delta\rho_{zz} = -A \sigma^2 + B [S(S+1) - \sigma^2 - \sigma \tanh(\mu H_i \beta/2)] \Big|_{H_e=0}^{H_e=H} \quad (3.2.36)$$

Passemos agora a estudar o caso em que $\vec{H}_e$ é aplicado no plano basal. Como dissemos anteriormente, esperamos que no início, para $\vec{H}_e$ pequeno, a estrutura se deforme um pouco. A medida que o campo cresce, a estrutura se torna não periódica, em forma de leque, e para um determinado campo crítico, a estrutura se torna ferromagnética. Como nossos cálculos se referem à estrutura periódicas, vamos considerar apenas essas estruturas. Como não estamos levando em conta anisotropia no plano basal, os resultados independem da direção do campo aplicado. Assim, para $\vec{H}_e = H_e \hat{\alpha}$, o campo molecular tem as componentes:

$$\begin{aligned} H_i^\alpha &= H_e + \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \sin\theta \cos\phi_i \\ H_i^\beta &= \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \sin\theta \cos\phi_i \\ H_i^\gamma &= \frac{\sigma}{\mu} [V(0) + K_2] \cos\theta + \frac{\sigma^3}{\mu} K_4 \cos^3\theta \end{aligned} \quad (3.2.37)$$

Como observamos de (3.2.37), a única estrutura periódica possível é a ferromagnética fazendo um ângulo θ com o eixo γ . À medida que o campo aumenta, o ângulo θ cresce, até que para um determinado campo crítico $\theta = 90^\circ$, e a estrutura se torna ferromagnética no plano basal.

Para determinarmos o campo molecular, podemos eliminar θ , usando a relação

$$H_i^\alpha = H_i \sin\theta \cos\phi_i = H_e + \frac{\sigma}{\mu} V(0) \sin\theta \cos\phi_i ,$$

de modo que

$$\sin\theta = \frac{\mu H_e}{\mu H_i - \sigma V(0)} , \quad e$$

como $\sigma = S B(\mu S H_i \beta)$, podemos escrever

$$\sin\theta = \frac{S(\mu \beta H_e)}{x_0 - S^2 B(x_0) \beta V_0} , \quad (3.2.38)$$

onde $x_0 = \mu S H_i \beta$, e $\beta = (k_B T)^{-1}$.

Usando (3.2.38) na equação do componente γ ,

$$H_i^\gamma = H_i \cos\theta = \frac{\sigma}{\mu} [V(0) + K_2] \cos\theta + \frac{\sigma^3}{\mu} K_4 \cos^3\theta ,$$

ou

$$S^2 B(x_0) \beta [V(0) + K_2] + S^4 B^3(x_0) \beta K_4 \cos^2\theta = x_0 ,$$

obtemos a equação

$$\{x_0 - S^2 B(x_0) \beta V(0)\}^2 - S^2 B(x_0) [\beta (V(0) + K_2)] + S^4 B^3(x_0) (\beta K_4)$$

$$\{[x_0 - S^2 B(x_0) \beta V(0)]^2 - S^2 (\beta \mu H_e)^2\} = x_0 \{x_0 - S^2 B(x_0) \beta V(0)\}^2 .$$

(3.2.39)

A solução numérica dessa equação nos fornece o cam

po molecular, e a partir dele obtemos a MRS (ver tabela 3).

$$\Delta\rho_{xx}=\Delta\rho_{yy}=\Delta\rho_{zz} = [S(S+1) - \sigma^2 - \sigma \tanh(x_0/2S)] \begin{matrix} H_e=H \\ H_e=0 \end{matrix} \quad (3.2.40)$$

No caso da estrutura ser inicialmente uma hélice, $\sin\theta = 1$, a equação que determina o campo molecular é

$$H_i = H_e + \frac{\sigma}{\mu} V(0) \quad (3.2.41)$$

Em ambos os casos (cone e hélice), na ausência de campo externo ($H_e = 0$), o campo molecular é dado por

$$H_i = \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \quad (3.2.42)$$

Lembrando que $\sigma = S B(\mu S H_i \beta)$, e que perto da temperatura - Néel $B(x) = (S+1) x/3S$, obtemos que $V(Q)$ está ligada à temperatura Néel pela relação

$$V(Q) = \frac{3}{S(S+1)} K_B T_N \quad (3.2.43)$$

3.3 - Conclusões

A expressão da magnetoresistividade (MRS), equação (3.1.22), mostra claramente a influência da ordem magnética no espalhamento dos elétrons de condução. Resultados anteriores (Kasuya, 1956a), obtidos através da equação de Boltzmann para um ferromagneto uniforme já mostram esse fato. Comparados com os nossos resultados, especializados para o caso ferromagnético ($\sin\theta = 0$), vemos que eles diferem apenas no termo em $\tanh(x_0/2S)$, da equação (3.1.22). Achamos que nosso resultado esteja correto, pois a ausência desse termo implicaria em uma MRS nula na fase ferromagnética saturada das estruturas, o que não se verifica experimentalmente (Akhavan, 1976). Um trabalho mais recente (Yamada e Takada, 1973), usando o mesmo formalismo usado por nós, para o caso especial de um anti-ferromagneto, apresenta resultados que diferem bastante do nosso resultado e do obtido por Kasuya (1956a). Achamos que certas integrais desse trabalho não estão corretamente calculadas.

No caso particular de um ferromagneto uniforme, nossos resultados mostram que a resistividade se torna isotrópica, e que a MRS é negativa, que são características bem conhecidas experimentalmente. A comparação dos nossos resultados com os dados experimentais de MRS e do Holmio (Akhavan 1976) requer alguns dados sobre esse metal de Terra Rara (Arellano, 1979). O estado fundamental é dado pelo multipletto 5I_8 , seu fator de Landé $g = 5/4$. A temperatura Néel é de 132°K . Na ausência de campo externo, apresenta uma es-

estrutura tipo hélice entre a temperatura Néel e $T = 20^{\circ}\text{K}$. Abaixo dessa temperatura a estrutura é cônica, com um ângulo $\theta \approx 80^{\circ}$, e um ângulo de giro $\phi \approx 30^{\circ}$.

A MRS longitudinal, $\Delta\rho_{zz}$, no caso em que $\vec{H}_e = H_e\gamma$, ou seja, quando se mede a corrente na direção γ , não é apresentada no trabalho experimental de Akhavan e Blackstead (1976). Esse trabalho menciona apenas que essa resistividade varia monotonicamente com o campo aplicado. As equações (3.2.33 - 3.2.36) do nosso trabalho concordam com essa afirmação enquanto o campo não atinge o valor crítico que torna a estrutura ferromagnética. O valor experimental desse campo é da ordem de 120 kG (Rhyne, 1972). Esse valor é bem maior que o valor máximo (20 kG) do campo externo usado no trabalho de Akhavan e Blackstead. Nas vizinhanças do campo crítico, os nossos resultados mostram que a MRS longitudinal varia abruptamente, passando do valor $\Delta\rho_{zz} = \alpha\sigma^2 (\sin\theta_c - \sin\theta_0)$ ao valor $\Delta\rho_{zz} = -\alpha\sigma^2 \sin^2 \theta_0$. Experimentalmente (Bozorth et al, 1968) $\theta_c \approx 45^{\circ}$, para $T = 4,2^{\circ}\text{K}$. Segundo o nosso modelo, a transição ocorre para um ângulo crítico $\theta_c \approx 8^{\circ}$, quando a condição $\partial^2\mu/\partial\theta^2$ de estabilidade é satisfeita para o caso ferromagnético. Essa diferença deve ser devido a não termos incluído o termo de anisotropia de 6ª ordem na Hamiltoniana. Como observamos de (3.2.27), se tivermos um termo $k_6\sigma^6 \cos^5\theta$ com $K_6 < 0$, essa equação é satisfeita para $\cos\theta = 1$ com valores maiores do campo externo, de modo que para um determinado valor do campo externo devemos ter um ângulo menor do que no caso em que $k_6 = 0$.

Nos nossos resultados, a MRS longitudinal $\Delta\rho_{zz}$ é

sempre negativa. Desse modo, não se consegue explicar a curva experimental, mostrada na figura 10 de variação da MRS com a temperatura, com $\vec{H}_e$ fixado em 19 kG. Como se observa nessa figura, entre $T = 40^\circ\text{K}$ e $T = 120^\circ\text{K}$, $\Delta\rho_{zz}$ é positiva. Não temos uma idéia clara para a origem desse comportamento.

No caso do campo externo ser aplicado no plano basal, para temperaturas na faixa $0 < T < 20^\circ\text{K}$, a estrutura é inicialmente conica. O ângulo θ é determinado pela equação (3.2.37). Quando $H_e = 0$, o módulo de $\vec{H}_i$ é dado por $H_i = V(Q)/\mu$. Substituindo esse valor na componente H_i^y , temos a equação

$$\frac{\sigma}{\mu} V(Q) \cos \theta = \frac{\sigma}{\mu} [V(0) + K_2] \cos \theta + \frac{\sigma^3}{\mu} K_4 \cos^3 \theta,$$

e, sendo $\cos \theta \neq 0$, temos que

$$\cos \theta_0 = \left[\frac{V(Q) - V(0) - K_2}{K_4 \sigma^2} \right]^{1/2}. \quad (3.3.1)$$

Usando o valor experimental citado anteriormente, $\theta_0 \approx 80^\circ$, o valor experimental de $V(Q) - V(0)$, obtido pela relação de dispersão de magnons (MacKintosh e Möller, 1973), $V(Q) - V(0) \approx 0,36 \text{ meV}$, a relação $V(Q) = 1/2 K_B T_N$ com $T_N \approx 132^\circ\text{K}$, e o valor (Arellano, 1979) $K_4 \approx 10^{-3} V(Q)$, resolvemos numericamente a equação (3.2.39) e obtivemos a tabela 4.

Como se observa nessa tabela, a MRS é inicialmente positiva, e quando a estrutura se torna ferromagnética, passa a ser negativa. Vemos também, que o valor de H_e para o qual a MRS se anula é tal que $\mu H_e / k_B T \approx 2$. Sendo $\mu = g(g-1)^{-1} \mu_B =$

$= 5 \mu_B$, e $\mu_B/K_B = 6,7171 \times 10^{-5} \text{ kG}^{-1}$ (Aschcroft e Mermin, 1976), o valor do campo externo é $H_e \approx 20 \text{ kG}$. Experimentalmente esse valor é $H_e \approx 5 \text{ kG}$. Essa diferença pode ser explicada pela não inclusão no nosso modelos da anisotropia no plano basal. Essa anisotropia adiciona o termo $V_6 \sigma^5$ ao módulo do campo molecular no estado ferromagnético, e assim a estrutura pode se tornar ferromagnética (e se anular) para campos externos menores. Esse efeito da anisotropia é notado na diminuição do campo crítico que induz a estrutura tipo hélice a se tornar ferromagnética (Cooper, 1972).

Observando as curvas experimentais mostradas nas figuras 6 e 7, notamos que para $T=4,2^\circ\text{K}$ e $T=6^\circ\text{K}$, a MRS apresenta os aspectos qualitativos previstos. Já na figura 11, do trabalho experimental de Mackintosh, a MRS é positiva para qualquer valor do campo externo, para essas mesmas temperaturas.

Para $T \gtrsim 7^\circ\text{K}$, as curvas experimentais mostram que a MRS é sempre negativa. Esse comportamento talvez esteja ligado a efeitos diamagnéticos, que não consideremos no nosso modelo.

Para temperaturas $T > 20^\circ\text{K}$, na ausência de campo externo, a estrutura é tipo hélice. O módulo do campo molecular é dado por

$$H_i = H_e + \frac{\sigma}{\mu} V(0) \quad (3.3.2)$$

Para campo externo pequenos, esperamos que a estrutura se deforme pouco, de modo que podemos usar $V(Q)$ em

vez de $V(0)$ em (3.3.2) e obtermos

$$H_i = H_e + \frac{\sigma}{\mu} V(Q) \quad (3.3.3)$$

De acordo com (3.3.3), o módulo do campo molecular sofre um acréscimo H_e em relação ao valor de campo externo nulo. Para temperaturas não muito próximas à temperatura Néel, σ é praticamente constante e igual ao valor de saturação. Desse modo, podemos mostrar que a MRS é negativa e varia linearmente com o campo externo. A solução numérica da equação (3.3.3), como mostrado na tabela 5, confirma claramente esse fato.

Outro aspecto qualitativo que podemos prever da equação (3.3.3), e que obtemos numericamente, é o aumento da MRS com a temperatura.

Os valores numéricos da tabela 5 explicam qualitativamente as curvas experimentais mostrados nas figuras 8, 9 e 12, a menos do fato de que para temperaturas $T \gtrsim 40^\circ\text{K}$ a MRS é sempre positiva. Não encontramos uma explicação satisfatória para esse comportamento, mencionando apenas que experimentalmente se encontra efeitos de histerese mais pronunciados no entorno dessa temperatura (Akhavan and Blackstead, 1976).

Como caso particular dos nossos resultados, fazendo $\vec{H}_{\text{ext}} = 0$, obtemos a contribuição magnética para a resistividade. Como podemos observar, a expressão (3.1.29) mostra que a resistividade apresenta descontinuidades para as temperaturas nas quais se dá uma mudança qualquer da estrutura

magnética. O termo responsável por isso, no caso de ρ_b , é o que depende de $\tanh(x_0/2S)$, uma vez que a mudança de estrutura se reflete no valor de x_0 . No caso de ρ_c , além desse termo, temos a variação no termo em $\sin^2\theta$. No trabalho de Elliott (1964), aparece descontinuidades apenas para ρ_c , e somente quando a estrutura se torna ferromagnética. Experimentalmente (Legvold, 1972) porém, se observam descontinuidades em ρ_b , e em ρ_c para transições cone-hélice.

Em resumo, vemos que o modelo baseado na aproximação de campo molecular explica qualitativamente alguns aspectos das curvas experimentais de magnetoresistividade no Holmio. Certos comportamentos, entretanto, não encontram uma explicação dentro do nosso modelo. Como a teoria de campo molecular despreza as correlações entre spins, que a baixas temperaturas se tornam importantes, sugerimos para futuro trabalho usar a aproximação de ondas de spins (espalhamento por magnons) no tratamento em baixas temperaturas ($T < 20^\circ\text{K}$). Para temperaturas mais altas, sugerimos uma análise numérica mais detalhada, levando em conta o termo de anisotropia axial até 6ª ordem, a anisotropia basal V_6^6 , e a variação com a temperatura dessas constantes.

APÊNDICE 1

A Hamiltoniana de Interação Elétron-Magnon

Podemos escrever o termo de interação de (2.2.1) como:

$$-\frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \vec{S}(-\vec{p}) \cdot \vec{S}_{c\vec{k}}(\vec{p}) = -\frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \frac{1}{2} [(S^+(-\vec{p}) S_{c\vec{k}}^-(\vec{p}) + S^-(-\vec{p}) S_{c\vec{k}}^+(\vec{p})] + S^z(-\vec{p}) S_{c\vec{k}}^z(\vec{p}). \quad (\text{A.1.1})$$

Usando as expressões (2.2.2 - 2.2.4) para $\vec{S}(-\vec{p})$, e substituindo nelas as funções de onda dadas por (2.1.40), aparecem integrais do tipo:

$$\int_{-L/2}^{L/2} d^3\vec{r} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left[\tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) \pm i\lambda q_y \right]. \quad (\text{A.1.2})$$

O termo $(\pm i\lambda q_y)$ pode ser retirado da integral, dando o resultado $\pm i\lambda q_y \delta_{\pm\vec{q}, \vec{p}}$, onde $\delta_{\vec{a}, \vec{b}}$ é o delta de Kronecker. O termo em $\tanh(y/\lambda)$ requer um artifício de cálculo.

Como $L \gg \lambda$, podemos fazer a aproximação $\int_{-L/2}^{L/2} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}$, de modo que temos de calcular a integral.

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} e^{i(\pm\vec{q}-\vec{p})\cdot\vec{r}} \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) = A \times \delta_{\pm\vec{q}, \vec{p}}^{(2)} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i(\pm q_y - p_y)y} \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right), \quad (\text{A.1.3})$$

onde $\delta_{\vec{a}, \vec{b}}^{(2)}$ significa o delta de Kronecker para as componentes x e z dos vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$, e A a área do cristal perpendicular ao eixo y.

A integral (A.1.3) não existe, de modo que devemos fazer o artifício de escrever

$$\tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) = \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - \mu(y) + \mu(y) , \quad (\text{A.1.4})$$

onde $\mu(y)$ é a função degrau definida por $\mu(y) = \pm 1$ para $y \gtrless 0$. Desse modo, podemos escrever:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i(\pm q_y - p_y)y} \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) = 2i \int_0^{\infty} \text{sen}(\pm q_y - p_y)y [\tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - 1] dy + 2i \int_0^{\infty} \text{sen}(\pm q_y - p_y)y dy \quad (\text{A.1.5})$$

A primeira integral em (A.1.5) está tabelada (Gradshteyn e Ryzhik, 1965) e vale:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \text{sen}(\pm q_y - p_y)y [\tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - 1] dy &= \\ &= \frac{(\pi\lambda/2)}{\sinh[(\pm q_y - p_y) \cdot \pi\lambda/2]} - \frac{1}{\pm q_y - p_y} . \end{aligned} \quad (\text{A.1.6})$$

A segunda integral não existe, e devemos tomar novamente o limite superior $L/2$, de modo que

$$\int_0^{L/2} \text{sen}(\pm q_y - p_y)y = \frac{1 - \cos [L(\pm q_y - p_y)/2]}{\pm q_y - p_y} . \quad (\text{A.1.7})$$

Assim, a integral (A.1.2) é dada por:

$$\begin{aligned} (\text{A.1.2}) &= \pm \Omega i \lambda q_y \delta_{\pm \vec{q}, \vec{p}} + 2i \frac{\Omega}{L} \delta_{\pm \vec{q}, \vec{p}}^{(2)} \left[\frac{\pi\lambda/2}{\sinh(a_y \pi\lambda/2)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{a_y} \cos(a_y L/2) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1.8})$$

onde $a_y = \frac{1}{2}q_y - p_y$.

Usando (A.1.8), e as expressões (1.2.6) para as componentes de $\vec{S}_{c\vec{k}}(\vec{p})$, obtemos a Hamiltoniana (2.2.5).

APÊNDICE 2

Cálculo da Correlação $\langle J_\mu J_\nu \rangle$

O teorema de Wick-Bloch-de Dominicis (Tyablicov , 1967) permite calcular $\langle x_1 x_2 \dots x_{2n} \rangle$ em termos de produtos das correlações de pares de operadores (contrações). No caso, por exemplo, de quatro operadores, que são os que interessam aos nossos cálculos, temos:

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle &= \langle x_1 x_2 \rangle \langle x_3 x_4 \rangle \pm \langle x_1 x_3 \rangle \langle x_2 x_4 \rangle \pm \\ &\langle x_1 x_4 \rangle \langle x_2 x_3 \rangle , \end{aligned} \quad (\text{A.2.1})$$

onde o sinal (+) é usado para o caso de operadores de bósons, e o sinal (-) no caso de férmions.

No caso da equação (2.2.10) temos:

$$\begin{aligned} \langle C_a^+ C_a C_b^+ C_b \rangle &= \langle C_a^+ C_a \rangle \langle C_b^+ C_b \rangle - \langle C_a^+ C_b^+ \rangle \langle C_a C_b \rangle + \\ &+ \langle C_a^+ C_b \rangle \langle C_a C_b^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2.2})$$

já que $C_{a,b}^+$ e $C_{a,b}$ são operadores de fermions.

Uma vez que o número de partículas é conservado pela Hamiltoniana $H_0 = \sum_a E_a C_a^+ C_a$, o segundo termo de (A.2.2) é nulo. Os outros termos são dados por

$$\langle C_a^+ C_a \rangle \langle C_b^+ C_b \rangle = \langle n_a \rangle \langle n_b \rangle = f_a f_b , \quad (\text{A.2.3})$$

e

$$\langle C_a^+ C_b \rangle \langle C_a C_b^+ \rangle = \delta_{a,b} f_a (1 - f_a) , \quad (\text{A.2.4})$$

onde $f_a = |1 + \exp \beta(E_a - E_F)|^{-1}$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac.

A derivada $\partial f_a / \partial E_a$ é dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial E_a} = - \frac{\beta \exp \beta(E_a - E_F)}{[1 + \exp \beta(E_a - E_F)]^2} = - \beta f_a (1 - f_a). \quad (\text{A.2.5})$$

E usando a aproximação (Ashcroft and Mermin, 1976)

$$- \frac{\partial f}{\partial E_a} \approx \delta(E_a - E_F), \quad (\text{A.2.6})$$

obtemos que

$$f_a (1 - f_a) \approx \beta^{-1} \delta(E_a - E_F). \quad (\text{A.2.7})$$

Com isso, obtemos a correlação $\langle J_v J_\mu \rangle$ na forma (2.2.12). Após fazermos a passagem para o contínuo, ficamos com a integral

$$I = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{r} E_{k\sigma, v} E_{k\sigma, \mu} \delta(E_{k\sigma} - E_F). \quad (\text{A.2.8})$$

De (2.2.7) temos que

$$E_{k\sigma, v} = \frac{\hbar^2}{m} k_v, \quad (\text{A.2.9})$$

de modo que

$$I = \frac{\hbar^4 \Omega}{m^2 (2\pi)^3} \int d^3\vec{k} k_v k_\mu \delta(E_{k\sigma} - E_F).$$

A integral se torna mais simples fazendo a mudança de variáveis (Ashcroft and Mermin, 1976).

$$\int d^3\vec{k} \rightarrow \frac{dE_k}{|\nabla_{\vec{k}} E_k|} dS_E. \quad (\text{A.2.10})$$

Desse modo, usando a relação (A.2.9) temos:

$$I = \frac{\hbar^2 \Omega}{m(2\pi)^3} \int_{S_F} \frac{dS_E}{k} k_\nu k_\mu \quad (\text{A.2.11})$$

Por simetria, devido a forma esférica da superfície de Fermi, temos que:

$$I = \frac{\hbar^2 \Omega}{m(2\pi)^3} \frac{\delta_{\nu\mu}}{3} \int_{S_F} k dS_E = \frac{\hbar^2 \Omega}{m(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \delta_{\nu\mu} \quad (\text{A.2.12})$$

Usando a relação $k_{F\sigma}^3 = 6\pi^2 n_\sigma$ obtemos, e somando sobre o spin, obtemos a equação (2.2.13).

APÊNDICE 3

Cálculo da Correlação $\langle [J_v H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle$

Podemos reescrever a equação (2.2.16) na forma (para facilitar os cálculos).

$$\begin{aligned} H_{int}(\pm\omega) = & \sum_{\substack{k, k' \\ m=\pm 1/2}} \hbar V(q_y, a_y) \left\{ \left[\frac{3}{4} - m(m+1) \right]^{1/2} \times \\ & \times \delta(\hbar\omega_q + E_{k',m+1} - E_{k,m} \pm \hbar\omega) C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_q^+ + \left[\frac{3}{4} - m(m-1) \right]^{1/2} \\ & \delta(E_{k,m-1} - E_{k',m} - \hbar\omega_q \pm \hbar\omega) C_{k',m} C_{k,m-1}^+ a_q \right\}, \end{aligned} \quad (A.3.1)$$

e a equação (2.2.8) como:

$$J_v = - \frac{eh}{m} \sum_{p,s} p_v C_{ps}^+ C_{ps}, \quad (A.3.2)$$

onde $p \equiv \vec{p} = (m/h^2) \nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}\sigma}$.

No comutador de J_v com $H_{int}(\omega)$ aparecem os comutadores:

$$\begin{aligned} [C_{ps}^+ C_{ps}, C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_q^+] &= [C_{ps}^+ C_{ps}, C_{k',m+1}^+] C_{k,m} a_q^+ \\ &+ C_{k',m+1}^+ [C_{ps}^+ C_{ps}, C_{k,m}] a_q^+ = (\delta_{p,k'} \delta_{s,m+1} - \\ &\delta_{p,k} \delta_{s,m}) C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_q^+, \end{aligned} \quad (A.3.3)$$

e

$$\begin{aligned} [C_{ps}^+ C_{ps}, C_{k,m-1}^+ C_{k',m} a_q] &= (\delta_{p,k} \delta_{s,m-1} - \\ &\delta_{p,k'} \delta_{s,m}) C_{k,m-1}^+ C_{k',m} a_q. \end{aligned} \quad (A.3.4)$$

De modo que

$$\begin{aligned}
[J_v, H_{int}(\omega)] &= -\frac{e\hbar^2}{m} \sum_{\substack{k,k' \\ p,s,m}} p_v V(q_y, a_y) \\
&\quad \left(\left[\frac{3}{4} - m(m+1) \right]^{1/2} \delta(\hbar\omega_q + E_{k',m+1} - E_{k,m} + \hbar\omega) \right. \\
&\quad (\delta_{p,k'} \delta_{s,m+1} - \delta_{p,k} \delta_{s,m}) C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_q^+ + \\
&\quad \left. \left[\frac{3}{4} - m(m-1) \right]^{1/2} \delta(E_{k,m-1} - E_{k',m} - \hbar\omega_q + \hbar\omega) \right. \\
&\quad (\delta_{p,k} \delta_{s,m-1} - \delta_{p,k'} \delta_{s,m}) C_{k,m-1}^+ C_{k',m} a_q \} \\
&= -\frac{2e\hbar^2}{m} \sum_{k,k',m} V(q_y, a_y) \left\{ \left[\frac{3}{4} - m(m+1) \right]^{1/2} \right. \\
&\quad \delta(\hbar\omega_q - E_{k',m+1} - E_{k,m} + \hbar\omega) (k'_v - k_v) C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_q^+ \\
&\quad + \left. \left[\frac{3}{4} - m(m-1) \right]^{1/2} \delta(E_{k,m-1} - E_{k',m} - \hbar\omega_q + \hbar\omega) (k_v - k'_v) \right. \\
&\quad \left. C_{k,m-1}^+ C_{k',m} a_q \right\} . \tag{A.3.5}
\end{aligned}$$

De modo análogo, apenas mudando $\omega \rightarrow -\omega$ e trocando o sinal do coeficiente, obtemos $[H_{int}(-\omega), J_v]$.

No cálculo da correlação do produto dos dois comutadores, temos que calcular as correlações:

$$(I) \quad \langle C_{p',n+1}^+ C_{p,n} C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_p^+ a_q^+ \rangle$$

$$(II) \quad \langle C_{p',n+1}^+ C_{p,n} C_{k',m-1}^+ C_{k,m} a_p^+ a_q^+ \rangle$$

$$(III) \quad \langle C_{p',n-1}^+ C_{p,n} C_{k',m+1}^+ C_{k,m} a_p^+ a_q^+ \rangle$$

$$(IV) \quad \langle C_{p',n-1}^+ C_{p,n} C_{k',m-1}^+ C_{k,m} a_p^+ a_q^+ \rangle .$$

As correlações (I) e (IV) são nulas pois não conservam o número de mágnons. As outras duas são dadas por:

$$(II) = \delta_{p',k'} \delta_{p,k} \delta_{n,m-1} \delta_{p,q} f_{k',m} (1 - f_{k,m}) N_q ,$$

$$(III) = \delta_{p,k} \delta_{p',k'} \delta_{m,n-1} \delta_{p,q} f_{k,m} (1 - f_{k',m+1}) (N_q + 1) ,$$

onde $N_q = |1 - \exp(\beta \hbar \omega_q)|^{-1}$ é a função de distribuição de Bose-Einstein.

Usando (A.3.5), (II) e (III), obtemos que:

$$\begin{aligned} \langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle &= \left(\frac{2eh^2}{m} \right)^2 \sum_{\substack{k,k',m \\ p,p',n}} \\ & V(q'_y, a'_y) V(q_y, a_y) \left\{ \left[\frac{3}{4} - n(n+1) \right]^{1/2} \left[\frac{3}{4} - m(m-1) \right]^{1/2} \right. \\ & \delta(\hbar \omega_p + E_{p',n+1} - E_{p,n} + \hbar \omega) \delta(E_{k,m-1} - E_{k',m} - \hbar \omega_q - \hbar \omega) \\ & (k'_v - k_v)(p'_v - p_v) f_{k',m} (1 - f_{k,m-1}) N_q \delta_{p',k'} \delta_{p,k} \\ & \delta_{n,m-1} \delta_{p,q} + \left[\frac{3}{4} - n(n-1) \right]^{1/2} \left[\frac{3}{4} - m(m+1) \right]^{1/2} \\ & \delta(E_{p,n-1} - E_{p',n} - \hbar \omega_p + \hbar \omega) \delta(\hbar \omega_q + E_{k',m+1} - E_{k,m} - \hbar \omega) \\ & (p'_v - p_v)(k'_m - k_m) f_{k,m} (1 - f_{k',m+1}) (N_q + 1) \delta_{p,k} \delta_{p',k'} \\ & \left. \delta_{n-1,m} \delta_{p,q} \right\} \end{aligned} \quad (A.3.6)$$

Somando em p, p', n e m , obtemos a equação (2.2.17).

O tempo de vida τ dos magnons está ligada ao produto das duas deltas de Dirac que aparecem em (A.3.6). Ao

se fazer a soma em p, p', m , e n , na equação (A.3.6), observamos que aparece o produto de duas funções δ de Dirac equivalentes. De modo que ficamos com o fator $\delta(0)$ multiplicando o somatório. Essa divergência vem do fato que as excitações de m $\ddot{a}$ gnons tem um tempo de vida infinito. Na pr $\acute{a}$ tica, aparece um amortecimento, dado por uma parte imagin $\acute{a}$ ria na rela $\tilde{c}$ o de dispers $\tilde{a}$ o.

Usando um tempo de vida grande, por $\acute{e}$ m finito, podemos fazer a aproxima $\tilde{c}$ o:

$$\delta(E=0) \approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt = \frac{\tau}{2\pi\hbar}$$

APÊNDICE 4

Cálculo da Resistividade

Na equação (2.2.17) aparecem termos do tipo:

$$f_a(1 - f_b) \delta(E_a - E_b \pm x) = [1 + \exp(E_a - E_F)]^{-1} \\ \{1 - [1 + \exp(E_b - E_F)]^{-1}\} \delta(E_a - E_b \pm x) . \quad (A.4.1)$$

Usando a identidade

$$1 - \frac{1}{1+b} \equiv (1 - \frac{1}{1+a}) \frac{b(1+a)}{a(1+b)} , \quad (A.4.2)$$

obtemos que,

$$(A.4.1) = f_a(1 - f_b) \exp(\pm x) (f_b/f_a) \delta(E_a - E_b \pm x)$$

Fazendo a aproximação, como em (A.2.7), para $f_a(1 - f_a)$, obtemos que para fins de integração

$$(A.4.1) \approx 2k_B T \delta(E_a - E_F) \exp(\pm x) f(E_F \pm x) \delta(E_a - E_b \pm x) \quad (A.4.3)$$

Usando o resultado (A.4.3) na equação (2.2.17), podemos reescrevê-la como:

$$\langle [J_v, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_v] \rangle = (4e^2 \hbar^3 \tau k_B T / \pi m^2) \\ \sum_{k, k'} v^2(q_y, a_y) (k'_v - k_v)^2 \{ \delta(\hbar\omega_q + E_{k', \uparrow} - E_{k, \uparrow}) \delta(E_{k, \uparrow} - E_F) \\ f(E_F - \hbar\omega_q) \exp(-\beta \hbar\omega_q) (N_q + 1) + \delta(E_{k, \uparrow} - E_{k', \uparrow} - \hbar\omega_q) \\ \delta(E_{k', \uparrow} - E_{F, \uparrow}) f(E_F + \hbar\omega_q) \exp(\beta \hbar\omega_q) N_q \} \quad (A.4.4)$$

Para o termo com $\delta_{ay,0}$ de $V^2(q_y, a_y)$, aparecem integrais do tipo.

$$I_{vv}^{\downarrow}(a_y=0) = \frac{\Omega^2}{(2\pi)^6} \int d^3\vec{k} \, d^3\vec{q} \, V^2(q_y) \, q_v^2 \, \delta(E_{k\downarrow} - E_{F\downarrow})$$

$$\delta(h\omega_{\vec{q}} + E_{k'\downarrow} - E_{k\downarrow}) \, e^{\epsilon} \, (e^{2\epsilon} - 1)^{-1} \quad (A.4.5)$$

onde $\epsilon = \beta h\omega_{\vec{q}}$.

Usando a relação de dispersão (2.2.7), podemos escrever a segunda função delta de (A.4.5) como:

$$\delta(h\omega_{\vec{q}} + E_{k'\downarrow} - E_{k\downarrow}) = \frac{m}{h^2 k q} \delta(\cos\gamma - \frac{q}{2k} - \frac{\Delta m}{h^2 k q} - \frac{mh\omega_{\vec{q}}}{h^2 k q}) ,$$

(A.4.6)

e impondo a condição $-1 \leq \cos \gamma \leq 1$, obtemos os limites superior $q_{S\downarrow}$ e inferior $q_{I\downarrow}$ do módulo de $\vec{q}$, dentro dos quais $I_{vv}^{\downarrow}$ não se anula. Esses limites são, usando a relação de dispersão de magnons dada pela equação (2.1.40),

$$q_{I\downarrow}^{S\downarrow} = \frac{1 \pm [1 - (1+c)(\Delta + k_B T_g)/E_F]^{1/2}}{1 + c} \, k_F \quad (A.4.7)$$

onde $c = k_B T_c / E_a$, com $E_a = h^2 / 2ma^2$.

Com esses limites fixados, podemos agora calcular a integral em $\vec{k}$. Tomando um vetor $\vec{q}$ fixo qualquer como eixo z , e fazendo a mudança $d^3\vec{k} \rightarrow \frac{dE_k}{|\nabla_{\vec{k}} E_k|} dS_E$, a integral em $d^3\vec{k}$ fica:

$$d^3k \rightarrow dE_{k\downarrow} \frac{k^2 \sin\gamma \, d\gamma \, d\phi}{h^2 k/m} \frac{1}{h^2 k_q/m} \delta(\cos\gamma) \delta(E_{k\downarrow} - E_{F\downarrow})$$

(A.4.8)

Desse modo, ficamos com a integral em $\vec{q}$,

$$I_{vv}^{\uparrow}(a_y=0) = \frac{\Omega^2}{(2\pi)^5} \frac{m^2}{\hbar^4} \int_{q_{I\downarrow}}^{q_{S\downarrow}} dq \, q \, \sin\theta \, d\theta d\phi \, V^2(q_y) q_v^2 e^{\epsilon} (e^{2\epsilon} - 1)^{-1} \quad (\text{A.4.9})$$

Analogamente, obtemos a outra integral sobre a superfície de Fermi com spin $\uparrow$,

$$I_{vv}^{\uparrow}(a_y=0) = \frac{\Omega^2}{(2\pi)^5} \frac{m^2}{\hbar^4} \int_{q_{I\uparrow}}^{q_{S\uparrow}} dq \, q \, \sin\theta \, d\theta d\phi \, V^2(q_y) q_v^2 e^{\epsilon} (e^{2\epsilon} - 1)^{-1}, \quad (\text{A.4.10})$$

onde agora

$$q_{I\uparrow}^{S\uparrow} = \left[\frac{\pm 1 + [1 + (1-c)(\Delta + k_B T_g)/E_F]^{1/2}}{1 - c} \right] k_F \quad (\text{A.4.11})$$

Para o outro termo de $V^2(q_y, a_y)$, além das integrais em $\vec{k}$ e $\vec{q}$, aparece a integral em a_y . Entretanto, estudando a dependência funcional de $V^2(q_y, a_y)$ com a_y , ou seja a função:

$$f(a_y) = \left[\frac{\pi\lambda/2}{\sinh(\pi\lambda a_y/2)} - \frac{\cos(a_y L/2)}{a_y} \right]^2, \quad (\text{A.4.12})$$

observamos que para a_y pequeno,

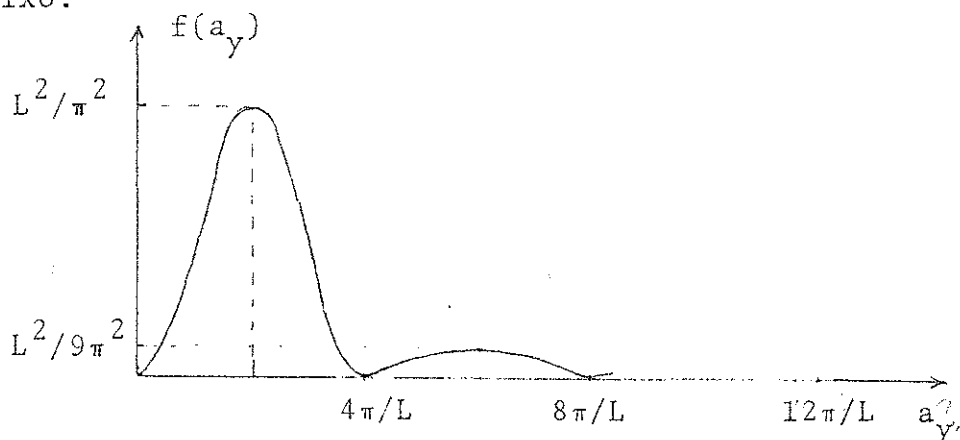
$$f(a_y \rightarrow 0) \approx \left[\frac{1 - \cos(a_y L/2)}{a_y} \right]^2, \quad (\text{A.4.13})$$

e para a_y grande,

$$f(a_y \rightarrow \infty) \approx \cos^2(a_y L/2)/a_y^2, \quad (\text{A.4.14})$$

de modo que o gráfico de $f(a_y)$ temo o aspecto mostrado na

figura abaixo.



Podemos assim, fazer a seguinte aproximação:

$$f(a_y) \approx \begin{cases} L^2/\pi^2 & \text{para } \pi/L < |a_y| < 3\pi/L \\ 0 & \text{para } |a_y| \text{ fora desse intervalo} \end{cases} \quad (\text{A.4.15})$$

Como $L \gg \lambda \gg a$, podemos desprezar a influência de a_y nas funções deltas. Assim, obtemos integrais semelhantes às do caso em que $a_y = 0$, mudando apenas o fator $V^2(q_y)$ para $V^2(a_y, q_y) L^2/\pi^2$.

Substituindo $V^2(q_y)$, dado por (2.2.6), em (A.4.9) e (A.4.10), e tomando o eixo y como referência, de modo que as componentes de $\vec{q}$ sejam $q_y = q \cos \theta$, $q_x = q \sin \theta \sin \phi$, e $q_z = q \sin \theta \cos \phi$, obtemos integrais angulares do tipo,

$$I_{nn}(a_y=0) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} C(q) F_{nn}(\theta) G_{nn}(\phi) d\theta d\phi, \quad (\text{A.4.16})$$

onde:

$$C(q) = (J^2 \Omega^2 SL\lambda/4) q^5 e^\epsilon (e^{2\epsilon} - 1)^{-1}$$

$$F_{xx}(\theta) = F_{zz}(\theta) = \frac{\sin^3 \theta \cos^2 \theta}{b+c \cos^2 \theta},$$

$$F_{yy}(\theta) = \frac{\cos^4 \theta}{b+c \cos^2 \theta}, \quad (\text{A.4.17})$$

$$G_{xx}(\phi) = \sin^2 \phi,$$

$$G_{zz}(\phi) = \cos^2 \phi,$$

$$G_{yy}(\phi) = 1,$$

com $b = L/2\lambda - \tanh(L/2\lambda),$

$$c = L\lambda/2 q^2$$

Substituindo (A.4.17) em (A.4.16), e fazendo as integrais, obtemos:

$$I_{xx}(a_y=0) = I_{zz}(a_y=0) = D(q) \left[\frac{q^3}{3} - \frac{c}{2} \arctg\left(\frac{q}{c}\right) q^2 + \frac{c^2}{2} q - \frac{c^3}{2} \arctg\left(\frac{q}{c}\right) \right], \quad (\text{A.4.18})$$

e

$$I_{yy}(a_y=0) = 2D(q) \left[\frac{q^3}{6} - \frac{c^2}{2} q + \frac{c^3}{2} \arctg\left(\frac{q}{c}\right) \right], \quad (\text{A.4.19})$$

onde $D(q) = 2\pi J^2 \Omega^2 S e^\epsilon (e^{2\epsilon} - 1)^{-1}$ (A.4.19a)

e $C = (2b/L\lambda)^{1/2} = \left[\frac{L/\lambda - 2\tanh(L/2\lambda)}{L\lambda} \right]^{1/2},$ (A.4.19b)

Para a parte com $a_y \neq 0$, obtemos as integrais

$$I_{nn}(a_y \neq 0) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} K(q) M_{nn}(\theta) N_{nn}(\phi) d\phi d\theta, \quad (\text{A.4.20})$$

onde

$$k(q) = (2/\pi\lambda q)^2 C(q)$$

$$M_{xx}(\theta) = M_{zz}(\theta) = \frac{\sin^3 \theta}{b+c \cos^2 \theta}, \quad (\text{A.4.21})$$

$$N_{xx}(\phi) = \sin^2 \phi$$

$$N_{zz}(\phi) = \cos^2 \phi$$

e $N_{yy}(\phi) = 1.$

Fazendo as integrais, obtemos:

$$I_{xx}(a_y \neq 0) = I_{zz}(a_y \neq 0) = \frac{4}{\pi^2 \lambda^2} D(q) \left[\left(\frac{q^2}{C} + C \right) \arctg \left(\frac{q}{C} \right) - q \right] \quad (A.4.22)$$

e

$$I_{yy}(a_y \neq 0) = \frac{8}{\pi^2 \lambda^2} D(q) \left[q - C \arctg \left(\frac{q}{C} \right) \right] \quad (A.4.23)$$

Usando os resultados (A.4.16-23), e fazendo a soma sobre mesmo spin, obtemos:

$$I_{xx} = I_{zz} = I_{xx}(a_y = 0) + I_{xx}(a_y \neq 0) = \frac{1}{3} D(q) \left[q^3 + Xq^2 + Yq + Z \arctg(q/C) \right], \quad (A.4.24)$$

e

$$X = -3(1 - 8/\pi^2 \lambda^2 C^2) \frac{C}{2} \arctg\left(\frac{q}{C}\right),$$

$$Y = XC^2/2, \quad (A.4.25)$$

$$Z = -XC^3/2,$$

com $D(q)$ e C definidos por (A.4.19a e b),

$$I_{yy} = I_{yy}(a_y = 0) + I_{yy}(a_y \neq 0) = \frac{1}{3} D(q) \left[q^3 - 2Yq - 2Z \arctg\left(\frac{q}{C}\right) \right]. \quad (A.4.26)$$

Para se obter a resistividade (1.1.) basta mul-

tiplicar as integrais (A.4.26) e (A.4.27) por $(\pi k_B T / \hbar^2)$

$$\frac{\Omega^2}{(2\pi)^5} \frac{m^2}{\hbar^4} \langle J_v J_v \rangle^{-2}, \text{ de modo que obtemos:}$$

$$\rho_{nn} = \sum_s \frac{4 \Omega^2 m^2}{e^{2N^2} (2\pi)^5 \hbar^3} \int_s I_{nn}(q) dq \quad (\text{A.4.27})$$

onde s é variável de spin.

Para obtermos a dependência de ρ com a temperatura, vamos fazer a mudança para a variável adimensional:

$$\epsilon = \beta \hbar \omega_q = \beta (k_B T_c a^2 q^2 + k_B T g) = \left(\frac{T_c}{T}\right) a^2 q^2 + \frac{T_g}{T}. \quad (\text{A.4.28})$$

Com isso obtemos que:

$$dq = \frac{1}{2a} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \left(\epsilon - \frac{T_g}{T}\right)^{-1/2} d\epsilon, \quad (\text{A.4.29})$$

$$q dq = \frac{1}{2a^2} \left(\frac{T}{T_c}\right) d\epsilon, \quad (\text{A.4.30})$$

$$q^2 dq = \frac{1}{2a^3} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \left(\epsilon - \frac{T_g}{T}\right)^{1/2} d\epsilon, \quad (\text{A.4.31})$$

$$e q^3 dq = \frac{1}{2a^4} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \left(\epsilon - \frac{T_g}{T}\right) d\epsilon. \quad (\text{A.4.32})$$

Substituindo (A.4.29-32) em (A.4.27), ficamos com integrais do tipo:

$$I_1 = \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{e^\epsilon}{e^{2\epsilon} - 1} \epsilon d\epsilon \quad (\leq, \pi^2/8) \quad (\text{A.4.33})$$

$$I_2 = \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{e^\epsilon}{e^{2\epsilon} - 1} \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad (\text{A.4.34})$$

$$I_3 = \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{e^\epsilon}{e^{2\epsilon} - 1} d\epsilon, \quad (\text{A.4.35})$$

$$e \quad I_4 = \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{e^\epsilon}{e^{2\epsilon} - 1} \epsilon^{-1/2} d\epsilon, \quad (\text{A.4.36})$$

onde desprezamos a razão $T_g/T \approx 10^{-2}$ (Winter, 1961) para a faixa de temperatura $T(1 - 4 \text{ } ^\circ\text{K})$ que nos interessa.

Fazendo a aproximação:

$$\text{arc tg } (q/C) \approx \pi/2, \quad (\text{A.4.37})$$

uma vez que $C \approx 1/\lambda$ (ver eq. (A.4.19b), com $L \gg \lambda$) e $\lambda \approx 200$ parâmetros de rede (valor típico), obtemos as seguintes expressões para a resistividade:

$$\rho_{//} = C_1 T^2 - C_2 T^{3/2} + C_3 T - C_4 T^{1/2}, \quad (\text{A.4.38})$$

$$e \quad \rho_{\perp} = C_1 T^2 - C_3 T + C_4 T^{1/2}, \quad (\text{A.4.39})$$

onde

$$C_1 = \frac{2}{3(2\pi)^4} \left(\frac{\Delta/\epsilon_a}{na^3} \right) \rho_0 \left(\frac{I_1}{T_c} \right) \mu\Omega\text{cm } ^\circ\text{K}^{-2} \quad (\text{A.4.40})$$

$$C_2 = \frac{3\pi a C}{4} \left(1 - \frac{8}{\pi^2 \lambda^2 C^2} \right) T_c^{1/2} \left(\frac{I_2}{I_1} \right) C_1 \mu\Omega\text{cm } ^\circ\text{K}^{-3/2} \quad (\text{A.4.41})$$

$$C_3 = \frac{3a^2 C^2}{4} \left(1 - \frac{8}{\pi^2 \lambda^2 C^2} \right) T_c \left(\frac{I_3}{I_1} \right) C_1 \mu\Omega\text{cm } ^\circ\text{K}^{-1} \quad (\text{A.4.42})$$

$$C_4 = \frac{3\pi a^2 C^3}{4} \left(1 - \frac{8}{\pi^2 \lambda^2 C^2} \right) T_c^{3/2} \left(\frac{I_4}{I_1} \right) C_1 \mu\Omega\text{cm } ^\circ\text{K}^{-1/2} \quad (\text{A.4.43})$$

$$e \quad \Delta = 2SJ\Omega, \quad \epsilon_a = \hbar^2/2ma^2, \quad \rho_0 = \frac{m}{ne^2 \hbar/\Delta}.$$

Usando valores típicos para o Ferro (Cabrera, 1976) obtemos os valores mostrados no capítulo 2, equações (2.2.21-24).

As razões entre as integrais (I_{1-4}) estão calculadas na tabela 1, para alguns valores do limite inferior dos integrais, para se obter estimativas dos valores máximos das constantes acima, afim de compararmos com os valores do caso de magnons de superfície.

APÊNDICE 5

Escrevendo o operador J na forma:

$$J_v = - \frac{e \hbar}{m} \sum_{p,s} p_v C_{ps}^+ C_{ps} , \quad (A.5.1)$$

e usando as expressões (1.2.6) para $\vec{s}(k,q)$,

$$s^+ (k,q) = 2 C_{k+q\uparrow}^+ C_{k\downarrow} , \quad (A.5.2)$$

$$s^- (k,q) = 2 C_{k+q\downarrow}^+ C_{k\uparrow} , \quad (A.5.3)$$

e

$$s^z(k,q) = C_{k+q\uparrow}^+ C_{k\uparrow} - C_{k+q\downarrow}^+ C_{k\downarrow} , \quad (A.5.4)$$

aparecem comutadores idênticos aos calculados em (A.3.3) e (A.3.4) do apêndice 3, ou seja,

$$[C_{ps}^+ C_{ps}, C_{k'm}^+ C_{kn}] = (\delta_{pk'} \delta_{sm} - \delta_{pk} \delta_{sn}) C_{k'm}^+ C_{kn} . \quad (A.5.5)$$

Usando (A.5.1-5), e a expressão de $H_{int}(\pm\omega)$ de (3.1.6), e somando sobre p e s , obtemos a expressão (3.1.12).

APÊNDICE 6

As médias térmicas dos produtos de operadores de elétrons que aparecem no cálculo de (3.1.13) são do tipo dos calculados no apêndice 3. Usando (A.5.2-4) obtemos as médias:

$$\begin{aligned} \langle s_1^+ s_2^+ \rangle &= \langle s_1^- s_2^- \rangle = \langle s_1^+ s_2^z \rangle = \langle s_1^- s_2^z \rangle = \langle s_1^z s_2^+ \rangle = \\ \langle s_1^z s_2^- \rangle &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.6.1})$$

onde abreviamos a notação $s_1 \equiv s(k, q)$ e $s_2 \equiv s(k', q')$,

$$\langle s^+(k, q) s^-(k', q') \rangle = 4 f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) \delta_{k+q, k'} \delta_{k, k'+q'} , \quad (\text{A.6.2})$$

$$\langle s^-(k, q) s^+(k', q') \rangle = 4 f_{k+q\downarrow} (1-f_{k\downarrow}) \delta_{k+q, k'} \delta_{k, k'+q'} , \quad (\text{A.6.3})$$

$$\begin{aligned} \langle s^z(k, q) s^z(k', q') \rangle &= \delta_{q, -q'} [f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) + \\ &+ f_{k+q\downarrow} (1-f_{k\downarrow})] + \delta_{q, 0} \delta_{q', 0} (f_{k\uparrow} - f_{k\downarrow})(f_{k'\uparrow} - f_{k'\downarrow}). \end{aligned} \quad (\text{A.6.4})$$

Usando essas expressões, obtemos então:

$$\begin{aligned} \langle [J_v, H_{\text{int}}(\omega)] [H_{\text{int}}(-\omega), J_v] \rangle &= - \left(\frac{J_{\text{he}}}{Nm} \right)^2 \sum_{\substack{k, q \\ k', q'}} q_v q'_v \\ &\delta_{q+k, k'} \delta_{k, k'+q} [\langle S^+(-q, \omega_{1+}) S^-(-q, \omega'_{2-}) \rangle f_{k+q\uparrow} (1-f_{k\uparrow}) \\ &+ \langle S^-(-q, \omega_{2+}) S^+(-q, \omega'_{1-}) \rangle f_{k+q\downarrow} (1-f_{k\downarrow})] \end{aligned}$$

$$+ \langle S^Z(-q, \omega_{3+}) S^Z(-q, \omega'_{3-}) \rangle [f_{k+q+}(1-f_{k+}) + f_{k+q-}(1-f_{k+})] \quad (A.6.5)$$

Fazendo a soma em k' e q' , as restrições dos deltas acarretam (ver equação 3.1.7-9) que $\omega'_{2-} \rightarrow -\omega_{1+}$, $\omega'_{1-} \rightarrow -\omega_{2+}$ e $\omega'_{3-} \rightarrow -\omega_{3+}$, e assim obtemos a equação (3.1.1-).

Para se calcular as correlações temporais,

$$\langle S_0^a(t) S_0^b(t') \rangle = \text{Tr} [\rho S^a(t) S^b(t')] / \text{Tr} \rho \quad (A.6.6)$$

onde $\rho = \exp(-\beta H_m)$, e $H_m = -\mu \vec{H}_0 \cdot \vec{S}_0$, vamos tomar a base na qual H_m é diagonal, ou seja, a base constituída pelos auto vetores de S_0^Z , onde $\hat{Z}$ é o unitário da direção do campo molecular $\vec{H}_0 = H_0 \hat{Z}$. Assim, podemos escrever:

$$S_0^a(t) S_0^b(t') = \frac{\sum_{m=-S}^S \langle S_m | S_0^a(t) S_0^b(t') | S_m \rangle \exp(-\beta E_m)}{\sum_{m=-S}^S \exp(-\beta E_m)} \quad (A.6.7)$$

Devido à completeza da base $|S_m\rangle$,

$$\sum_m \langle S_m | S_0^a(t) S_0^b(t') | S_m \rangle = \sum_{m,n} \langle S_m | S_0^a(t) | S_n \rangle \langle S_n | S_0^b(t') | S_m \rangle \quad (A.6.8)$$

Como $\vec{S}$ é um operador vetorial, suas componentes no sistema (x, y, z) estão relacionados com as componentes no sistema (X, Y, Z) através da matriz de rotação que leva um sistema no outro. Escolhendo o sistema de tal modo que $\vec{H}_0$ esteja contido no plano (x, z) , temos as relações:

$$S_0^X = S_0^Z \sin \theta + S_0^Y \cos \theta,$$

$$S_0^Y = S_0^Y,$$

e

$$S_0^Z = S_0^Z \cos \theta - S_0^X \sin \theta, \quad (\text{A.6.9})$$

de modo que,

$$S_0^+ = S_0^Z \sin \theta + S_0^{(+)} \cos^2(\theta/2) - S_0^{(-)} \sin^2(\theta/2), \quad (\text{A.6.10})$$

$$S_0^- = S_0^Z \sin \theta + S_0^{(-)} \cos^2(\theta/2) - S_0^{(+)} \sin^2(\theta/2), \quad (\text{A.6.11})$$

$$S_0^Z = S_0^Z \cos \theta - \frac{1}{2} [S_0^{(+)} + S_0^{(-)}] \sin \theta, \quad (\text{A.6.12})$$

onde a notação $S_0^{(\pm)}$ se refere ao sistema (X, Y, Z).

Usando essas relações, e a identidade $\langle b | A^+ | a \rangle = \langle a | A | b \rangle^*$, e lembrando que $S_0^a(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_m t\right)$

$S_0^a \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_m t\right)$, obtemos:

$$\sum_{mn} \langle S_m | S_0^+(t) | S_n \rangle \langle S_n | S_0^-(t') | S_m \rangle = \sum_{mn} \exp[i\omega_0 \tau(m-n)]$$

$$|\langle S_m | S_0^+ | S_n \rangle|^2, \quad (\text{A.6.13})$$

onde $\omega_0 = \mu H_0 / \hbar$, e $\tau = t' - t$.

De acordo com (A.6.10) temos:

$$|\langle S_m | S_0^+ | S_n \rangle|^2 = [m \sin \theta \delta_{n,m} + [(S-n)(S+n+1)]^{1/2}$$

$$\delta_{n,m-1} \cos^2(\theta/2) + [(S+n)(S-n+1)]^{1/2} \delta_{n,m+1} \sin^2(\theta/2)]^2.$$

$$(\text{A.6.14})$$

Fazendo a soma sobre n em (A.6.13), obtemos que

$$(\text{A.6.13}) = \sum_m m^2 \sin^2 \theta + [S(S+1) + m - m^2] e^{i\omega_0 \tau} \cos^4(\theta/2)$$

$$+ [S(S+1) - m - m^2] e^{-i\omega_0\tau} \sin^4(\theta/2) \quad . \quad (A.6.15)$$

Substituindo (A.6.15) em (A.6.7) obtemos finalmente a expressão (3.1.15). De modo análogo, se obtém (3.1.16) e (3.1.17).

Para o tipo de estrutura definida por (3.1), usando (3.1.20) obtemos

$$\begin{aligned} \langle S^+(-q, t) S^-(q, t') \rangle &= \sum_{n \neq n'} e^{i(\vec{Q} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle S_0^+ \rangle \langle S_0^- \rangle \quad . \\ &+ N \langle S_0^+(t) S_0^-(t') \rangle \quad . \end{aligned} \quad (A.6.16)$$

O somatório em (A.6.16) é dado por

$$\sum_{n \neq n'} e^{i(\vec{Q} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} = N^2 \delta_{\vec{Q}, \vec{q}} - N \quad (A.6.17)$$

Substituindo a correlação (3.1.15) em (A.6.16), e usando (A.6.10-11) e (A.6.17) obtemos

$$\begin{aligned} \langle S^+(q, t) S^-(q, t') \rangle &= (N^2 \delta_{\vec{Q}, \vec{q}} - N) \langle S \rangle \sin^2 \theta + \\ &N [\langle S^2 \rangle \sin^2 \theta + [S(S+1) - \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \sin^4(\theta/2) e^{-i\omega_0\tau} + \\ &[S(S+1) + \langle S \rangle - \langle S^2 \rangle] \cos^4(\theta/2) e^{i\omega_0\tau}] \quad . \end{aligned} \quad (A.6.18)$$

Na transformada de Fourier (3.1.14) aparece integrais do tipo ($\omega = 0$)

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_1 t} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_1 t'} e^{i\omega_0 (t'-t)} dt' \right] dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} dt \delta(\omega_1 - \omega_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta(\omega_1 - \omega_0)
\end{aligned}
\tag{A.6.19}$$

[A divergência que aparece em (A.6.19) desaparece quando fazemos a transformada inversa $\rho(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \rho(\omega) d\omega$, pois, invertendo a ordem de integração,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \frac{1}{2\pi} dt d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega) d\omega = 1 .$$

De modo análogo obtemos as outras correlações temporais, e agrupando os termos de mesma dependência em θ obtemos (3.1.21).

As integrais que aparecem em (3.1.21) são do tipo:

$$\text{I) } \iint d^3\vec{k} d^3\vec{q} q_v^2 \delta(\omega_i) f_{k+q,m} (1 - f_{k,n})$$

$$\text{II) } \iint d^3\vec{k} d^3\vec{q} q_v^2 \delta(\omega_i \pm \omega_0) f_{k+q,m} (1 - f_{k,n}) .$$

Calculemos a integral do tipo I

$$I_1 = \frac{V^2}{(2\pi)^6} \iint d^3\vec{k} d^3\vec{q} q_v^2 \delta(\omega_1) f_{k+q,+} (1 - f_{k+}) .$$

Fazendo a mudança de variáveis $\vec{q}' = \vec{k} + \vec{q}$, integrando em $\vec{q}'$ para um $\vec{k}$ fixo, e usando a transformação $\int d^3\vec{q}' \rightarrow \int dE_{q'} \frac{dS}{|\nabla_{q'} E_{q'}|}$ obtemos, lembrando que

$$\delta(\omega_1) = \hbar \delta(E_{q'} - E_k - 2D) , \quad (\text{A.6.20})$$

$$\begin{aligned} \int d^3 q' (q'_v - k_v)^2 \delta(\omega_1) f_{q', \uparrow} (1 - f_{k \uparrow}) &= \\ &= \hbar f_{k \uparrow} (1 - f_{k \uparrow}) \int \frac{dS_{q'}}{\hbar^2/m q'} (q'_v - k_v)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.6.21})$$

Devido à simetria esférica das superfícies de energia constante,

$$\int \frac{dS_{q'}}{\hbar^2/m q'} (q_v'^2 - 2q'_v k_v + k_v^2) = \frac{4\pi m}{3\hbar} (q'^3 + 3q' k_v^2) . \quad (\text{A.6.22})$$

Ficamos então com a integral em $\vec{k}$,

$$\begin{aligned} \int d^3 k f_{k \uparrow} (1 - f_{k \uparrow}) (q'^3 + 3q' k_v^2) &= \frac{k_B T m}{\hbar^2 k_F} \int_{S_{F \uparrow}} dS_k (q'^3 + 3q' k_v^2) \\ &= \frac{k_B T m}{\hbar^2 k_F} [q'^3 4\pi k_{F \uparrow}^2 + 4\pi q' k_{F \uparrow}^4] = \frac{4\pi k_B T m}{\hbar^2} (q'^3 k_{F \uparrow}^3 + q' k_{K \uparrow}^3) \end{aligned} \quad (\text{A.6.23})$$

Usando a condição (A.6.20).

$$\frac{\hbar^2}{2m} q'^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 + 2\mu H_e , \quad (\mu \equiv \mu)$$

e que

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_{F \uparrow}^2 = E_F - b H_e , \quad (b \equiv \mu_B)$$

obtemos que

$$(q' k_F^3 + q' k_F^2) = \frac{4m^2}{h^4} (E_F^2 - b^2 H_e^2)^{1/2} 2E_F . \quad (\text{A.6.24})$$

De modo que, finalmente,

$$I_1 = \frac{2}{3\pi^4} \left(\frac{V^2 m^4 k_B T}{h^7} \right) (E_F - b^2 H_e^2)^{1/2} E_F \quad (\text{A.6.25})$$

De modo análogo obtemos as outras integrais:

$$I_2 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta(\omega_2) f_{k+q, \uparrow} (1 - f_{k\downarrow}) = I_1 \quad (\text{A.6.26})$$

$$I_3 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta(\omega_1 \pm \omega_0) f_{k+q, \downarrow} (1 - f_{k\uparrow}) = \frac{2}{3\pi^4} \left(\frac{V^2 m^4 k_B T}{h^7} \right) f(E_F \pm \mu H_0)$$

$$[(E_F - b H_e) (E_F + b H_e \mp \mu H_0)]^{1/2} (2E_F \mp \mu H_0) , \quad (\text{A.6.27})$$

$$I_4 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta(\omega_2 \pm \omega_0) f_{k+q, \uparrow} (1 - f_{k\downarrow}) = I_3 (-H_e) ,$$

$$I_5 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta(\omega_3) f_{k+q, s} (1 - f_{k, s}) = \frac{2}{3\pi^4} \left(\frac{V^2 m^4 k_B T}{h^7} \right) (E_F - s b H_e)^2 \quad (\text{A.6.28})$$

$$I_6 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta(\omega_3 \pm \omega_0) f_{k+q, s} (1 - f_{k, s}) = \frac{2}{(3\pi)^4} \left(\frac{V^2 m^4 k_B T}{h^7} \right)$$

$$f(E_F \pm \mu H_0) [(E_F - s b H_e) (E_F - s b H_e \mp \mu H_0)]^{1/2} [2(E_F \mp b H_e) \mp \mu H_0] , \quad (\text{A.6.29})$$

e

$$I_7 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_v^2 \delta_{\vec{q}, \vec{Q}} f_{k+q, s} (1 - f_{ks, '}) = \frac{V}{4\pi^2} \frac{m^2 k_B T}{h^3} Q \delta_{v, z} . \quad (\text{A.6.30})$$

Tabela 1: Razões entre as integrais: (I_2/I_1) , (I_3/I_1) e (I_4/I_1) , como funções do limite inferior, ε_1 , de integração

ε_1	I_2/I_1	I_3/I_1	I_4/I_1
10^{-3}	1,19	3,08	25
10^{-2}	1,14	2,16	7,52
10^{-1}	1,00	1,27	2,03
1	0,70	0,51	0,39
10	0,30	0,09	0,03
20	0,22	0,05	0,01

Tabela 2: Valores máximos das constantes C_1 , C_2 , C_3 e C_4 , em ($\mu\Omega$ em $^{\circ}\text{K}^{-1}$) como funções do parâmetro $X = \lambda/a$.

X	C_1	C_2	C_3	C_4
2,5	$1,14 \times 10^{-9}$	$7,64 \times 10^{-9}$	$1,59 \times 10^{-7}$	$2,57 \times 10^{-5}$
5	"	$3,82 \times 10^{-9}$	$3,98 \times 10^{-8}$	$3,21 \times 10^{-6}$
10	"	$1,91 \times 10^{-9}$	$9,96 \times 10^{-9}$	$4,02 \times 10^{-7}$
15	"	$1,27 \times 10^{-9}$	$4,43 \times 10^{-9}$	$1,19 \times 10^{-7}$
20	"	$9,56 \times 10^{-10}$	$2,49 \times 10^{-9}$	$5,02 \times 10^{-8}$
25	"	$7,64 \times 10^{-10}$	$1,59 \times 10^{-9}$	$2,57 \times 10^{-8}$
30	"	$6,37 \times 10^{-10}$	$1,11 \times 10^{-9}$	$1,49 \times 10^{-8}$
35	"	$5,46 \times 10^{-10}$	$8,13 \times 10^{-10}$	$9,36 \times 10^{-9}$
40	"	$4,78 \times 10^{-10}$	$6,23 \times 10^{-10}$	$6,27 \times 10^{-9}$
45	"	$4,25 \times 10^{-10}$	$4,92 \times 10^{-10}$	$4,41 \times 10^{-9}$
50	"	$3,82 \times 10^{-10}$	$3,98 \times 10^{-10}$	$3,21 \times 10^{-9}$
100	"	$1,91 \times 10^{-10}$	$9,96 \times 10^{-11}$	$4,02 \times 10^{-10}$

Tabela 3: Razões entre as constantes (C_{2V}/C_{2S}) e (C_{4V}/C_{4S}) de mesma dependência com a temperatura, como função do parâmetro $X = \lambda/a$.

X	C_{2V}/C_{2S}	C_{4V}/C_{4S}
2,5	$3,69 \times 10^{-6}$	$1,70 \times 10^{-3}$
5	$7,39 \times 10^{-6}$	$3,41 \times 10^{-3}$
10	$1,48 \times 10^{-5}$	$6,83 \times 10^{-3}$
15	$2,21 \times 10^{-5}$	$1,03 \times 10^{-2}$
20	$2,95 \times 10^{-5}$	$1,36 \times 10^{-2}$
25	$3,69 \times 10^{-5}$	$1,70 \times 10^{-2}$
30	$4,42 \times 10^{-5}$	$2,05 \times 10^{-2}$
35	$5,15 \times 10^{-5}$	$2,38 \times 10^{-2}$
40	$5,91 \times 10^{-5}$	$2,73 \times 10^{-2}$
45	$6,65 \times 10^{-5}$	$3,06 \times 10^{-2}$
50	$7,39 \times 10^{-5}$	$3,41 \times 10^{-2}$
100	$1,48 \times 10^{-4}$	$6,83 \times 10^{-2}$

Tabela 4: Magnetoresistividade, com campo externo aplicado no plano basal, com estrutura inicial tipo cone, para valores crescentes de T e $\vec{H}_e$.

T/T_N	$\mu H_e / K_B T$	$10^2 \Delta\rho(T, H_e)$
0,05	0,001	7,93
	0,01	7,93
	0,1	7,93
	0,2	7,89
	0,5	7,39
	1,0	5,62
	1,5	3,06
	2,0	- 0,30
	2,1	- 9,56
	2,5	- 39,47
	3	- 63,24
0,06	0,1	6,64
	0,2	6,56
	0,3	6,40
	0,5	5,96
	1,0	4,00
0,07	0,1	5,65
	0,5	4,90
	1,0	2,65
0,08	0,5	4,08
0,09	0,5	3,38
0,1	0,5	2,88
0,2	0,5	- 0,04

Tabela 5: Magnetoresistividade, com campo externo aplicado no plano basal, com estrutura inicial tipo hélice, para valores crescentes de T e $\vec{H}_e$.

T/T_N	$\mu H_e/k_B T_N$	$10^2 \Delta\rho(T, H_e)$
0,1	0,001	- 0,42
	0,01	- 7,47
	0,1	- 62,11
0,2	0,001	- 0,55
	0,01	- 5,04
	0,1	- 40,08
0,3	0,001	- 0,37
	0,01	- 3,58
	0,1	- 30,15
0,4	0,001	- 0,30
	0,01	- 3,00
	0,1	- 25,34
0,5	0,001	- 0,30
	0,01	- 2,77
	0,1	- 23,17
0,6	0,001	- 0,29
	0,01	- 2,8
	0,1	- 22,62
0,7	0,001	- 0,33
	0,01	- 3,00
	0,1	- 23,23
0,8	0,001	- 0,42
	0,01	- 3,54
	0,1	- 24,73
0,9	0,001	- 0,53
	0,01	- 4,54
	0,1	- 27,02

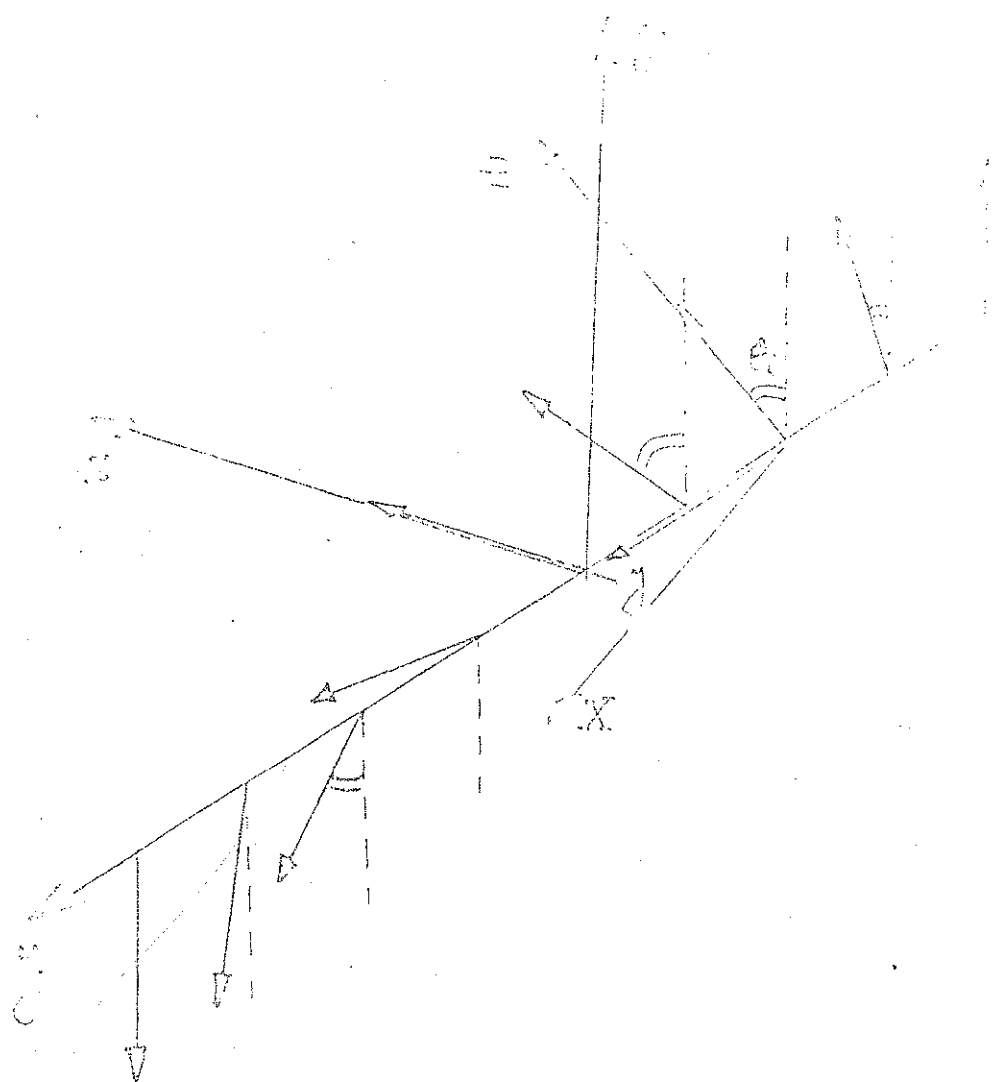


figura 1: Parede de Bloch de 180°

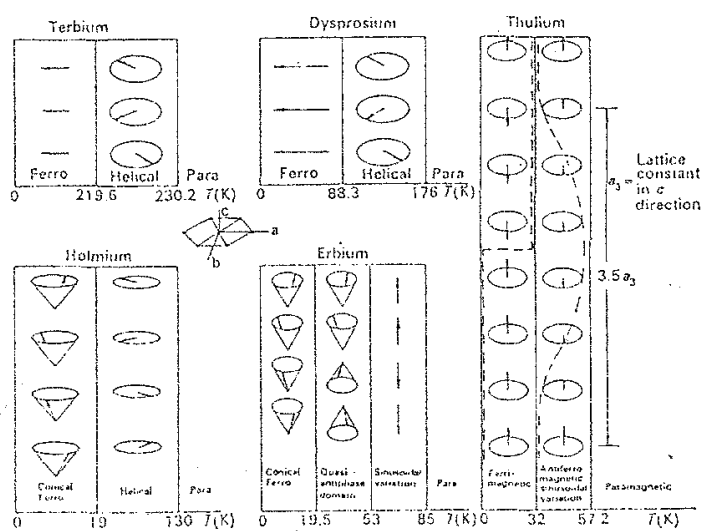


figura 2: Estruturas magnéticas das Terras Raras (Legvold, 1972)

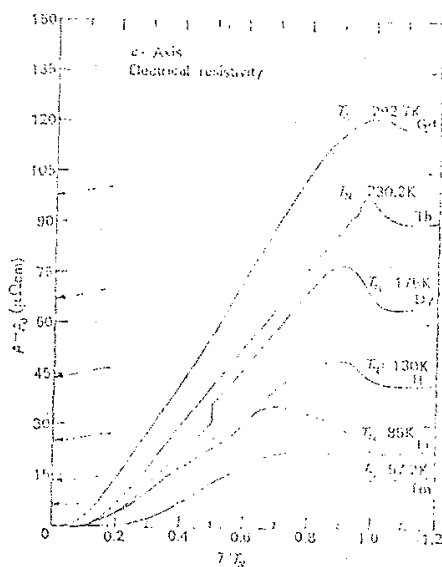


figura 4: Resistividade ρ_c como função da temperatura para metais de Terras Raras (Legvold, 1972)

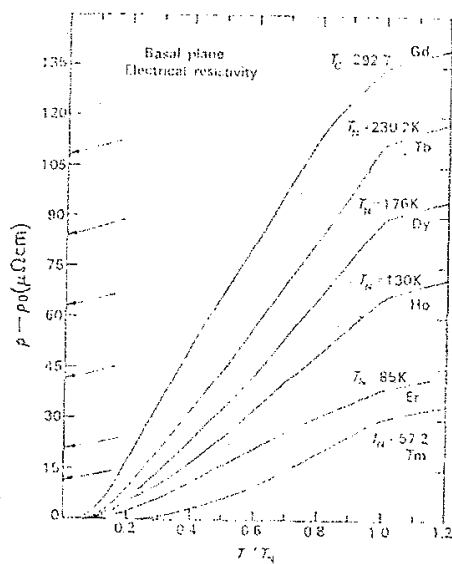


figura 5: Resistividade ρ_b como função da temperatura para metais de Terras Raras (Legvold, 1972)

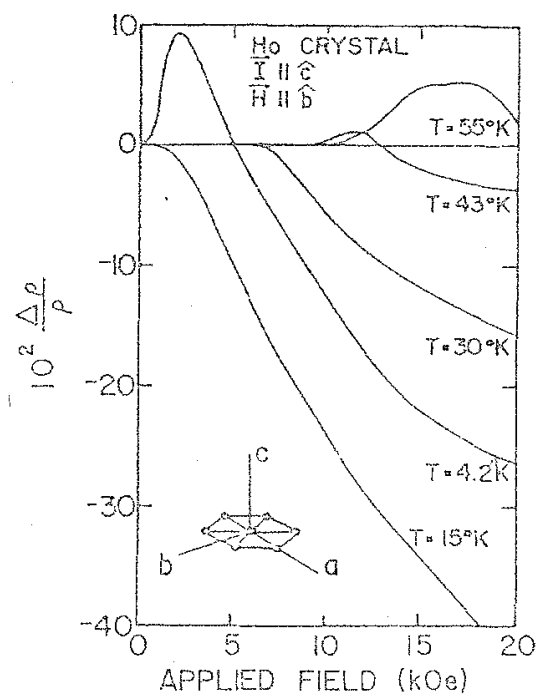


figura 6: Magnetoresistividade $\Delta\rho_c$ do Holmio em função do campo externo aplicado na direção b (Akhavan e Blackstead, 1976)

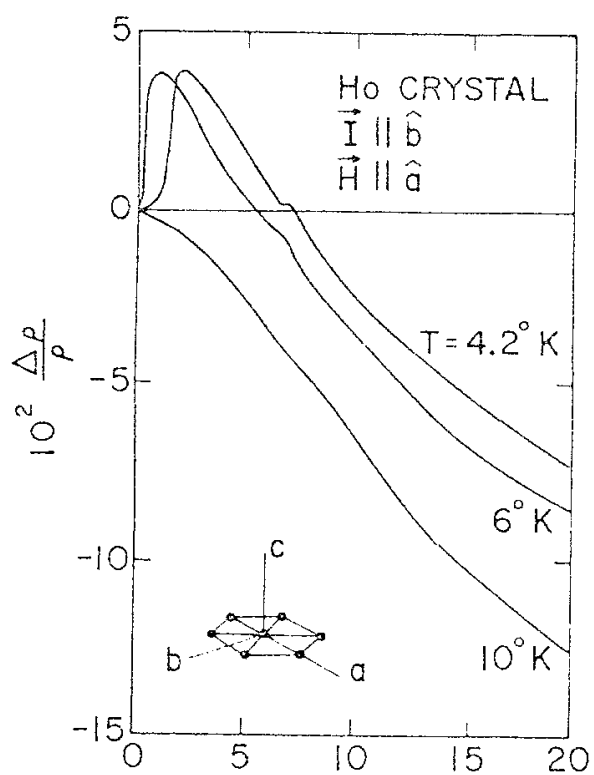


figura 7: Magnetoresistividade $\Delta \rho_b$ do Holmio como função do campo externo aplicado na direção $\hat{a}$ (Akhavan e Blackstead, 1976)

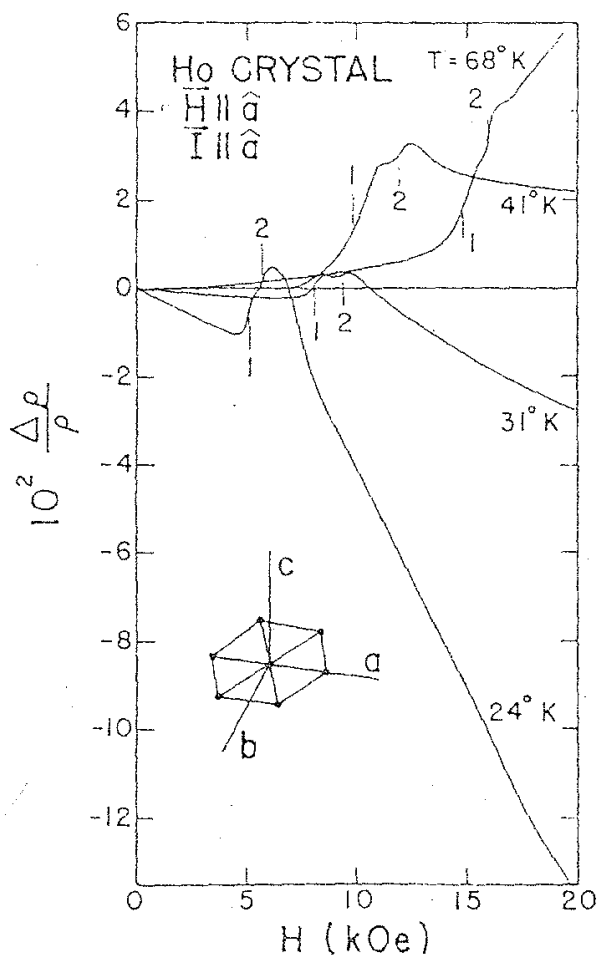


figura 8: Magnetoresistividade $\Delta \rho_a$ do Holmio como função do campo externo aplicado na direção a (Akhavan e Blackstead, 1976)

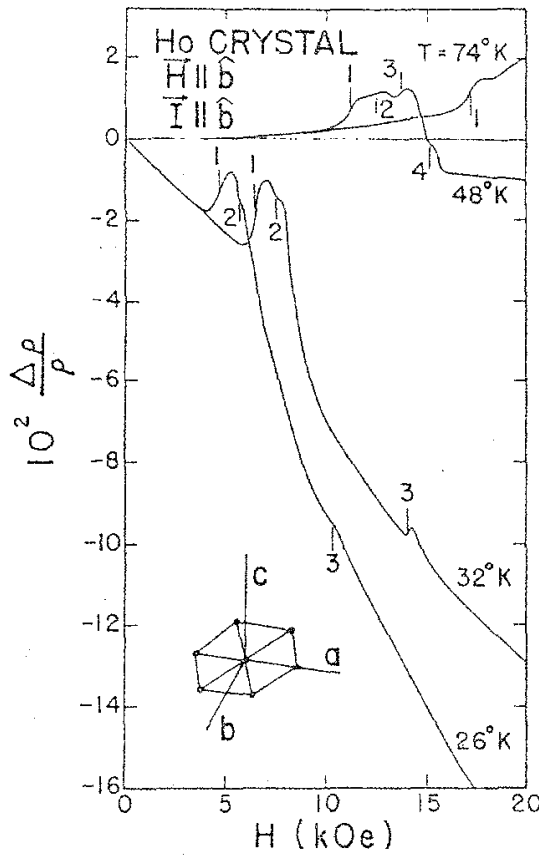


figura 9: Magnetoresistividade $\Delta \rho_b$ do Holmio como função do campo externo aplicado na direção b (Akhavan e Blackstead, 1976)

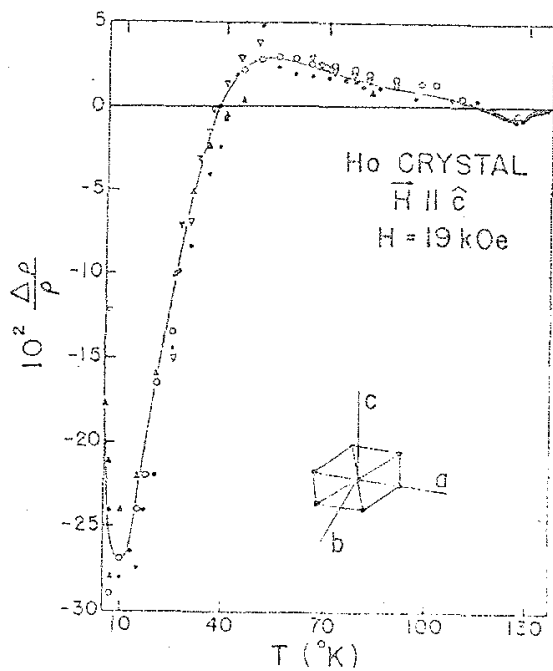


figura 10: Magnetoresistividade $\Delta \rho_c$ do Holmio como função da temperatura para um campo externo fixo aplicado na direção c (Akhavan e Blackstead, 1976)

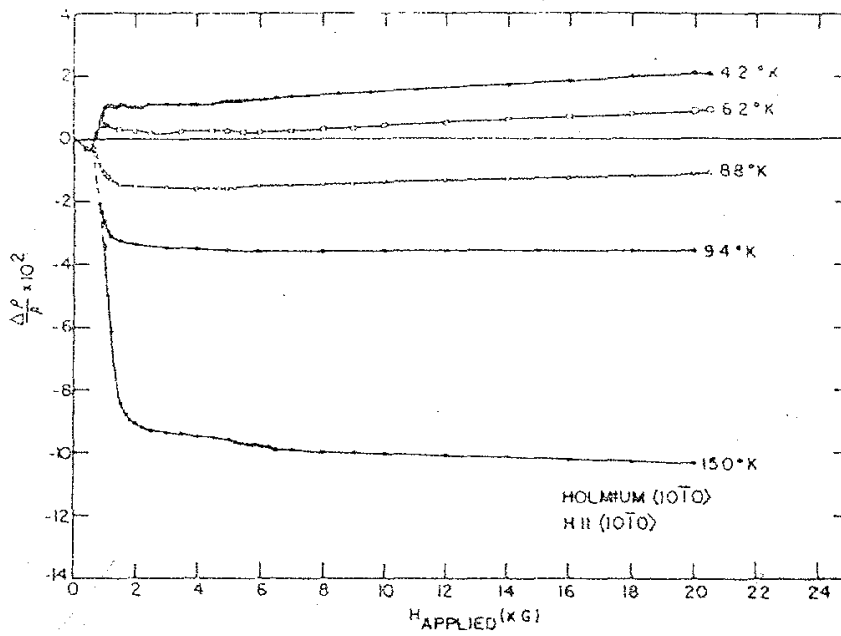


figura 11: Magnetoresistividade $\Delta\rho_b$ de Holmio como função do campo externo aplicado na direção b para temperaturas $T < 20^\circ\text{K}$ (Mackintosh e Spaniel, 1964)

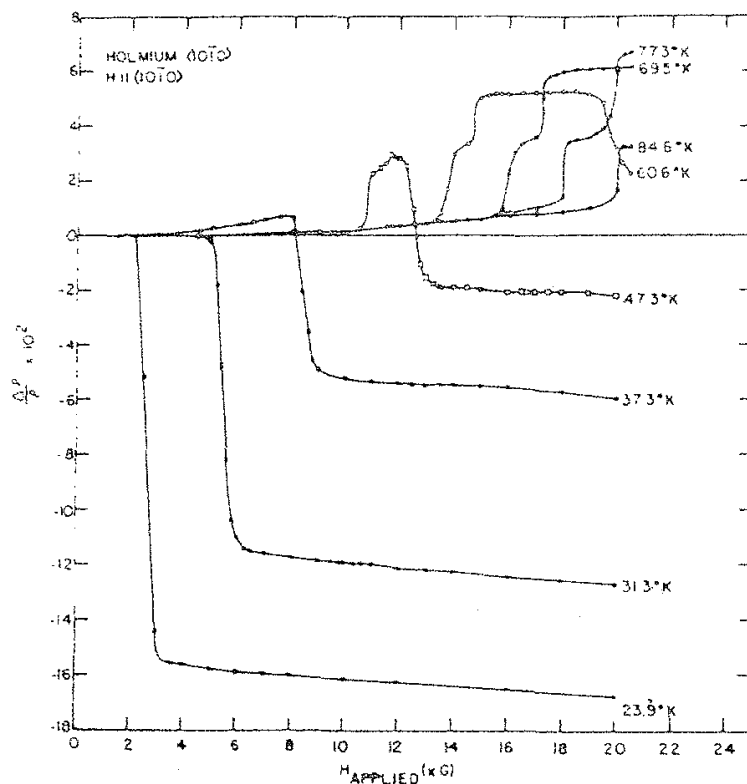


figura 12: Magnetoresistividade $\Delta\rho_b$ do Holmio como função do campo externo aplicado na direção b, para temperaturas $T > 20^\circ\text{K}$ (Mackintosh e Spaniel, 1964)

BIBLIOGRAFIA

- 1) Abragam, A. e Bleaney, B. , Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions (O.U.P., 1970).
- 2) Akhavan, M. e Blackstead, H.A., Phys. Rev. B, 13, 1209 (1976).
- 3) Arellano, M.E.R., Tese de Doutorado, UNICAMP (1979).
- 4) Ashcroft, N.W. e Mermin, N.D., Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- 5) Beitchmann, J.G., Trussel, C.W. e Coleman, R.V., Phys. Rev. Lett., 25, 1291 (1970).
- 6) Bernard, W. e Callen, H.B., Rev. Mod. Phys., 31, 1017 (1959).
- 7) Bozorth, R.M., Gambino, R.J., e Clarck, A.E., J. Appl. Phys., 39, 883 (1968); Proc. Tenth Low Temperature Conference, St. Andrews, Scotland (1968).
- 8) Cable, J.W., Wollan, E.O., Koehler, W.C., e Wilkinson, M.K., Phys. Rev., 140, 1896 (1965).
- 9) Cabrera, G.G., J. Phys. F: Metal Phys., 7, 827 (1977).
- 10) Cooper, B.R., Magnetic Properties of Rare Earth Metals (ed. R.J. Elliott, Plenum Press, 1972).
- 11) Dyakina, V.P., e Volkenshteyn, N.V., Fiz. Metal. Mettallov, 26, 628 (1968).
- 12) Elliott, R.J. e Wedgwood, F.A., Proc. Phys. Soc., 81, 846 (1964).
- 13) Elliott, R.J., e Wedgwood, F.A., Proc. Phys. Soc., 84, 63 (1964).
- 14) Elliott, R.J., Magnetism, IIA (eds. G.T. Rado and H. Suhl, Academic Press, 1965).

- 15) Freeman, A.J., Magnetic Properties of Rare Earth Metals (ed. R.J. Elliott, Plenum Press, 1972).
- 16) Fujita, S., Introduction to Non Equilibrium Quantum Statistical Mechanics, Cap. 4 (W.B. Saunders, Philadelphia & London, 1966).
- 17) Gradshteyn, I.S., e Ryzhik, I.M., Table of Integrals, Series, and Products, 4^a ed., (ed. Alan Jeffrey, Academic Press, 1965).
- 18) Hutchings, M.T., Solid State Physics, 16, 227 (Ed. Seitz e Turnbull, Acad. Press, 1964).
- 19) Jackson, J.D., Classical Electrodynamics, Cap. 3 (John Wiley & Sons, 1962).
- 20) Kasuya, T., Prog. Theor. Phys., 22, 227 (1959).
- 21) Kasuya, T., Prog. Theor. Phys., 16, 45 (1956).
- 22) Khlebopros, R.G., Zakharov, Yu. V., and Man'kov, Yu. I., Soviet. Phys. Solid State, 16, 67 (1974).
- 23) Koehler, W.C., e Wollan, E.O., Phys. Rev., 97, 1177 (1955).
- 24) Koehler, W.C., Cable, J.W., Child, H.R., Wilkinson, M.K., e Wollan, E.O., Phys. Rev., 158, 450 (1967).
- 25) Koehler, W.C., Cable, J.W., Wilkinson, M.K., e Wollan, E.O., Phys. Rev., 151, 414 (1966).
- 26) Kubo, R., J. Phys. Soc. Japan, 12, 570 (1957).
- 27) Landau, L.D., e Lifshitz, E.M., Phys. Z. Soviet Un., 8, 153 (1935).
- 28) Legvold, S., Magnetic Properties of Rare Earth Metals (ed. R.J. Elliott, Plenum Press, 1972).
- 29a) Mackintosh, A.R., e Spänel, L.E., Solid State Comm., 2, 383 (1964).

- 29) Mackintosh, A.R., e Moller, H.B., Magnetic Properties of Rare Earth Metals (ed. R.J. Elliott, Plenum Press, 1972).
- 30) MacLennan Jr., J.A., Phys. Fluids 4, 1319 (1961).
- 31) Mannari, I., Prog. Theor. Phys., 22, 335 (1959).
- 32) Mathews, J. e Walker, R.L., Mathematical Methods of Physics, 2^a ed., Cap. 4 (Benjamin, 1970).
- 33) Merzbacher, E., Quantum Mechanics, 2^a ed., (John Wiley & Sons, 1970).
- 34) Mori, H., Prog. Theor. Phys., 33, 423 (1965).
- 35) Nagamiya, T., Solid State Phys., vol. 20, (eds. Frederick S., David, T., e Henry, E., Academic Press, 1967).
- 36) Nakano, H., Prog. Theor. Phys., 17, 145 (1957).
- 37) Rhyne, J.J., Magnetic Properties of Rare Earth Metal (ed. R.J. Elliott, Plenum Press, 1972).
- 38) Stevens, K.W.H., Proc. Roy. Soc., 218, 553 (1953).
- 39) Taylor, G.E., Isin, A., e Coleman, R.V., Phys. Rev., 165, 621 (1968).
- 40) Turov, E.A., Phys. Metal Metall., 6, 13 (1958).
- 41) Tyablicov, S.V., Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Cap. 3, sec. 10 (Plenum Press, New York, 1967).
- 42) Winter, J.M., Phys. Rev., 124, 452 (1961).
- 43) Yamada, H., e Takada, S., J. Phys. Soc. Japan, 34, 51 (1973).
- 44) Yosida, K., e Watabe, A., Prog. Theor. Phys. (Kyoto, 28, 361 (1962) .

- 45) Zubarev, D.N., Nonequilibrium Statistical Mechanics,
Cap. 3 (eds. P. Gray and P.J. Shepherd, Consultants
Bureau, New York & London, 1974).