

*Este exemplar corresponde  
- redação final de texto definitiva  
de Sr. Donizetti Aparecido dos Santos  
aprovado pela Comissão Julgadora  
financeira Laks 24/04/85*

**ESTRUTURAS MAGNÉTICAS  
DE SUPERFÍCIE**

Donizetti Aparecido dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Bernardo Laks

Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciências.

Campinas - Outubro de 1987

## AGRADECIMENTOS

Ao prof. Bernardo Laks pelo apoio e dedicação constantes.

Ao amigo Sieghart Weinketz pelo auxílio com os programas gráfi-

cos.

A FAPESP e à UNICAMP pelo apoio financeiro.

Aos meus pais,  
Hélio e Tereza

## RESUMO

Estudo do efeito da superfície sobre o espectro de excitação de materiais ferromagnéticos descritos pelo Hamiltoniano de Heisenberg, especialmente aqueles que apresentam competitividade ferro-antiferromagnética na interação entre spins. Determinação do diagrama de estabilidade da estrutura magnética na superfície correspondente a um estado fundamental ferromagnético no volume em função da presença da superfície e da alteração dos parâmetros de troca. Cálculo da dispersão de magnons para um sistema que privilegia a interação antiferromagnética na região superficial. Estado fundamental do sistema quando da reconstrução na superfície. Obtenção das densidades de magnons.

## SUMÁRIO

Capítulo I: Introdução. . . . .	1
Capítulo II: Diagramas de Estabilidade	
2.1 Introdução. . . . .	6
2.2 Ondas de Spin; Magnons. . . . .	6
2.3 Dispersão de magnons para filmes. . . . .	11
2.4 O sistema de spins na presença de campo mag. externo. . . . .	20
Capítulo III: Sistema Reconstruído	
3.1 Introdução. . . . .	24
3.2 O Hamiltoniano do sistema magnético reconstruído. . . . .	25
3.3 O estado fundamental do sistema magnético reconstruído; Ângulos de reconstrução. . . . .	30
3.4 Dispersão de magnons para o sistema mag. reconstruído. . . . .	34
3.5 A influência do campo magnético externo no sistema reconstruído. . . . .	42
Capítulo IV: Densidade de magnons	
4.1 Introdução. . . . .	46
4.2 Equações para as funções de Green. . . . .	46
4.3 Densidade espectral de magnons. . . . .	53
Capítulo V: Conclusões. . . . .	70
Apêndice A: O cálculo da densidade de estados eletrônicos para um modelo simples. . . . .	72
Referências. . . . .	75

# CAPÍTULO I

## INTRODUÇÃO

O estudo de fenômenos cooperativos num sistema de grande número de partículas interagentes, como a supercondutividade, é um campo muito ativo da física teórica. O modelo proposto inicialmente por Heisenberg<sup>1</sup> e Frenkel<sup>2</sup> foi o primeiro grande passo para a compreensão do magnetismo como um fenômeno cooperativo e que possibilitou grandes progressos no entendimento dos materiais isolantes magnéticos incluindo a natureza das transições de fase ferromagnéticas e antiferromagnéticas. Também grande parte dos trabalhos sobre as excitações elementares em sistemas magnéticos fundamenta-se nesse modelo.

O modelo de Heisenberg está baseado no conceito de interação de *exchange*. A interação de *exchange* tem origem no princípio de exclusão de Pauli e não tem análogo clássico. Ela pode ser entendida como a diferença de energia entre a configuração de spins paralelos e anti-paralelos<sup>3</sup> uma vez que segundo o princípio de exclusão de Pauli os elétrons de spins paralelos se mantêm separados reduzindo assim sua repulsão columbiana. A energia de troca é favorável ao ferromagnetismo somente em circunstâncias raras como no ferro, pois o decréscimo em energia potencial proporcionado deve ser balanceado com o aumento de energia cinética associado aos spins paralelos. Assim as forças que regulam a configuração de spins nos sólidos via princípio de Pauli são

eletrostáticas e não as forças de dipolo magnéticas que são muito mais fracas. Então assumindo-se uma energia  $-J_{ij}$  associada à *exchange* Dirac, Heisenberg e Van Vleck<sup>4</sup> chegaram a um Hamiltoniano efetivo proporcional ao produto  $J_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j$ . Dirac mostrou a possibilidade de se partir da interação columbiana e se chegar ao hamiltoniano efetivo conhecido como Hamiltoniano de Heisenberg<sup>5</sup> enquanto outros tentaram obter a interação de *exchange* a partir de parâmetros atômicos<sup>6</sup>. No entanto devido à impossibilidade de obter a interação de *exchange* a partir de um princípio universal e à boa descrição que o modelo de Heisenberg fornece das propriedades magnéticas de substâncias fortemente magnéticas os parâmetros de *exchange* são tratados como quantidades fenomenológicas<sup>7</sup>.

Os estados que diagonalizam o hamiltoniano de Heisenberg consistem de desvios de spin com relação à direção de magnetização que se propagam como ondas planas ao longo do sistema magnético e são chamadas de ondas de spin, estudadas inicialmente por Bloch<sup>8,9</sup>. O quantum de energia da onda de spin é chamado de magnon e como extensão de linguagem a própria excitação é também chamada de magnon. A baixas temperaturas podemos desconsiderar a interação entre magnons e tratá-los estatisticamente como um sistema de bósons ideais<sup>10,11</sup>.

Nesse trabalho apresentamos um estudo do efeito da superfície sobre o espectro de excitações de sistemas ferromagnéticos descritos pelo Hamiltoniano de Heisenberg. A introdução da superfície num cristal provoca uma modificação nas funções de Bloch que caracterizam as excitações de um cristal infinito particularmente na região próxima a superfície<sup>12</sup>. Além disso novos estados podem ser obtidos, locali-

zados nesta região cuja energia se situa num gap no espectro de energias dos estados do volume; a função de onda dos estados de superfície decaem rapidamente para dentro do cristal e também no vácuo, se sua energia estiver abaixo do nível do vácuo. Portanto os estados são localizados na direção em que ocorre a perda de simetria; na direção paralela ao plano da superfície o comportamento é do tipo Bloch. Essa característica é fundamental na escolha dos modelos matemáticos que utilizaremos para a descrição do problema.

Wallis e outros<sup>13</sup> propuseram a existência de magnons de superfície para o caso de um sistema cúbico simples em analogia ao problema de vibrações em um cristal analisando sua dependência com a superfície do cristal. Esse e demais estudos sobre a estrutura dos magnons de superfície foram realizados tanto na ótica de cristal semi-infinito como para filmes<sup>14</sup>.

Entretanto os trabalhos teóricos citados acima pressupunham ao tratarem as propriedades superficiais de sistemas magnéticos que na superfície a configuração de spins era a mesma do volume do material, ou seja, se o material é ferromagnético no volume sua configuração na superfície, ainda que os parâmetros de acoplamento sejam distintos do volume, pressupõe alinhamento ferromagnético. Entretanto nosso trabalho se baseia no estudo de materiais que não compactuam com essa interpretação como por exemplo os calcogenetos de Európio cuja característica fundamental é que sendo ferromagnéticos no volume apresentam interação anti-ferromagnética entre segundos vizinhos<sup>15</sup>. Essa característica aliada à presença da superfície é suficiente para criar em determinadas circunstâncias instabilidade do arranjo ferromagnético



na superfície<sup>16</sup> de modo a tornar necessária a determinação do novo estado fundamental do sistema magnético; podendo-se então estudar fenômenos de reconstrução do sistema magnético na região superficial.

Essa tese conta então com mais quatro capítulos que enfocam os seguintes temas: Diagramas de Estabilidade, Sistema Reconstruído, Densidade de Magnons e conclusões.

A presença da superfície provoca a perda de simetria translacional em uma direção, tornando-se então adequada a utilização do formalismo de espaço recíproco em apenas duas dimensões resultando no surgimento da Zona de Brillouin bi-dimensional. A diferença tanto na ordem de grandeza e do caráter ferro-antiferro do acoplamento entre primeiros e segundos vizinhos e também a diferenciação desses parâmetros na superfície coloca em evidência a determinação da estabilidade do sistema magnético para diversos valores das integrais de acoplamento e é o assunto central do segundo capítulo. Apresentaremos diagramas de estabilidade para os sistemas magnéticos com estrutura cúbica simples e cúbica de face centrada, mostrando também a influência de campos magnéticos externos na estabilidade. Abordaremos o método de filmes para a obtenção da dispersão de magnons e discutiremos o problema da determinação do novo estado fundamental e o fenômeno de reconstrução do sistema magnético quando os valores dos parâmetros de acoplamento colocam em cheque o estado fundamental ferromagnético nos planos próximos à superfície.

Já no terceiro capítulo descreveremos o sistema reconstruído com maior detalhe ressaltando o aparecimento das duas sub-redes (sistema cúbico simples). Trataremos a introdução dos operadores de

criação e destruição de magnons para cada sub-rede e a obtenção do novo hamiltoniano para o sistema. A partir dele, da condição de minimização de energia e da aproximação de onda de spin obtêm-se os ângulos de reconstrução e então as novas curvas de dispersão.

O quarto capítulo é dedicado à exposição dos cálculos da densidade espectral de magnons tanto para filmes como para sistemas semi-infinitos. Desenvolveremos todo o formalismo das funções de Green de Zubarev<sup>17</sup> e mostraremos que utilizando o desacoplamento de Tyablikov<sup>18</sup> a equação de Dyson pode ser resolvida como por exemplo pelo método da matriz transferência<sup>19</sup>.

Finalmente no último capítulo faremos as conclusões finais e comentaremos as possibilidades abertas pelo problema.

## CAPÍTULO II

### DIAGRAMAS DE ESTABILIDADE

#### 2.1 Introdução

Estamos interessados na determinação das excitações magnéticas de superfície em materiais que apresentam competição ferro-antiferromagnética. Tais sistemas são supostos ferromagnéticos no volume e apresentam interação antiferromagnética entre segundos vizinhos<sup>15</sup>. Neste caso a presença da superfície pode alterar o equilíbrio das interações competitivas, que determinam o estado fundamental ferromagnético no cristal infinito, em uma região próxima à superfície<sup>16</sup> e conseqüentemente o arranjo de spins pode ser mais complexo podendo ocorrer o análogo magnético da reconstrução de superfície para o caso eletrônico<sup>20</sup>.

Nesse capítulo inicialmente obtemos o espectro de excitações de ondas de spin para filmes constituídos de um número finito de planos atômicos utilizando como base estados adequados à situação de perda de simetria translacional provocada pela presença das superfícies. A partir do espectro de excitação podemos construir diagramas de estabilidade para o sistema magnético. A influência de campos magnéticos externos sobre os diagramas de estabilidade é analisada na parte final do capítulo.

#### 2.2 Ondas de Spin: Magnons

Concentramos nossa atenção em um sistema de spins de magnitude  $S$  distribuídos em uma rede cúbica simples com superfície (100). Consideramos que no volume os spins se acoplam através de interações de *exchange*  $J_1$  entre primeiros vizinhos e  $J_2$  entre segundos vizinhos. Em nosso modelo  $J_1$  sempre representará uma interação do tipo ferromagnética e  $J_2$  do tipo antiferromagnética. Ainda supomos que o valor das constantes de *exchange* possam diferir no plano da superfície dos valores de volume, denominando-os  $J_1^s$  e  $J_2^s$  para a interação entre primeiros e segundos vizinhos respectivamente. Assim, além da diferença de valor das constantes de troca entre primeiros e segundos vizinhos, o modelo se caracteriza pela competitividade do tipo de interação correspondente na determinação do estado fundamental do sistema ferromagnético. A dinâmica do sistema é definida através do Hamiltoniano de Heisenberg:

$$H = -1/2 \sum_{j,\Delta} J_{j,j+\Delta} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+\Delta} \quad (2.1)$$

onde  $J_{j,j+\Delta}$  é o valor da interação de troca entre os sítios  $j$  e  $j+\Delta$  e  $\vec{S}_j$  o operador de spin para o sítio  $j$ .

Definimos os operadores de criação e destruição de desvios de spin<sup>21</sup>:

$$S^+ = S_x + iS_y \quad (2.2a)$$

$$S^- = S_x - iS_y \quad (2.2b)$$

Podemos então reescrever o hamiltoniano 2.1 em função dos operadores  $S_z$ ,  $S^+$  e  $S^-$  calculados nos sítios  $j$  e  $j+\Delta$ . Obtemos a equação de movimento para o operador  $S^+_j$  calculando-se o comutador  $[S^+_j, H]$  pois:

$$i\hbar dS^+_j/dt = [S^+_j, H] \quad (2.3)$$

Finalmente através das relações de comutação características de operadores vetoriais<sup>22</sup>:

$$[S^+_j, S_{z_l}] = -\hbar S^+_j \delta_{j,l} \quad (2.4a)$$

$$[S^+_j, S^-_l] = 2\hbar S_{z_j} \delta_{j,l} \quad (2.4b)$$

obtemos a equação de movimento para  $S^+_j$ :

$$\hbar dS^+_j/dt = \hbar/2 \sum_{j,\Delta} J_{j,j+\Delta} (S^+_j S_{z_{j+\Delta}} - S_{z_j} S^+_{j+\Delta}) \quad (2.5)$$

Portanto, como podemos observar através da equação acima que acopla a derivada temporal do operador  $S^+_j$  a todos os operadores  $S^+_{j+\Delta}$  dos sítios que interagem com o sítio  $j$ , que um desvio de um spin de um determinado sítio  $j$  da direção de magnetização se propaga via interação coulombiana ao longo de todo o sistema em analogia ao problema de vibrações em uma rede. Então a equação 2.5 derivada a partir de um hamiltoniano fenomenológico (eq. 2.1), que como vimos descreve as características físicas do sistema fielmente, nos leva ao conceito de excitação coletiva, às ondas de spin.

Sabe-se<sup>27</sup> que o espectro de energia de excitações elementares possui características diretamente ligadas à simetria translacional periódica da rede cristalina e à conservação do momento cristalino. O nosso sistema é caracterizado pela presença de superfície ao longo da direção  $z$ , destruindo a simetria translacional ao longo dessa direção. Assim devemos utilizar funções extendidas, tipo Bloch, para a descrição do problema apenas nas direções normais à direção  $z$ , ou seja, é aconselhável utilizarmos tratamentos de espaço recíproco bidimensional combinado com uma função de um parâmetro que varie no espaço real ao longo da direção  $z$ . Então propomos a seguinte solução ondulatória para o operador  $S^+_j$ , compatível com a solução que estamos interessados do problema (ondas de spin):

$$S^+_j(\vec{r}, t) = S(1_z) \exp[i(\vec{k}_\parallel \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (2.6)$$

onde  $l_z$  é um índice que indica o plano de átomos que estamos considerando da família  $[1,0,0]$ ,  $\vec{k}_{||}$  é um vetor de onda bidimensional e  $\vec{l}$  é o vetor de posição do sítio  $j$ .

A propagação do desvio de spin de um sítio para outro é dada pela forma ondulatória da equação 2.6 a qual chamamos de aproximação de onda de spin. O quantum de energia de uma onda de spin é o magnon, e como extensão de linguagem, chamamos ondas de spin de magnons. Assim nesse tipo de excitação coletiva do sistema magnético os spins ao invés de se alinharem ao longo da direção de magnetização (estado fundamental do sistema ferromagnético), precessam em torno do eixo  $z$  formando com a direção de magnetização um pequeno desvio angular. Portanto, como parte da aproximação de onda de spin, consideramos:

$$S_{z,j+\Delta} = S_z \text{ para qualquer } \Delta. \quad (2.7)$$

Finalmente obtemos, a partir da equação de movimento 2.5 e das considerações feitas acima acerca da natureza das excitações estudadas (eq. 2.6 e 2.7), a equação que nos permite obter as curvas de dispersão de magnons:

$$\omega S^+_{j} = S \sum_{j,\Delta} J_{j,j+\Delta} (S^+_{j} - S^+_{j+\Delta}) \quad (2.8)$$

Escrevendo os operadores  $S^+_{j}$  através de sua forma ondulatória a equação acima nos leva a um sistema de equações acopladas do tipo:

$$\omega S(0) = \delta(k)S(0) + \alpha(k)S(1) \quad (2.9a)$$

$$\omega S(n) = \beta(k)S(n) + \alpha(k)[S(n-1)+S(n+1)] \quad (2.9b)$$

Alguns autores<sup>16</sup>, interessados nos estados de superfície, resolveram o sistema propondo um decaimento exponencial de  $S(l_z)$  com relação à  $S(0)$ , obtendo desta forma apenas a dispersão dos magnons superficiais, negligenciando os estados estendidos. Nós utilizamos o mé-

do de filmes, isto é, consideramos um conjunto finito de planos atômicos e o sistema de equações 2.9 pode ser então resolvido exatamente.

É importante ressaltar que o conhecimento da dispersão dos magnons nos permite avaliar a estabilidade do sistema magnético. O sistema em estudo tem como característica fundamental a competitividade do tipo de interação entre primeiros(ferromagnética) e segundos vizinhos(antiferromagnética) e embora tenhamos assumido o sistema inicialmente como sendo ferromagnético o aumento da constante de troca para a interação entre segundos vizinhos pode destruir esse tipo de ordem. Podemos encontrar facilmente o valor crítico da relação  $J_2/J_1$  que separa as fases estável e não estável do sistema ferromagnético para o 'volume' do material, ou seja, para uma região do mesmo suficientemente distante da superfície tal que a sua influência sobre o sistema magnético possa ser desprezada. Em outras palavras podemos considerar a existência de uma simetria translacional nas três direções e reescrever a aproximação de onda de spin(eq.2.6) da seguinte maneira:

$$S_j = S(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \quad (2.10)$$

Agora  $\vec{k}$  é um vetor de onda tridimensional. Utilizando-se da equação acima e da equação 2.8 podemos chegar à relação de dispersão de magnons no volume cuja forma dependerá apenas da estrutura cristalina da rede de spins e da relação entre  $J_1$  e  $J_2$ , tidos como parâmetros. Chamando-se as três componentes do vetor de onda de  $k$  (as três direções são equivalentes) e igualando-se a derivada  $dE/dk$  à zero encontramos a relação  $J_2/J_1$  procurada.

No caso de uma rede de spin em estrutura cúbica simples tem-se:

$$\omega = 6J_1S - 2J_1S(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) + 12J_2S - 4J_2S(\cos k_x a \cos k_y a + \cos k_x a \cos k_z a + \cos k_y a \cos k_z a) \quad (2.11)$$

O m nimo valor desta express o ocorre para o ponto k na dire o de simetria (111). Fazendo  $k_x = k_y = k_z = k$ :

$$d\omega/dk = Ssenka(6J_1 + 24J_2 \cos ka) \quad (2.12)$$

Ent o igualando-se a derivada acima a zero obtemos a rela o  $J_2/J_1$  que separa as regi es est vel e inst vel do sistema ferromagn tico no volume:

$$J_2/J_1 = -0.25 \quad (2.13)$$

  importante notar que esse valor   significativamente diferente do valor encontrado pela teoria de campo m dio que, em virtude do n mero de segundos vizinhos ser o dobro do n mero de primeiros,   -0.5.

### 2.3 Dispers o de Magnons para filmes

Calculamos ent o as curvas de dispers o de magnons para um filme constitu do de N planos, assim o  ndice  $l_z$  (eq.2.6) varia de 0   N-1, sendo esses valores respectivos aos planos de superf cie. A nossa rede de spins tem estrutura c bica simples, a dire o de magnetiza o, que   normal  s superf cies,   assumida como sendo a dire o z. Portanto temos um sistema de N equa es acopladas, duas an logas   equa o 2.9a para os planos das superf cies e as demais s o an logas   equa o 2.9b. Os par metros  $\alpha(k)$ ,  $\beta(k)$  e  $\delta(k)$ , que escrevemos por simplicidade  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\delta$ , s o decorrentes da geometria da rede e do alcance e tipo das intera es



$$\alpha = [6J_1 + 2J_2(\cos k_x a + \cos k_y a)]S \quad (2.14)$$

$$\beta = [6J_1 - 12J_2 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4J_2 \cos k_x a \cos k_y a]S \quad (2.15)$$

$$\delta = [4J_1^S + 4J_2^S + 4J_1 + 4J_2 - 2J_1^S(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4J_2^B \cos k_x a \cos k_y a]S \quad (2.16)$$

Esse sistema pode ser escrito de uma forma matricial, caracterizando um problema de auto-valores:

$$(A - \omega I)X = 0 \quad (2.17)$$

onde  $I$  é a matriz identidade de dimensão  $N \times N$  e a matriz  $A$  do problema é tridiagonal:

$$A = \begin{bmatrix} \delta & \alpha & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & \beta & \alpha & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha & \beta & \alpha & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \alpha & \beta & \alpha \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \alpha & \delta \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

e  $X$  a matriz coluna:

$$X = \begin{bmatrix} S(0) \\ \vdots \\ S(N-1) \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Os elementos da matriz  $A$  são dados em função de  $k_x$  e  $k_y$ , componentes do vetor de onda bi-dimensional  $\vec{k}_{||}$ . Como sabemos em decor-

rência do Teorema de Bloch<sup>24</sup> os pontos pertencentes à primeira célula de Wigner-Seitz do espaço recíproco, conhecida como primeira Zona de Brillouin, nos fornecem toda informação a respeito do espectro de energia de um sistema; neste caso como decorrência da perda de simetria translacional numa direção trabalharemos com uma Z.B. bi-dimensional. Resolvendo o problema de autovalores da eq. 2.17 para pontos do espaço recíproco ao longo de linhas da zona de Brillouin bidimensional do sistema obtemos as curvas de dispersão de magnons. Escolhemos as linhas de alta simetria ligando os pontos conhecidos como  $\Gamma$ , X e  $\Delta$  para o cálculo ( figura 2.1 ).

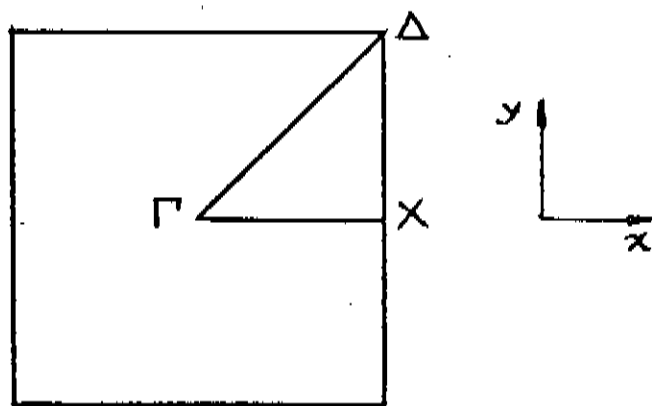


figura 2.1: Zona de Brillouin bi-dimensional para uma rede cúbica simples mostrando linhas de alta simetria

Apresentamos as curvas de dispersão calculadas para filmes de dez planos atômicos para dois casos, no primeiro os valores das constantes de exchange  $J_1^B, J_2^B, J_1^S$  e  $J_2^S$  são respectivamente 1, -0.22, 1 e -0.44 (fig. 2.2) e no segundo 1, -0.22, 1 e -0.6 (fig. 2.3). Escolhemos  $N=10$  pois para esse valor já podemos observar a caracterização de um 'volume' (sistema semi-infinito), como veremos adiante.

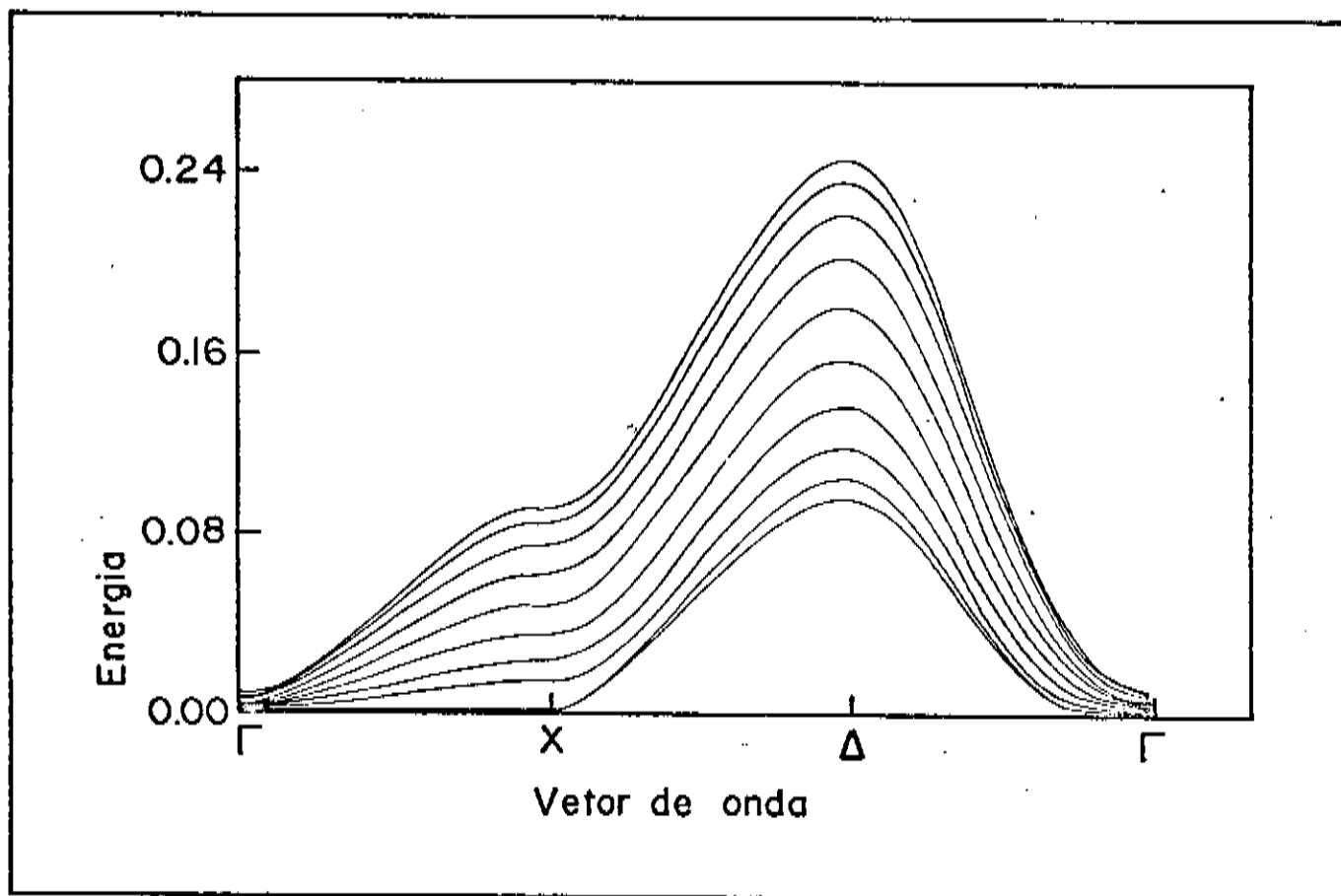


figura 2.2: Dispersão de Magnons ao longo das linhas de alta simetria  $\Gamma$ -X, X- $\Delta$  e  $\Delta$ - $\Gamma$  para um filme de dez planos.  $J_1=1.0$ ,  $J_1^B=1.0$ ,  $J_2=-0.22$  e  $J_2^B=-0.44$ .

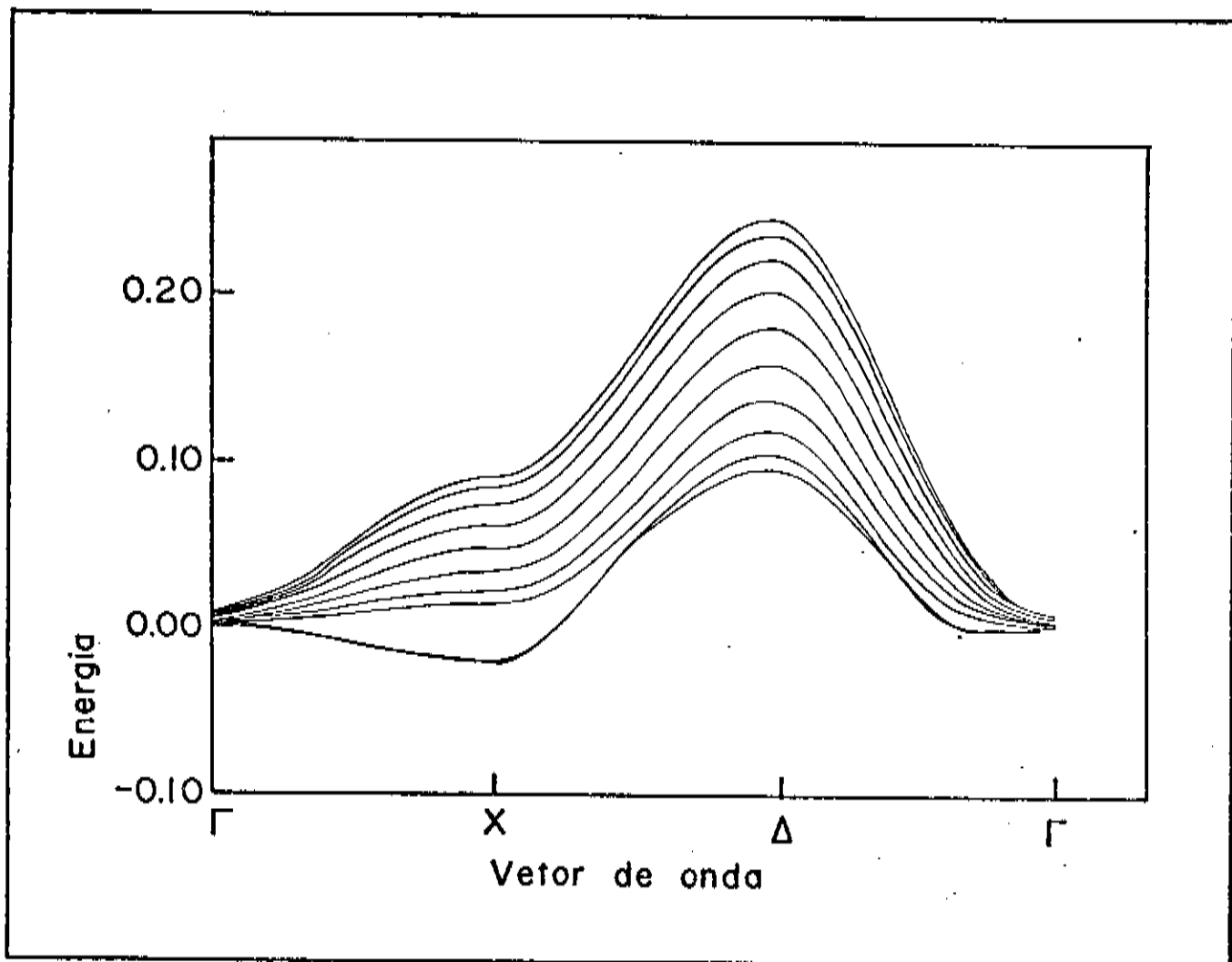


figura 2.3: Dispersão de Magnons ao longo das linhas de alta simetria  $\Gamma$ - $X$ ,  $X$ - $\Delta$  e  $\Delta$ - $\Gamma$  para um filme de dez planos.  $J_1=1.0$ ,  $J_1^S=1.0$ ,  $J_2=-0.22$  e  $J_2^S=-0.6$ .

Em ambos os casos temos 10 curvas sendo que as duas de energia mais baixa apresentam praticamente a mesma dispersão que é significativamente diferente das demais. Ao analisarmos os valores dos parâmetros  $S(n)$  (autovetores do problema, eq. 2.6) para essas curvas de energia mais baixa notamos que, independentemente do ponto da zona de Brillouin, eles apresentam um decaimento exponencial dos planos da superfície para o interior do filme, sendo praticamente nulos em todos os planos internos exceto o primeiro ou segundo imediatamente próximos à superfície. Já para as demais curvas não ocorrem variações significativas dos valores de  $S(n)$  ao longo do filme. Fica portanto evidenciada a presença de *soft modes* de magnons superficiais, ou seja, estados espacialmente localizados próximos ao plano da superfície e de decaimento muito rápido avançando-se para o interior do material. Podemos considerar os outros estados como sendo de 'volume', ou seja, são estados estendidos espacialmente. É importante ter em mente que quando falamos da localização ou extensão de estados de superfície ou volume estamos nos referindo a uma direção em particular, a direção normal às superfícies (que é também a direção de magnetização, a direção z). Nas direções paralelas às superfícies ambos os estados são do tipo Bloch.

Contribuindo para a caracterização do limite semi-infinito, podemos notar que a dispersão dos dois estados de superfície é praticamente idêntica uma a outra em cada caso (figuras 2.2 e 2.3) evidenciando o fato de que no que diz respeito às ondas de spin uma superfície não enxerga a outra. Assim nos casos apresentados a localização dos estados superficiais é de tal ordem que no terceiro ou quarto plano reobtemos os resultados de volume. Portanto a camada superficial não ultrapassa poucos parâmetros de rede (2 ou 3).

As curvas da figura 2.3 representam uma situação importante que trataremos daqui para frente. Nota-se que os modos de energia mais baixa apresentam energias negativas no entorno do ponto X que é o ponto de mínima energia. Obviamente esse resultado não tem sentido físico e mostra que a presença da superfície altera a correlação entre as interações competitivas existentes no sistema. Embora o valor da relação  $J_2/J_1$  corresponda neste caso à região estável do sistema magnético no volume (eq. 2.13), temos a ocorrência de instabilidade evidenciada pela energia negativa dos modos de superfície na região do ponto X. Um átomo do sistema na superfície tem a relação entre o número de primeiros e segundos vizinhos alterada com relação ao volume e também interage com os átomos da superfície via parâmetros de troca diferentes ( $J_1^s$  e  $J_2^s$ ), assim a ordem ferromagnética é destruída nesse sistema supostamente apenas numa região localizada próxima ao plano da superfície do material, segundo as considerações acima. Portanto nesse caso, embora o estado fundamental do volume permaneça ferromagnético, o da superfície (aqui se referindo a um conjunto de planos próximos à superfície física) apresentam uma nova configuração que será obtida adiante (capítulo III) a partir do congelamento do sistema no ponto de energia mínima, o ponto X. Esse fenômeno é o de reconstrução superficial do sistema magnético, caracterizando uma distinção entre as células magnéticas e as células químicas.

Apresentamos na figura 2.4 o diagrama de estabilidade do sistema magnético formado a partir das dispersões no ponto X, uma vez que este é o ponto onde obtem-se, quando da instabilidade magnética, a energia mínima. Os parâmetros apresentados nos fornecem as relações

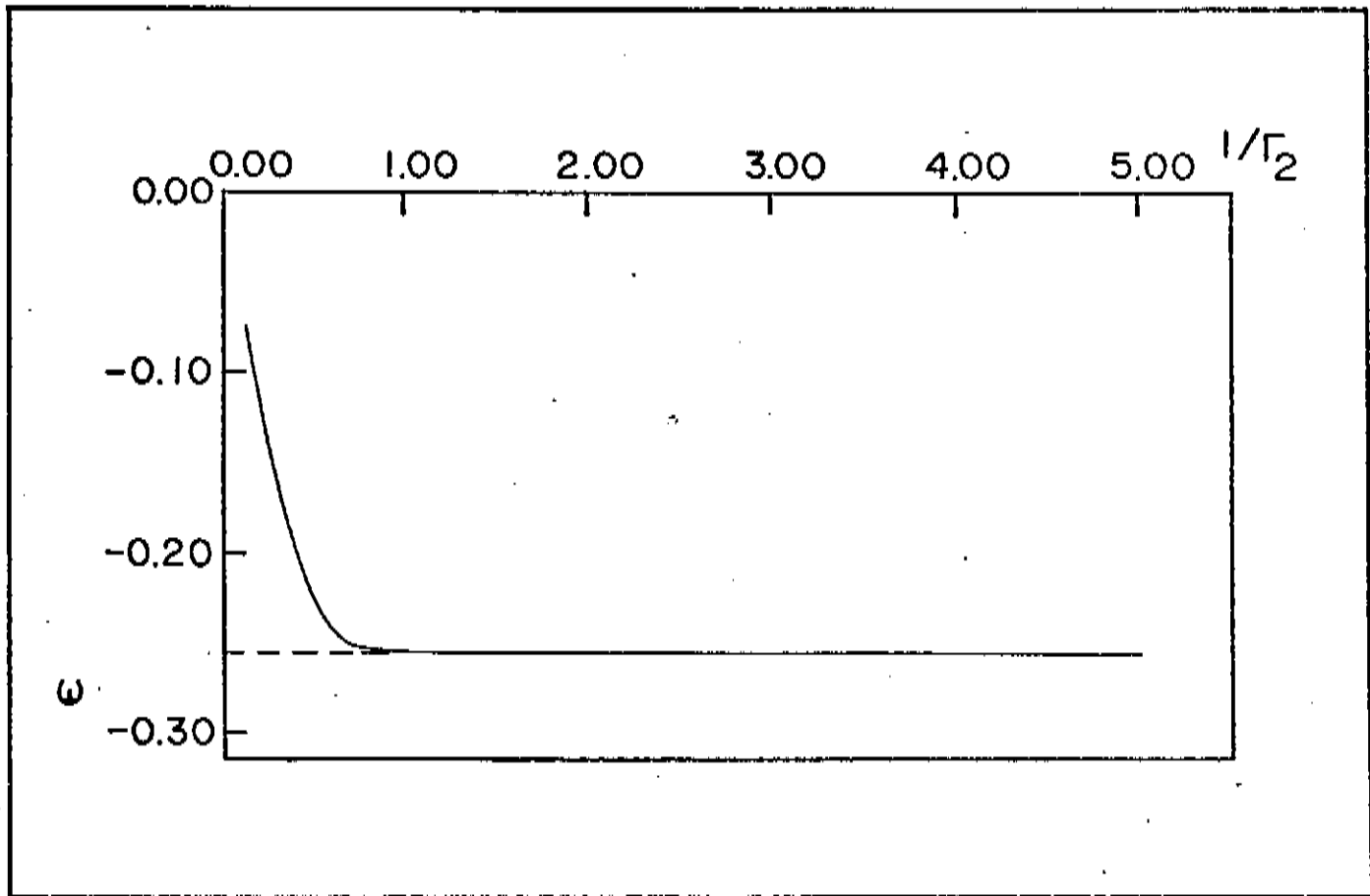





figura 2.4: Diagrama de Estabilidade do sistema de estrutura S.C. no ponto X. A curva separa as regiões estável (acima) e instável (abaixo) no plano  $\epsilon - 1/r_2$ . Valor assintótico de  $\epsilon: -0.256$ .

-  Ponto A Instável
-  Ponto B Instável
-  Ponto A e B Instável

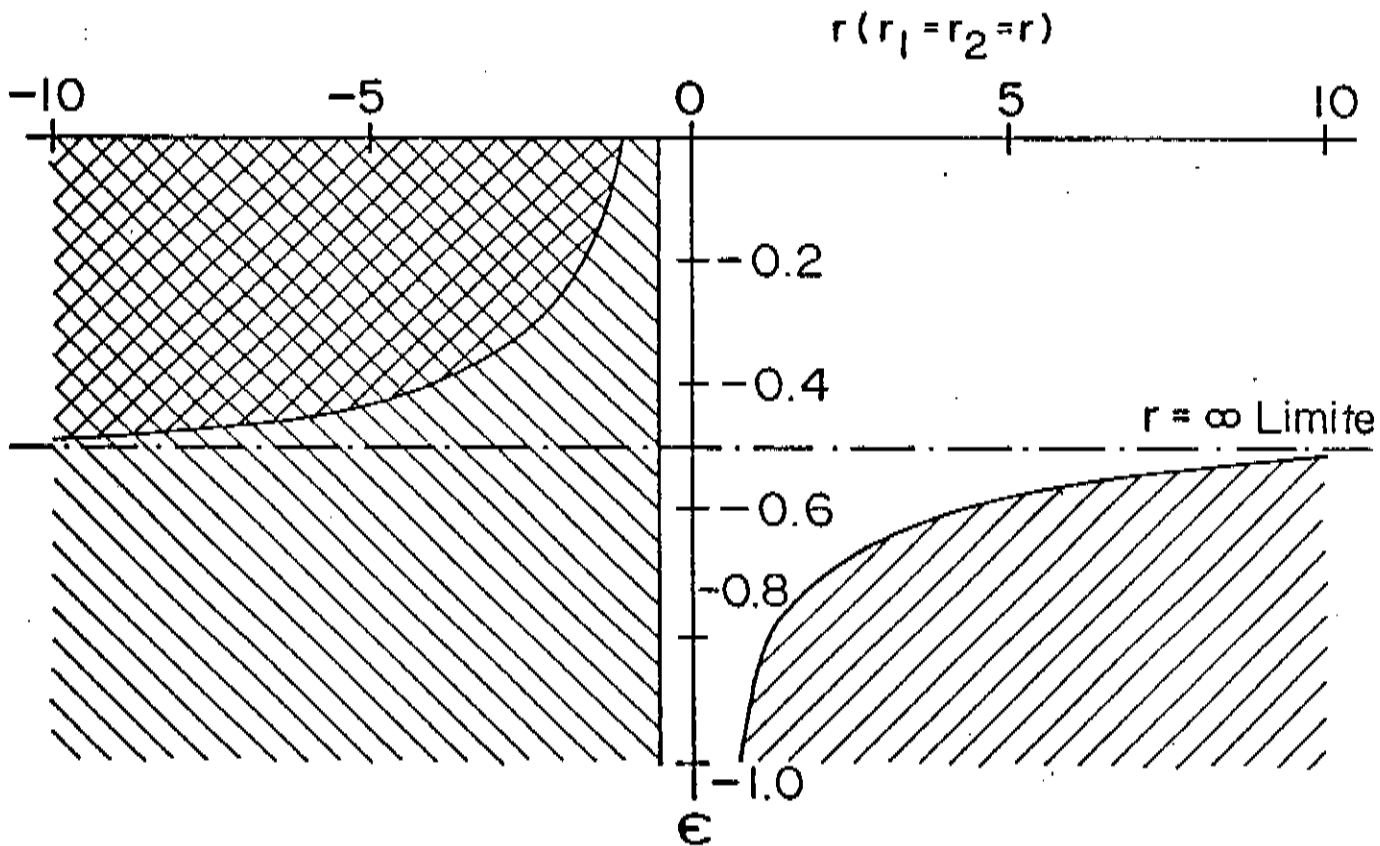


figura 2.5: Diagrama de estabilidade de um sistema de estrutura F.C.C. para a região superficial no plano  $\epsilon$ - $r$  em dois pontos de alta simetria:  $A(k_x=2\pi/a, k_y=0)$ ;  $B(k_x=k_y=\pi/a)$ .



entre as integrais de troca que caracterizam o problema:  $\epsilon = -|J_2|/J_1$  e  $r_2 = J_2^S/J_2$ . Ao contrário do diagrama apresentado na figura 2.5 para uma rede de spins de estrutura F.C.C.<sup>16</sup> considerando-se um sistema semi-infinito onde a relação entre as constantes de *exchange* que caracterizam as interações competitivas é mantida na superfície ( $r_2 = r_1$ , portanto  $J_2^S/J_1^S = J_2/J_1$  com  $r_1 = J_1^S/J_1$ ) alterando-se apenas o valor das mesmas, nós consideramos  $J_1^S = J_1$  e variamos o valor de  $J_2^S$ , que dá a intensidade da interação anti-ferromagnética na superfície, interessados nos valores que destroem a ordem ferromagnética na região superficial para cada valor de  $\epsilon$ .

Para os dois casos quando  $r_2$  tende à zero nós obtemos o valor de  $\epsilon$  para o volume (o valor de  $\epsilon$  para o volume no sistema F.C.C. que separa as regiões estável e não estável é 1.0, também metade do valor previsto pela teoria de campo médio) como poderíamos esperar. Aumentando-se a interação anti-ferromagnética na superfície o valor de  $\epsilon$  vai diminuindo, obviamente, à um valor assintótico que denominamos  $\epsilon_{\infty}$ . É importante notar que no caso do sistema S.C. (fig. 2.4) no eixo das abscissas temos os valores de  $1/r_2$  ao contrário do sistema F.C.C. (fig. 2.5) onde temos os valores de  $r$  ( $r = r_1 = r_2$ ); isso ocorre devido a considerações distintas acerca das interações, conforme discutimos acima.

#### 2.4 O sistema de spins na presença de campo magnético externo

Consideramos aqui a aplicação de um campo magnético externo,  $H_0$ , paralelo à direção de magnetização do sistema. Esse campo ten-

de a fortalecer a ordem ferromagnética no sistema como veremos adiante. Inicialmente para a descrição da nova situação adicionamos o termo  $H_0$  ao hamiltoniano de Heisenberg original<sup>21</sup>:

$$H_0 = -g\beta H_0 \sum_j S_{zj} \quad (2.20)$$

onde  $\beta$  é o magneton de Bohr,  $g$  o fator giromagnético e  $S_{zj}$  a componente  $z$  do vetor  $\vec{S}$  do sítio  $j$ . As mesmas considerações do item 2.1 nos levam a acrescentar o seguinte termo à equação de movimento 2.8:

$$SH_{eff}S^+_{j} \quad (2.21)$$

com

$$H_{eff} = g\beta H_0 / S \quad (2.22)$$

o que finalmente nos leva a acrescentar um termo  $SH_{eff}$  às funções  $\delta$  e  $\beta$  das equações 2.9a e 2.9b para a dispersão.

Apresentamos portanto na figura 2.6 as curvas de dispersão para um filme constituído por dez planos atômicos calculadas pelo mesmo programa anterior acrescentando-se apenas o termo acima, para valores dos parâmetros de troca idênticos aos da figura 2.2 e com  $H_{off} = 0.4$ . O novo diagrama de estabilidade é mostrado na figura 2.7 em comparação com o anterior.

Como resultado esperado vemos na figura 2.6 que a aplicação do campo  $H_0$  provoca um deslocamento positivo de energia das curvas não alterando a dispersão; evidenciando como mostra o diagrama da figura 2.7 que a presença do campo  $H_0$  contribui para o aumento da estabilidade do sistema.

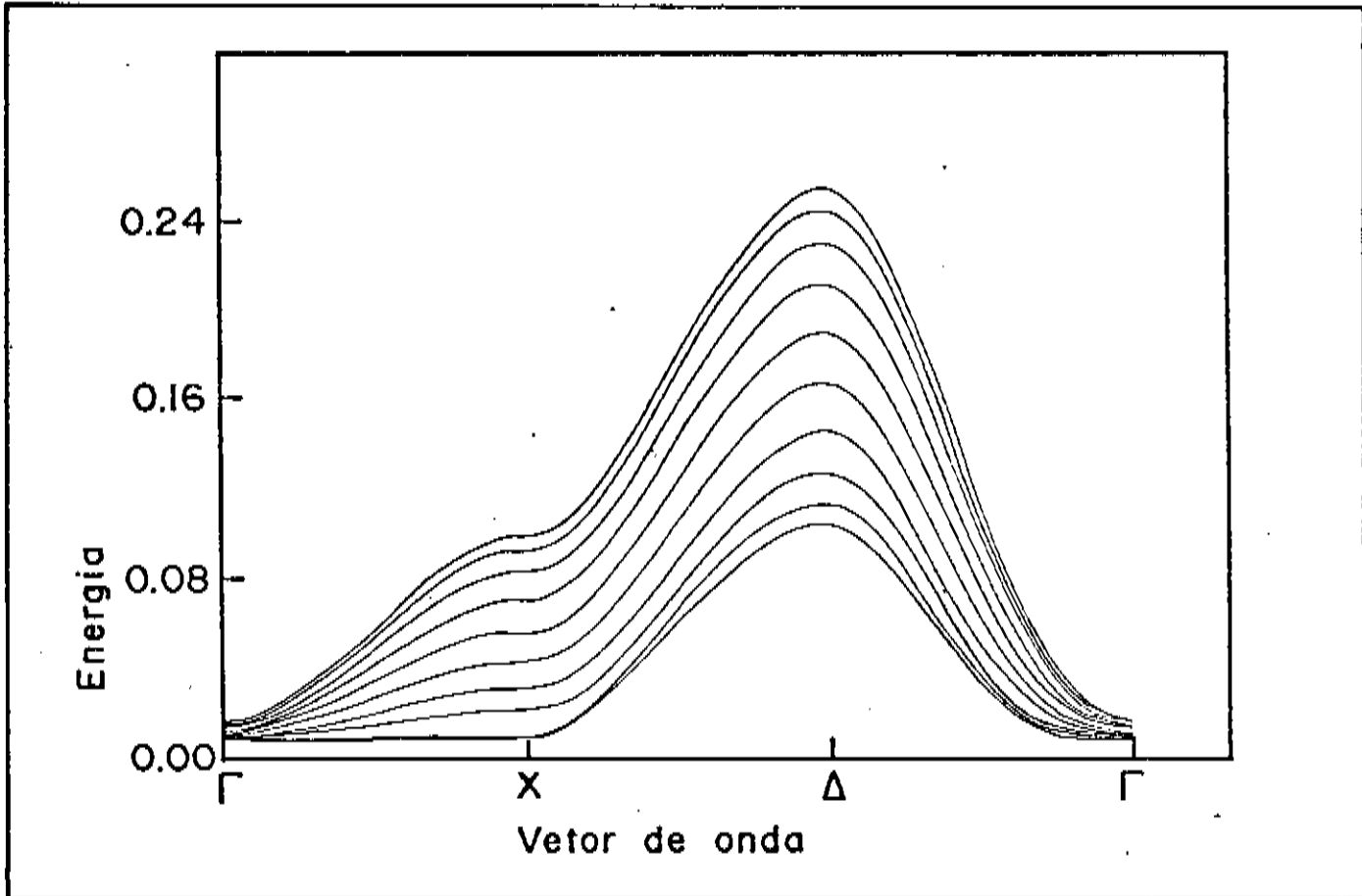


figura 2.6: Dispersão de Magnons ao longo das linhas de alta simetria  $\Gamma$ -X, X- $\Delta$  e  $\Delta$ - $\Gamma$  para um filme de dez planos na presença de campo magnético externo ( $H_{\text{eff}}=0.4$ ).  $J_1=1.0$ ,  $J_1^B=1.0$ ,  $J_2=-0.22$  e  $J_2^B=-0.44$ .

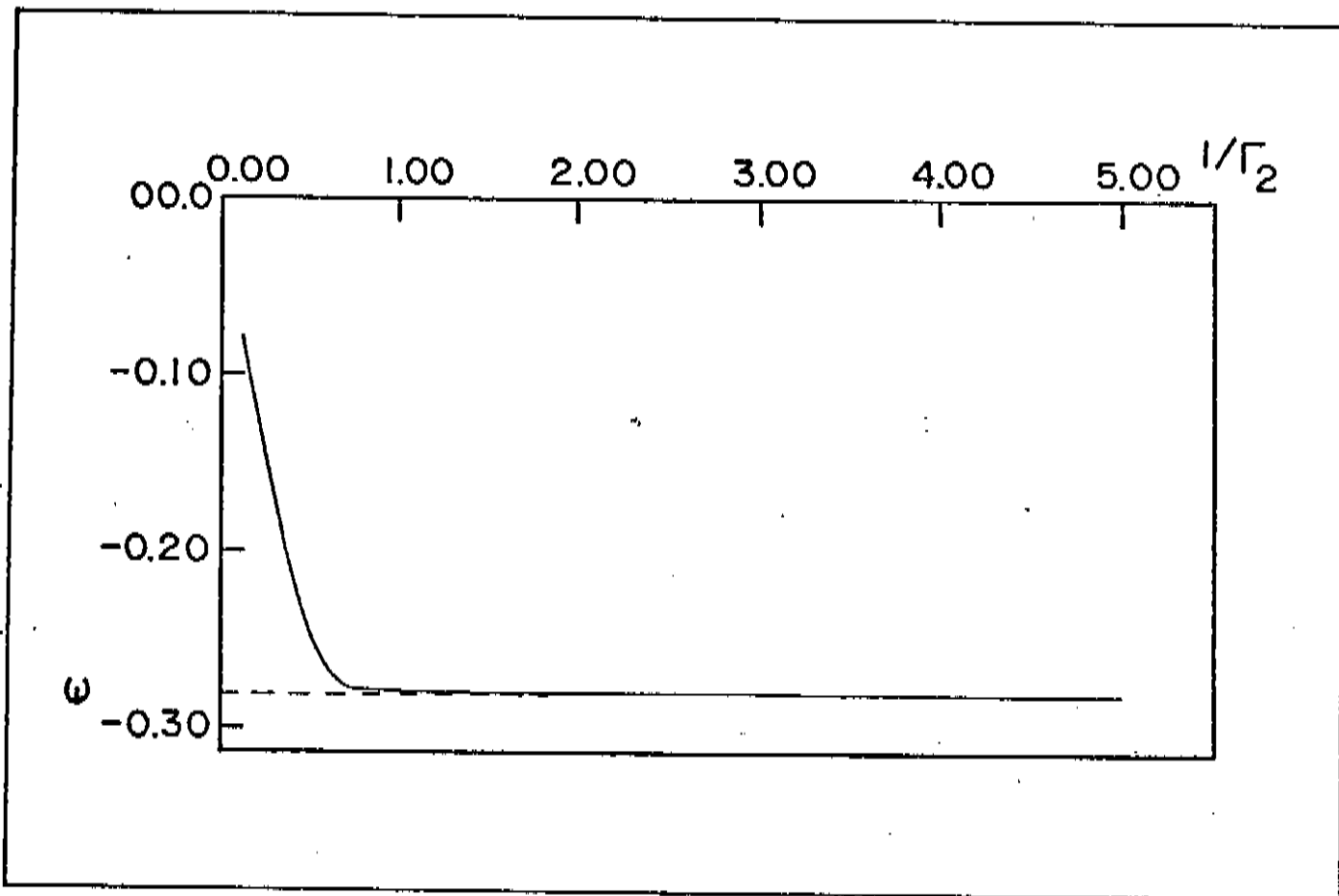


figura 2.7: Diagrama de Estabilidade do sistema de estrutura S.C. no ponto X na presença de campo magnético externo ( $H_{eff} = 0.4$ ). A curva separa as regiões estável (acima) e instável (abaixo) no plano  $E-1/r_2$ . Valor assintótico de  $E$ :  $-0.287$ .

## CAPÍTULO III

### SISTEMA RECONSTRUÍDO

#### 3.1 Introdução

Enfocaremos neste capítulo os sistemas magnéticos em que o caráter competitivo das interações ferromagnéticas e anti-ferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos respectivamente determina um comportamento na região superficial distinto do volume do material; embora o ordenamento ferromagnético prevaleça neste último ele é instável na região superficial. Esse comportamento ficou evidenciado no último capítulo quando obtivemos curvas de dispersão com valores de energia negativos no entorno do ponto X do espaço de Fourier bi-dimensional, no caso de uma rede de spins de estrutura cúbica simples, embora os valores das constantes de *exchange* para o volume caracterizem a estabilidade do sistema nessa região.

Portanto a configuração do estado fundamental do sistema não mais corresponde ao ordenamento ferromagnético. Em trabalhos anteriores<sup>25</sup> considerou-se que neste caso os spins do plano da superfície sofriam um desvio de um determinado ângulo da direção de magnetização; nós consideraremos que esse desvio não se restringe ao plano da superfície propondo que o ângulo de desvio dependa do plano e mostraremos que esse ângulo tende à zero no volume do material.

Descrevemos as excitações coletivas do sistema magnético no capítulo anterior através das ondas de spin para as quais o operador de criação de desvios de spin do sítio  $j$ ,  $S^+_j$ , é descrito por uma onda plana bidimensional extendida ao longo de planos paralelos à superfície do material. Uma vez que a energia mínima era obtida no ponto  $X$  da zona de Brillouin bidimensional (para a rede S.C.), a nova configuração do estado fundamental será obtida através do 'congelamento' do sistema nesse ponto, ou seja, desconsiderando a dependência temporal, ou ainda paralisando o sistema num determinado instante de tempo. Podemos pensar que estaremos obtendo um instantâneo ou fotografia, num instante qualquer, de uma excitação com vetor de onda ou momento definido. Esse congelamento ocasionará o aparecimento de sub-redes para as quais os desvios de spin ocorrerão em determinadas direções caracterizando a reconstrução superficial (para a rede S.C. temos uma reconstrução do tipo  $2 \times 1$  e para a rede F.C.C.  $4 \times 1$ ).

Assim inicialmente obteremos o novo hamiltoniano do sistema a partir da nova configuração do estado fundamental e a partir dele as equações para o cálculo das novas curvas de dispersão. A minimização da energia nos fornecerá os ângulos de reconstrução. Finalmente analisaremos a influência de campos magnéticos externos na estrutura do sistema reconstruído.

### *3.2 O Hamiltoniano do Sistema Magnético Reconstruído*

Inicialmente mostraremos o aparecimento das duas sub-redes na reconstrução da superfície de um sistema de spins de estrutura cúbica.

bica simples quando congelamos a configuração do mesmo no ponto de energia mínima, o ponto X (esses casos, os quais o sistema magnético é instável no ponto X, são mostrados no diagrama da figura 2.4).

Partimos da aproximação de onda de spin (eq. 2.6). Desconsiderando a dependência temporal obteremos a equação que nos fornece o congelamento dos desvios de spins para cada sítio do sistema no ponto X:

$$S\uparrow_j(l) = S(l_z) \exp[i(\pi/a)l_x] \quad (3.1)$$

onde  $a$  é o parâmetro de rede. As coordenadas do ponto X da zona de Brillouin bidimensional são  $k_x = \pi/a$  e  $k_y = 0$ .

A caracterização das duas sub-redes decorre diretamente da equação 3.1. Uma vez que a componente x do vetor de posição é um múltiplo do parâmetro de rede, ou seja,  $l_x = ma$  obtem-se:

$$S\uparrow_j(l) = S(l_z) \text{ para } m \text{ par} \quad (3.2a)$$

$$S\uparrow_j(l) = -S(l_z) \text{ para } m \text{ ímpar} \quad (3.2b)$$

O parâmetro  $S(l_z)$  varia de zero à S e observamos que para os modos de superfície ele decai rapidamente à zero na direção do volume do material. Assim para  $m$  par o desvio de spin da direção de magnetização é positivo e para  $m$  ímpar ele é negativo. Portanto o sistema magnético de spins passa agora a ser descrito por duas sub-redes: na sub-rede que chamaremos de A os spins sofrem um desvio de um ângulo  $\theta_n$  da direção de magnetização ( $n$  é um índice de plano,  $n=l_z$ ) e na sub-rede B esse desvio é de  $-\theta_n$  (figura 3.1)

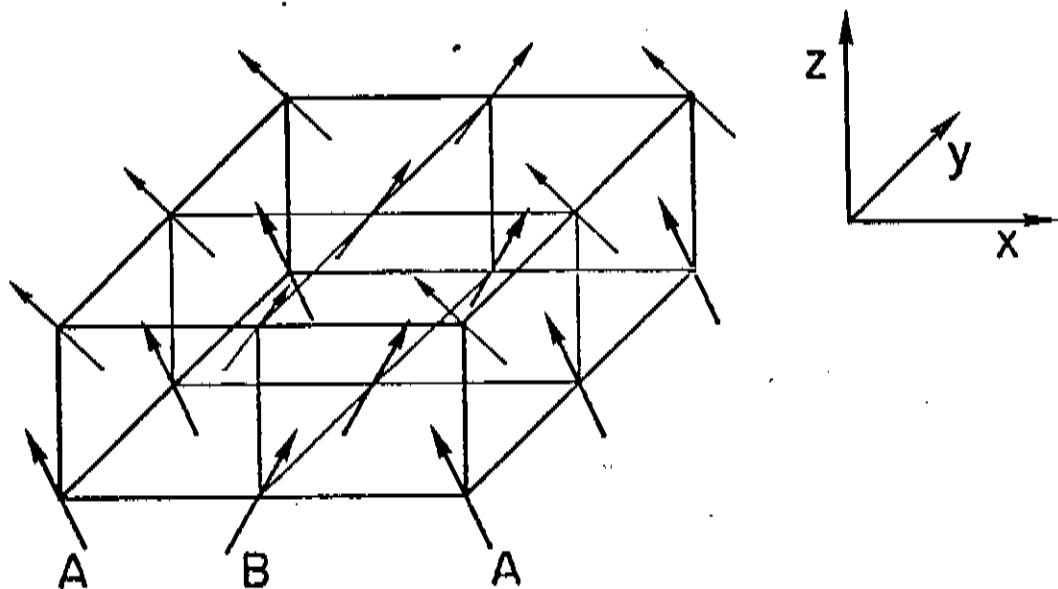


figura 3.1: Esquema mostrando a estrutura das sub-redes do sistema magnético reconstruído

O hamiltoniano do sistema de spins reconstruído, compatível com a nova configuração do estado fundamental, pode ser obtido do hamiltoniano de Heisenberg original fazendo-se rotações no sistema de referência distintas em cada sub-rede de modo que a direção  $z'$  após a rotação seja a direção de magnetização em cada sub-rede. Assim para a sub-rede A:

$$S_x = (S_x)_A \cos \theta_n + (S_z)_A \sin \theta_n \quad (3.3a)$$

$$S_z = (S_z)_A \cos \theta_n - (S_x)_A \sin \theta_n \quad (3.3b)$$

para a sub-rede B:

$$S_x = (S_x)_B \cos \theta_n - (S_z)_B \sin \theta_n \quad (3.4a)$$

$$S_z = (S_z)_B \cos \theta_n + (S_x)_B \sin \theta_n \quad (3.4b)$$

As equações acima nos fornecem como as componentes  $z$  e  $x$  de  $S$  se transformam em cada sub-rede devido às rotações do sistema de co-



ordenadas. As rotações para uma sub-rede são efetuadas no sentido oposto às para outra, em ambas de um ângulo de mesmo módulo,  $|\theta_n|$ .

No hamiltoniano de Heisenberg a interação entre os spins do sistema é calculada par a par através do produto escalar dos spins de dos sítios que interagem via interação de troca. Quando procedemos às rotações descritas acima devemos ter cuidado em reescrever o hamiltoniano pois o produto  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  para spins nos sítios  $i$  e  $j$  dependerá da sub-rede e do plano em que os sítios  $i$  e  $j$  se encontram, uma vez que os ângulos de reconstrução dependem do plano  $n$  considerado. Assim separamos o Hamiltoniano nas parcelas  $H_{nn}$  e  $H_{n,n\pm 1}$  que nos dão a interação entre spins de um mesmo plano  $n$  e entre spins do plano  $n$  e os spins dos planos  $n+1$  e  $n-1$  respectivamente (somente os spins dos planos  $n+1$  e  $n-1$  interagem com os spins do plano  $n$  devido ao alcance da interação considerado, ou seja, estamos considerando interações entre primeiros e segundos vizinhos apenas). Então para um filme de  $N$  planos atômicos (o índice  $l_z$  varia de 0 à  $N-1$ ) o hamiltoniano será:

$$H = \sum_{n=0}^{N-1} H_{nn} + 1/2 \sum_{n=0}^{N-2} H_{n,n+1} + 1/2 \sum_{n=1}^{N-1} H_{n,n-1} \quad (3.6)$$

onde as parcelas  $H_{nn}$  e  $H_{n,n\pm 1}$  são das por:

$$\begin{aligned} H_{nn} = & -1/2 \sum_{\vec{R}_A} \sum_{\vec{R}_B} (J_1(n) + J_2(n)) (S_z(n\vec{R}_A) S_z(n\vec{R}_B) \cos 2\theta_n - \\ & - 1/2 \sin 2\theta_n [S^+(n\vec{R}_A) + S^-(n\vec{R}_A)] S_z(n\vec{R}_B) + 1/2 \sin 2\theta_n [S^+(n\vec{R}_B) + S^-(n\vec{R}_B)] S_z(n\vec{R}_A) \\ & + 1/4 (\cos 2\theta_n - 1) [S^+(n\vec{R}_A) S^+(n\vec{R}_B) + S^-(n\vec{R}_A) S^-(n\vec{R}_B)] + \\ & + 1/4 (\cos 2\theta_n + 1) [S^+(n\vec{R}_A) S^-(n\vec{R}_B) + S^-(n\vec{R}_A) S^+(n\vec{R}_B)] - \\ & - 1/2 \sum_{\vec{R}_B} \sum_{\vec{R}_A} (J_1(n) + J_2(n)) (S_z(n\vec{R}_B) S_z(n\vec{R}_A) \cos 2\theta_n + \\ & + 1/2 \sin 2\theta_n S_z(n\vec{R}_A) [S^+(n\vec{R}_B) + S^-(n\vec{R}_B)] - 1/2 \sin 2\theta_n S_z(n\vec{R}_B) [S^+(n\vec{R}_A) + S^-(n\vec{R}_A)] \\ & + 1/4 (\cos 2\theta_n - 1) [S^+(n\vec{R}_B) S^+(n\vec{R}_A) + S^-(n\vec{R}_B) S^-(n\vec{R}_A)] + \\ & + 1/4 (\cos 2\theta_n + 1) [S^+(n\vec{R}_B) S^-(n\vec{R}_A) + S^-(n\vec{R}_B) S^+(n\vec{R}_A)] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -1/2 \sum_{\vec{R}_A} \sum_{\vec{R}'_A} J_1(n) ( S_z(\vec{n}\vec{R}_A) S_z(\vec{n}\vec{R}'_A) + \\
& +1/2 [S+(\vec{n}\vec{R}_A) S^-(\vec{n}\vec{R}'_A) + S^-(\vec{n}\vec{R}_A) S+(\vec{n}\vec{R}'_A) ] - \\
& -1/2 \sum_{\vec{R}_B} \sum_{\vec{R}'_B} J_1(n) ( S_z(\vec{n}\vec{R}_B) S_z(\vec{n}\vec{R}'_B) + \\
& +1/2 [S+(\vec{n}\vec{R}_B) S^-(\vec{n}\vec{R}'_B) + S^-(\vec{n}\vec{R}_B) S+(\vec{n}\vec{R}'_B) ] \quad (3.7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{n,n\pm 1} = & -1/2 \sum_{\vec{R}_A} \sum_{\vec{R}'_A} (J_1+J_2) ( S_z(\vec{n}\vec{R}_A) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) + \\
& +1/2 \sin(\theta_{n\pm 1} - \theta_n) [ (S+(\vec{n}\vec{R}_A) + S^-(\vec{n}\vec{R}'_A)) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}_A) - \\
& \quad - (S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}_A) + S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A)) S_z(\vec{n}\vec{R}_A) ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) - 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_A) S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) + h.c. ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) + 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_A) S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) + h.c. ] - \\
& -1/2 \sum_{\vec{R}_B} \sum_{\vec{R}'_B} (J_1+J_2) ( S_z(\vec{n}\vec{R}_B) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) + \\
& +1/2 \sin(\theta_{n\pm 1} - \theta_n) [ (S+(\vec{n}\vec{R}_B) + S^-(\vec{n}\vec{R}'_B)) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}_B) - \\
& \quad - (S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}_B) + S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B)) S_z(\vec{n}\vec{R}_B) ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) - 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_B) S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) + h.c. ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n - \theta_{n\pm 1}) + 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_B) S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) + h.c. ] - \\
& -1/2 \sum_{\vec{R}_A} \sum_{\vec{R}'_B} J_2 ( S_z(\vec{n}\vec{R}_A) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) + \\
& -1/2 \sin(\theta_{n\pm 1} + \theta_n) [ (S+(\vec{n}\vec{R}_A) + S^-(\vec{n}\vec{R}'_A)) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) - \\
& \quad - (S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) + S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}_B)) S_z(\vec{n}\vec{R}_A) ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) - 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_A) S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) + h.c. ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) + 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_A) S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_B) + h.c. ] - \\
& -1/2 \sum_{\vec{R}_B} \sum_{\vec{R}'_A} J_2 ( S_z(\vec{n}\vec{R}_B) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) + \\
& +1/2 \sin(\theta_{n\pm 1} + \theta_n) [ (S+(\vec{n}\vec{R}_B) + S^-(\vec{n}\vec{R}'_B)) S_z(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) - \\
& \quad - (S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) + S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}_A)) S_z(\vec{n}\vec{R}_B) ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) - 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_B) S+(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) + h.c. ] + \\
& +1/4 [ \cos(\theta_n + \theta_{n\pm 1}) + 1 ] [ S+(\vec{n}\vec{R}_B) S^-(\vec{n}\pm 1\vec{R}'_A) + h.c. ] \quad (3.8)
\end{aligned}$$

É importante ressaltar que no sistema magnético reconstruído os operadores  $S^+$  e  $S^-$  atuam criando ou destruindo desvios de spin da nova direção de magnetização. O resultado da sua aplicação num determinado sítio da rede de spins depende portanto do plano e da sub-rede em que ele se encontra. Assim utilizamos nas equações acima que descrevem o Hamiltoniano uma notação para esses operadores e também para o operador  $S_z$ : apresentamos entre parênteses primeiro o índice  $n$  referente ao plano considerado e depois um vetor de posição denotado com a letra maiúscula  $R$  cujo índice indica a sub-rede considerada.

Ainda podemos notar que os ângulos de reconstrução funcionam como parâmetros no Hamiltoniano do sistema magnético reconstruído. Portanto eles serão obtidos através da minimização da energia do sistema com relação aos mesmos.

### *3.3 O Estado Fundamental do Sistema Magnético Reconstruído: Ângulos de reconstrução*

Os ângulos de reconstrução  $\theta_n$  corretos serão aqueles que minimizarão a energia do estado fundamental do sistema. O auto-estado de energia mínima do sistema de spins reconstruído é aquele em que os spins estão perfeitamente alinhados ao longo da direção de magnetização em cada sub-rede em cada plano, definidas pelos ângulos  $\theta_n$  (que nos dão o desvio em relação à direção  $z$  original). Assim a energia do estado fundamental pode ser obtida do Hamiltoniano do sistema de spins reconstruído desconsiderando-se a contribuição dos operadores de criação e destruição de desvios de spin. Ainda o operador  $S_z$  aplicado em

qualquer sítio nos fornecerá o autovalor S. Então temos a energia do estado fundamental:

$$E_0 = -S^2 \sum_{n=0}^{N-1} \left( \sum_{R_A} \sum_{R_B} [J_1(n) \cos 2\theta_n - J_2(n) \cos 2\theta_n - J_2 \cos(\theta_n + \theta_{n+1})] + \right. \\ \left. + \sum_{R_A} \sum_{R_A'} J_1(n) + \sum_{R_A} \sum_{R_A'} J_1(n) \cos(\theta_n - \theta_{n+1}) \right) \quad (3.9)$$

Igualando-se então as derivadas  $\partial E_0 / \partial \theta_1$  a zero teremos,

Inicialmente para  $l=0$ :

$$4J_1^B \sin 2\theta_0 - 8J_2^B \sin 2\theta_0 + J_1 \sin(\theta_0 - \theta_1) - 4J_2 \sin \theta_0 \cos \theta_1 = 0 \quad (3.10)$$

A equação acima bem como as demais obtidas para  $l \neq 0$  podem ser reescritas como uma equação que nos determina o cosseno do ângulo  $\theta_{n+1}$  em função do conhecimento de  $\theta_n$ :

$$\alpha_n \cos^2 \theta_{n+1} + \beta_n \cos \theta_{n+1} + \gamma_n = 0 \quad (3.11)$$

para qualquer  $n$  com:

$$\alpha_n = B_n + C_n \quad (3.12)$$

$$\beta_n = 2A_n B_n \quad (3.13)$$

$$\gamma_n = A_n - B_n \quad (3.14)$$

Os valores dos parâmetros  $B_n$  e  $C_n$  são calculados da mesma forma para qualquer plano, já o mesmo não ocorre para o parâmetro  $A_n$  que tem uma forma diferente para o plano da superfície:

$$A_0 = 4 \sin 2\theta_0 (J_1^B - 2J_2^B) \quad (3.15a)$$

$$A_n = 4 \sin 2\theta_n (J_1 - 2J_2) + (J_1 - 4J_2) \sin \theta_n \cos \theta_{n-1} - \\ - J_1 \sin \theta_{n-1} \cos \theta_n \quad (3.15b)$$

para  $n \neq 0$ , e

$$B_n = (J_1 - 4J_2) \sin \theta_n \quad (3.16)$$

$$C_n = J_1 \cos \theta_n \quad (3.17)$$

Assim todo o conjunto de ângulos  $\theta_n$  é determinado em função do parâmetro  $\theta_0$ , o ângulo de reconstrução do plano da superfície. A

equação de segundo grau para  $\cos\theta_{n+1}$  sempre admite duas soluções possíveis com módulo menor ou igual à um. Assim num sistema de  $N$  planos obtemos a partir de um parâmetro inicial  $\theta_0$   $2^{N-1}$   $N$ -uplas de ângulos possíveis. Se  $\theta_0$  assume  $m$  valores possíveis de  $0$  à  $\pi$  devemos seleccionar o conjunto de ângulos dentre as  $m \cdot 2^{N-1}$   $N$ -uplas possíveis a que minimiza a energia do sistema determinando então o arranjo de spins correspondente ao estado fundamental.

Para um filme de dez planos cujos parâmetros de *exchange* são aqueles do sistema instável do capítulo anterior (fig.2.3) os ângulos de reconstrução, obtidos segundo o método acima, são mostrados na tabela 1. O conjunto formado pelos mesmos ângulos tomados em ordem inversa é também solução, obviamente porque a solução do conjunto de equações 3.11 independe da escolha do ângulo  $\theta_0$  ou  $\theta_g$  como parâmetro. Portanto o estado fundamental do sistema é duplamente degenerado, as duas configurações possíveis apresentam energia menor que a configuração em que os ângulos aumentam na proximidade das duas superfícies, que se poderia pensar a princípio como sendo o estado fundamental do sistema de spins.

A observação da tabela 1 confirma o comentário que fizemos no capítulo anterior quando falamos a respeito da estabilidade do sistema no ponto  $X$  da zona de Brillouin bidimensional: o fenómeno de reconstrução é tipicamente superficial uma vez que os ângulos de reconstrução decaem exponencialmente com  $l_z$  (o índice do plano) e são maiores que  $1^\circ$  para apenas os três primeiros planos, incluindo o superficial embora o ângulo de reconstrução esteja próximo de  $90^\circ$  na superfície. Assim, conforme havíamos comentado antes, no caso de instabili-

TABELA 1

Ângulos de reconstrução para filme de dez planos, com  $J_1=1.0$ ,  $J_1^B=1.0$ ,  $J_2=-0.22$  e  $J_2^B=-0.6$ .

$l_z(n)$	$\theta_n$
0	1.508
1	0.249
2	$5.479 \times 10^{-2}$
3	$1.218 \times 10^{-2}$
4	$2.701 \times 10^{-3}$
5	$6.019 \times 10^{-4}$
6	$1.339 \times 10^{-4}$
7	$2.993 \times 10^{-5}$
8	$7.400 \times 10^{-6}$
9	$5.000 \times 10^{-6}$

TABELA 2

Comparação entre os valores dos ângulos de reconstrução para os planos imediatamente próximos ao plano da superfície na ausência e presença de campo magnético externo.

	$H_{eff}=0$	$H_{eff}=0.4$
$\theta_0$	1.5078	1.2788
$\theta_1$	0.2486	0.1916
$\theta_2$	0.0547	0.0388

dade superficial do arranjo ferromagnético, mesmo num filme de dez planos atômicos há a caracterização de um 'volume' onde a configuração do estado fundamental é ferromagnética, uma vez que os ângulos de reconstrução para os planos intermediários são praticamente nulos. Podemos então desconsiderar a interação entre as duas superfícies, fato já evidenciado pelas curvas de dispersão.

### 3.4 Dispersão de Magnons para o sistema magnético reconstruído

Como no capítulo anterior vamos obter a dispersão dos magnons calculando-se comutadores dos operadores  $S^+$  ou  $S^-$  com o hamiltoniano do sistema de spins, esse comutador sendo igual à derivada temporal do respectivo operador. Lembramos que desde o início desse capítulo estamos escrevendo apenas a parte espacial dos operadores de criação e destruição de desvio de spin, para obter o comportamento temporal devemos multiplicá-los pelo fator  $\exp(-i\omega t)$  mantendo a aproximação de onda de spin. Também devido à aproximação de onda de spin após o cálculo dos comutadores os operadores  $S_z$  calculados em qualquer sítio são substituídos por  $S$ , o seu autovalor máximo. Para o operador  $S^+(R_A)$  temos por exemplo:

$$\begin{aligned}
 [S^+(OR_A'), H] &= [S^+(OR_A'), H_{00}] + 1/2[S^+(OR_A'), H_{01}] + \\
 &+ 1/2[S^+(OR_A'), H_{10}]
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Aparecem apenas as parcelas do Hamiltoniano em que há operadores que atuam no primeiro plano e na sub-rede A, o comutador de  $S^+(OR_A)$  com as demais parcelas é nulo.

Antes de escrevermos o resultado do comutador da equação acima e, de acordo com a equação 2.3, obtermos a primeira equação que nos possibilita a determinação da dispersão de magnons faremos, primeiro, duas importantes considerações. Inicialmente ao calcular o referido comutador obtemos como resultado termos que dependem dos operadores de criação e destruição de desvio de spin, de  $S_z$  e do produto deste por aqueles. Devido à aproximação de onda de spin os termos que dependem de  $S_z$  se transformam em termos lineares, que no entanto se anulam pois correspondem à condição de vínculo para a minimização da energia do estado fundamental com relação aos ângulos de reconstrução (eq. 3.10). Portanto eles não serão escritos considerando-se esse resultado. Finalmente nós introduziremos os operadores de criação e destruição de um magnon de vetor de onda  $\vec{k}$  no espaço recíproco bidimensional. Eles correspondem simplesmente a uma transformada dos operadores no espaço real:

$$S^+(\vec{n}\vec{R}_A) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{R}_A] S(n) a_{\vec{k}} \quad (3.19a)$$

$$S^-(\vec{n}\vec{R}_A) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp[ i\vec{k} \cdot \vec{R}_A] S(n) a_{\vec{k}} \quad (3.19b)$$

$$S^+(\vec{n}\vec{R}_B) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{R}_B] S(n) b_{\vec{k}} \quad (3.20a)$$

$$S^-(\vec{n}\vec{R}_B) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp[ i\vec{k} \cdot \vec{R}_B] S(n) b_{\vec{k}} \quad (3.20b)$$

Além de proporcionarem uma descrição matemática mais clara, a utilização desses operadores está ligada ao fato de que as excitações coletivas do sistema magnético são extendidas ao longo das direções normais à direção de magnetização, ou seja, com vetor de onda (bidimensional) definido, ao qual associamos então um operador que cria ou destrói um magnon de vetor de onda  $\vec{k}$  em cada sub-rede.

Então a equação obtida através do cálculo do comutador original seguindo-se as considerações discutidas acima é:



$$\begin{aligned}
\omega S(0)a_k = & ( [(2J_1^S - 4J_2^S)\cos 2\theta_0 + 2J_1^S(1 - \cos k_y a) + \\
& + (J_1 - 2J_2)\cos(\theta_0 - \theta_1) - 2J_2\cos(\theta_0 + \theta_1)]SS(0) + \\
& + [(J_2\cos k_y a - 1/2J_1)(\cos(\theta_0 - \theta_1) + 1)]SS(1) )a_k + \\
& + ( [(2J_2^S\cos k_y a - J_1^S)(\cos 2\theta_0 + 1)\cos k_x a]SS(0) + \\
& + [J_2\cos k_x a(\cos(\theta_0 + \theta_1) + 1)]SS(1) )b_k \\
& + ( [(2J_2^S\cos k_y a - J_1^S)(\cos 2\theta_0 - 1)\cos k_x a]SS(0) + \\
& + [J_2\cos k_x a(\cos(\theta_0 + \theta_1) - 1)]SS(1) )bt_k \\
& + [(J_2\cos k_y a - 1/2J_1)(\cos(\theta_0 - \theta_1) - 1)]SS(1) )at_k \quad (3.21)
\end{aligned}$$

Pode-se obter três equações conjugadas da equação acima calculando-se os comutadores envolvendo os demais operadores de criação e destruição de desvios de spin atuando no plano da superfície:  $[S^+(\vec{O}\vec{R}_B'), H]$ ,  $[S^-(\vec{O}\vec{R}_A'), H]$  e  $[S^-(\vec{O}\vec{R}_B'), H]$ . As equações obtidas são análogas à acima efetuando-se as trocas seguintes: troca-se o operador  $a_k$  pelo operador de criação ou destruição de magnons correspondente ao operador de criação ou destruição de desvios de spin no espaço real cujo comutador com o Hamiltoniano estamos calculando e vice-versa; o mesmo fazemos com os operadores hermitianos conjugados. Assim, por exemplo, a equação derivada do cálculo do comutador  $[S^+(\vec{O}\vec{R}_B'), H]$  é análoga à equação 3.21 onde trocamos  $a_k$  por  $b_k$  e vice-versa e  $at_k$  por  $bt_k$  e vice-versa.

Agora se ao invés de calcularmos o comutador de um operador de criação de spins calculado no plano da superfície o fizéssemos para um plano de volume ( $l_z = m$ ,  $m \neq 0$ ), obteríamos, seguindo as mesmas considerações uma equação análoga à 3.21:

$$\begin{aligned}
\omega S(n)a_k = & ( [(2J_1 - 4J_2)\cos 2\theta_n + 2J_1(1 - \cos k_y a) + \\
& + (J_1 - J_2)(\cos(\theta_{n-1} - \theta_n) + \cos(\theta_n - \theta_{n+1})) -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 2J_2(\cos(\theta_n + \theta_{n-1}) + \cos(\theta_n + \theta_{n+1}))SS(n) + \\
& + (J_2 \cos k_y a - 1/2J_1)[\cos(\theta_n - \theta_{n-1}) + 1]SS(n-1) \\
& + (J_2 \cos k_y a - 1/2J_1)[\cos(\theta_n - \theta_{n+1}) + 1]SS(n+1) )a_k + \\
& + ( [(2J_2 \cos k_y a - J_1)(\cos 2\theta_n + 1) \cos k_x a]SS(n) + \\
& + J_2 \cos k_x a[\cos(\theta_n + \theta_{n-1}) + 1]SS(n-1) + \\
& + J_2 \cos k_x a[\cos(\theta_n + \theta_{n+1}) + 1]SS(n+1) )b_k + \\
& + ( (J_2 \cos k_y a - 1/2J_1)[\cos(\theta_n - \theta_{n-1}) - 1]SS(n-1) \\
& + (J_2 \cos k_y a - 1/2J_1)[\cos(\theta_n - \theta_{n+1}) - 1]SS(n+1) )a_{+k} + \\
& + ( [(2J_2 \cos k_y a - J_1)(\cos 2\theta_n - 1) \cos k_x a]SS(n) + \\
& + J_2 \cos k_x a[\cos(\theta_n + \theta_{n-1}) - 1]SS(n-1) + \\
& + J_2 \cos k_x a[\cos(\theta_n + \theta_{n+1}) - 1]SS(n+1) )b_{+k} \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Obtemos novamente mais três equações conjugadas da equação acima, como no caso anterior associadas aos demais operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco. Assim, como podemos notar, temos novamente um sistema de equações acopladas obtendo-se agora quatro equações para cada plano considerado, ao invés de uma como no sistema não reconstruído: as equações para  $S(m)a_k$ ,  $S(m)a_{+k}$ ,  $S(m)b_k$  e  $S(m)b_{+k}$ . Como antes o sistema de equações será resolvido exatamente considerando-se um filme de  $N$  planos atômicos. Entretanto neste caso o sistema é constituído de  $4N$  equações.

Calculamos as novas curvas de dispersão resolvendo-se o sistema de autovalores formado pelo conjunto de equações descritas acima e que pode ser escrito de uma forma matricial como no sistema não reconstruído:

$$(A_R - \omega I)X = 0 \quad (3.23)$$

A matriz  $A_R$  do sistema pode ser dividida em blocos  $4 \times 4$  devido ao fato da existência de quatro equações para cada plano do sistema, uma para cada tipo de operador, no que concerne à sua natureza (criação ou destruição de magnon), para cada sub-rede. Uma vez que essas equações se acoplam apenas com as dos planos vizinhos, devido ao alcance da interação, a matriz  $A_R$  tem uma estrutura análoga à matriz  $A$  do sistema não reconstruído, podendo-se dizer que ela é 'tridiagonal em blocos' onde os elementos  $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\delta$  da matriz  $A$  (eq.2.18) são substituídos por blocos  $4 \times 4$  análogos. Entretanto, devido à diferença do ângulo de reconstrução de um plano para outro nós os chamaremos de  $\alpha_{|z}, \beta_{|z \pm 1}$ ,  $\beta_{|z}$  e  $\delta_{|z}$  onde  $|z$  é o índice do plano. Os blocos  $\delta_0$  e  $\delta_9$  estão relacionados com a interação entre spins nos planos da superfície; já os blocos  $\beta_{|z}$ ,  $|z|=1$  a  $8$ , estão ligados à interação entre spins nos planos internos. Finalmente as interações entre spins de planos diferentes estão relacionadas aos blocos  $\alpha_{|z}, \beta_{|z \pm 1}$ . A matriz  $I$  é a matriz identidade de dimensão  $40 \times 40$  e  $X$  a matriz coluna formada por:

$$X = \begin{bmatrix} a_k S(0) \\ b_k S(0) \\ a^+_{|k} S(0) \\ b^+_{|k} S(0) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b^+_{|k} S(9) \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

A diagonalização da matriz  $A_R$  para cada ponto da zona de Brillouin bidimensional nos fornece então as curvas de dispersão para

o sistema magnético de spins reconstruído. Devemos entretanto ressaltar dois fatos. Inicialmente com a caracterização das sub-redes a célula primitiva da rede de spins é alterada na região superficial, temos agora uma rede bidimensional retangular de dimensão  $2a$  na direção  $x$  e  $a$  na direção  $y$  e para a descrição do sistema utilizamos uma base composta por dois spins pertencentes às duas sub-redes diferentes. Assim a primeira zona de Brillouin é reduzida à metade na direção  $x$  e como consequência o número de ramos de magnons deve dobrar. Ainda uma vez que os spins se desviam da direção  $z$  de um ângulo  $\theta_n$  numa sub-rede e  $-\theta_n$  em outra a atuação do operador de criação em uma sub-rede tem o efeito equivalente à atuação do operador de destruição na outra. Portanto os autovalores são sempre obtidos aos pares com mesmo módulo e sinais opostos, obviamente os autovalores negativos estão associados aos operadores de destruição de magnons. Assim chegamos à 20 autovalores esperados a partir da discussão acima.

Na figura 3.2 mostramos então as curvas de dispersão para um filme de dez planos calculadas segundo as considerações anteriores ao longo das mesmas linhas de simetria utilizadas no sistema não reconstruído e para os parâmetros de troca do sistema instável da figura 2.3. Como podemos notar de imediato a instabilidade do sistema foi levantada, pois não mais se observa ramos de magnons com energia negativa, através da consideração do estado fundamental *real* do sistema de spins, que foi alterado essencialmente na superfície através do fenômeno de reconstrução magnética. A dispersão dos modos de volume não foi essencialmente alterada com relação ao sistema não reconstruído pois como vimos as modificações importantes localizam-se próximas às

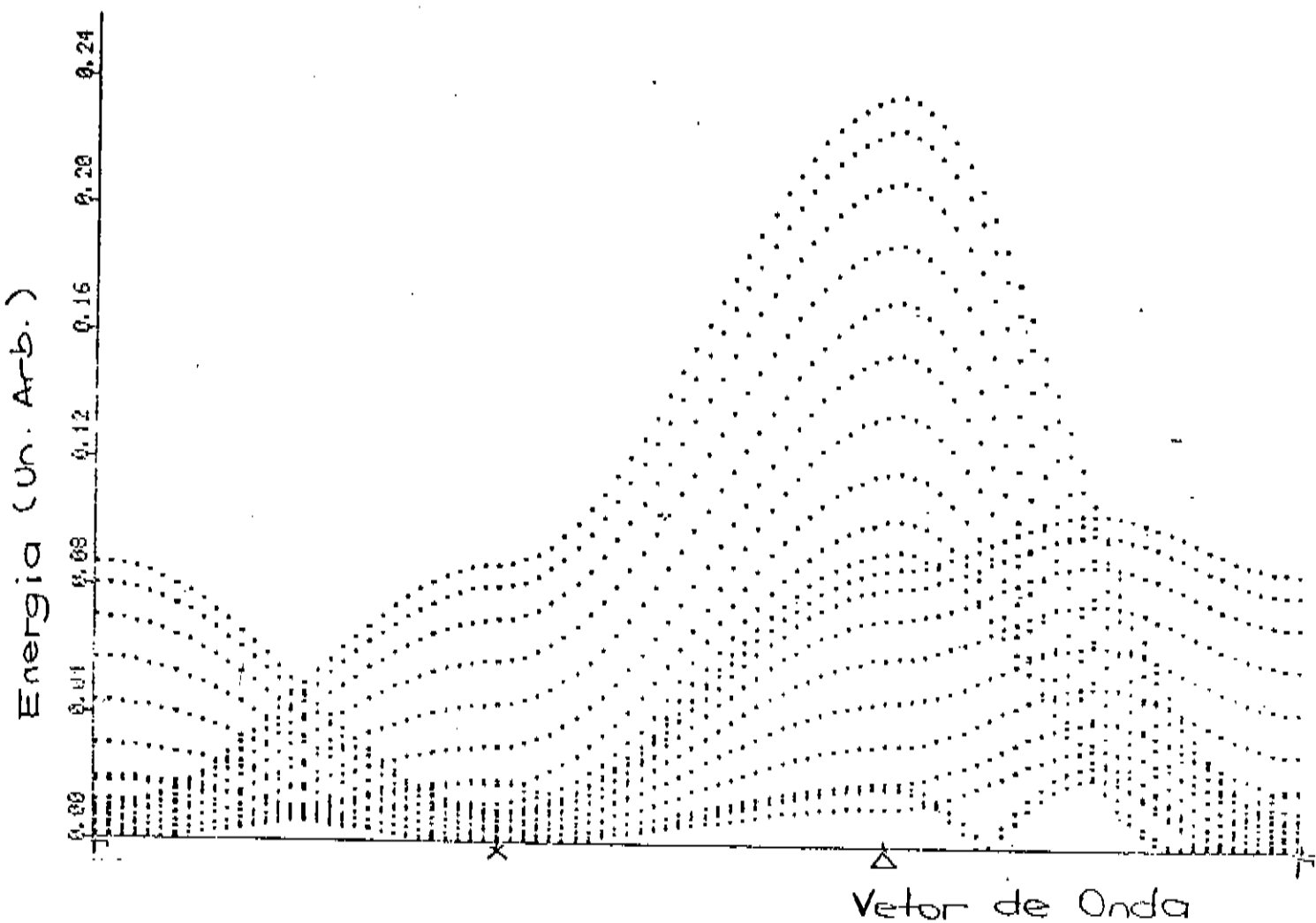


figura 3.2: Dispersão de magnons do sistema de spins reconstruído ao longo das linhas de alta simetria  $\Gamma$ - $X$ ,  $X$ - $\Delta$  e  $\Delta$ - $\Gamma$  para um filme de dez planos.  $J_1=1.0$ ,  $J_1^B=1.0$ ,  $J_2=-0.22$  e  $J_2^B=-0.6$ .

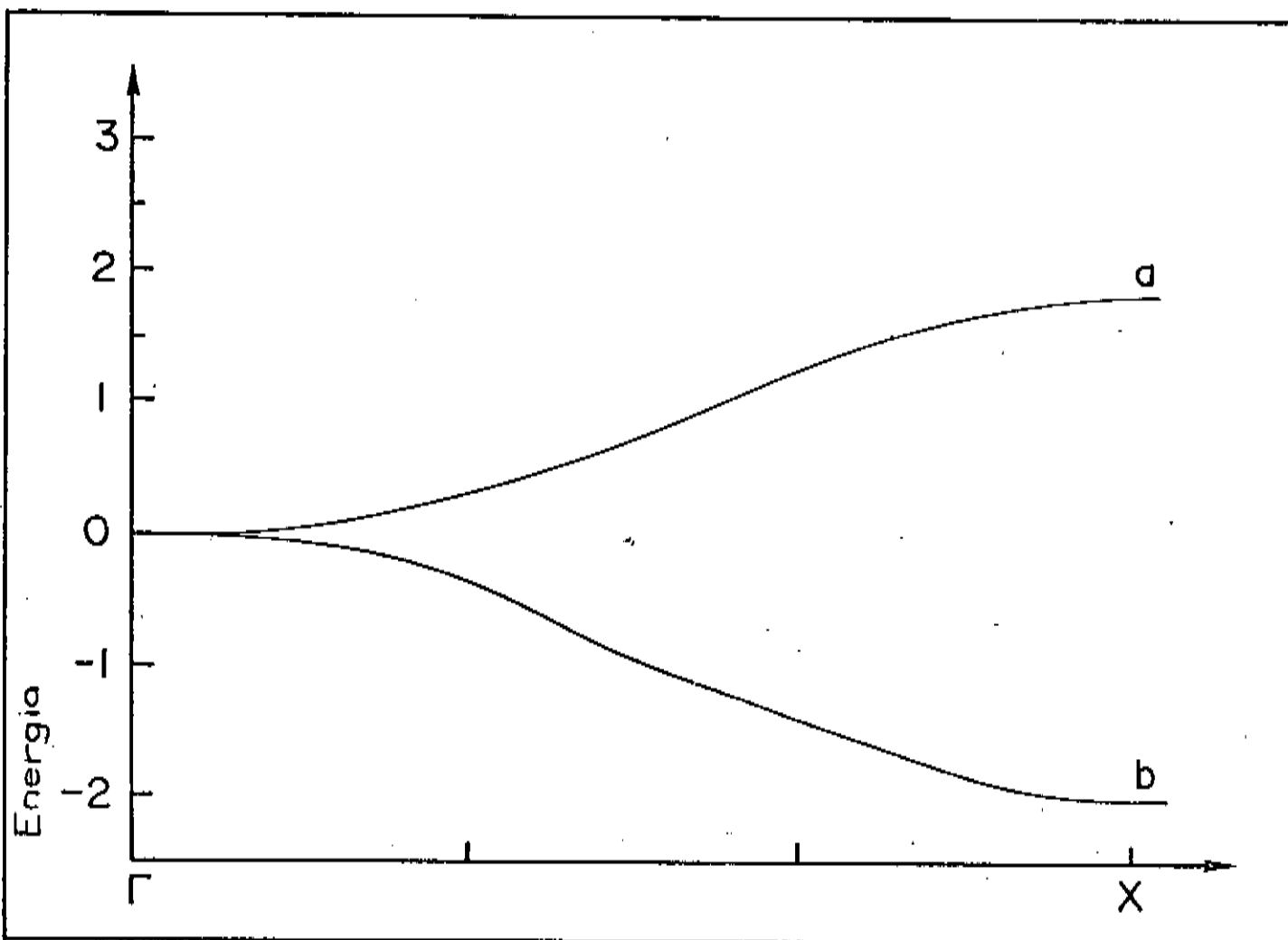


figura 3.3: Dispersão dos modos de superfície para os sistemas magnéticos reconstruído (curva a) e sem reconstrução (curva b).

superfícies. Já o modo de superfície, que pode ser reconhecido utilizando-se dos valores de  $S(n)$  como no sistema não reconstruído, tem sua dispersão radicalmente alterada. Primeiro não se obtém energias negativas, sendo agora a energia minimizada mas positiva. Observa-se aqui que, ao contrário do obtido quando da utilização do estado fundamental ferromagnético, a menor energia corresponde ao centro da zona de Brillouin bidimensional. Segundo, a forma da curva se aproxima daquelas do volume, apresentando apenas energia mais baixa. Essa diferença é evidenciada na figura 3.3 onde comparamos a dispersão de um modo de superfície nos sistemas reconstruído e não reconstruído ao longo da linha  $\Gamma$ -X da zona de Brillouin bidimensional.

Concluimos então que o sistema caracterizado por interações competitivas como o que estamos estudando a preponderância anti-ferromagnética na superfície evidenciada pela instabilidade do ponto X quando se assume alinhamento ferromagnético como estado fundamental, para certos valores dos parâmetros de *exchange* (diagrama de estabilidade do capítulo anterior, figura 2.4), dá origem a uma região superficial de alguns planos atômicos reconstruída, caracterizada pela existência de duas sub-redes (4 no sistema F.C.C:). A dispersão das ondas de spin de superfície pode ser corretamente determinada conhecendo-se o valor dos ângulos de reconstrução.

### 3.5 A influência do campo magnético externo no sistema reconstruído

No capítulo anterior nós pudemos observar que no sistema magnético não reconstruído a aplicação do campo magnético externo pa-

ralelo à direção de magnetização favorece o ordenamento ferromagnético aumentando a energia das curvas de dispersão e assim aumentando também a região de estabilidade do sistema, no ponto X (figura 2.6). Portanto quando consideramos a aplicação desse campo no sistema de spins reconstruído resta-nos determinar o efeito na região superficial em que a reconstrução efetivamente ocorre já que no volume o sistema tem a mesma configuração que no caso sem reconstrução, e as modificações serão essencialmente as mesmas.

Para o sistema não reconstruído nós descrevíamos o novo hamiltoniano do sistema na presença de campo externo de intensidade  $H_0$  na direção z acrescentando-se um termo  $H_\theta$  ao hamiltoniano original:

$$H_\theta = -g\beta H_0 \sum_j S_{jz} \quad (3.25)$$

Agora como fizemos nos itens anteriores ao levarmos em conta a caracterização das duas sub-redes, e portanto da reconstrução do sistema de spins, devemos reescrever o termo  $H_\theta$  considerando-se a nova direção de magnetização em cada sub-rede procedendo-se às rotações descritas pelas equações 3.3a e 3.3b para a sub-rede A e 3.4a e 3.4b para sub-rede B:

$$H_\theta = -g\beta H_0 \left( \sum_{R_A} (S_z \cos\theta_n - S_x \sin\theta_n) + \sum_{R_B} (S_z \cos\theta_n + S_x \sin\theta_n) \right) \quad (3.26)$$

Os cálculos para a obtenção do termo que deve ser acrescentado às equações para os operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco (3.11 e 3.12) devido ao acréscimo do termo  $H_\theta$  à parcela  $H_{nn}$  do hamiltoniano do sistema magnético reconstruído são os mesmos. Calculamos o comutador da equação 3.8 para a parcela  $H_\theta$ , desconsiderando-se os termos lineares pelo mesmo motivo exposto anterior-



mente. Finalmente a introdução dos operadores de criação e destruição de magnons para cada sub-rede nos leva ao termo que deve ser acrescentado àquelas equações devido a aplicação do campo magnético externo:

$$SH_{eff} \cos \theta_n S(n) a_k \quad (3.27)$$

onde  $H_{eff}$  é dado pela equação 2.21.

Portanto como já era esperado a aplicação de  $H_0$  não altera a forma das curvas de dispersão provocando apenas um deslocamento na sua energia uma vez que o termo acima é acrescentado apenas à diagonal da matriz  $A_R$  do sistema reconstruído. Resta-nos apenas determinar a modificação no valor dos ângulos de reconstrução. A contribuição à energia do estado fundamental do sistema de spins reconstruído (eq. 3.13) calculada a partir da parcela  $H_0$  será:

$$E_0 = - \sum_n g\beta H_0 \left( \sum_{\vec{R}_A} S \cos \theta_n + \sum_{\vec{R}_B} S \cos \theta_n \right) \quad (3.28)$$

Calculando-se as derivadas de  $E_0$  com relação aos ângulos de reconstrução obtemos o termo  $H_{eff} \sin \theta_n$  que deve ser acrescentado à equação 3.19 para o cálculo dos novos ângulos  $\theta_n$ .

Na tabela 2 apresentamos a comparação entre os primeiros e principais ângulos de reconstrução calculados na ausência e presença de campo magnético externo ( $H_{eff}=0$  e  $H_{eff}=0.4$ ) para um filme de dez planos e para os mesmos valores dos parâmetros de troca que os utilizados para os cálculos dos ângulos da tabela 1. Como esperávamos os ângulos são diminuídos na presença de campo magnético externo uma vez que ele favorece o ordenamento ferromagnético diminuindo assim a intensidade efetiva da interação anti-ferromagnética na superfície. Neste caso para esse valor de  $H_{eff}$  o sistema de spins ainda apresenta reconstrução (esses valores dos parâmetros de troca e  $H_{eff}$  correspondem

ainda a um ponto na região de instabilidade do ponto X no diagrama da figura 2.6), mas ocorre uma diminuição significativa do valor dos ângulos  $\theta_n$  nos primeiros planos da região reconstruída.

Em suma a aplicação do campo magnético externo na direção de magnetização do volume num sistema de spins reconstruído, quando a intensidade do mesmo não é suficiente para levantar a instabilidade do sistema no ponto X da zona de Brillouin bidimensional, provoca um fortalecimento da ordem ferromagnética surgindo uma tendência ao realinhamento dos spins da superfície reconstruída ao longo da direção de magnetização do volume, uma vez que ocorre uma diminuição do valor dos ângulos de reconstrução. A forma das curvas de dispersão não é alterada, ocorrendo apenas um deslocamento (positivo) na sua energia.

## CAPÍTULO IV

### DENSIDADE DE MAGNONS

#### 4.1 Introdução

Neste capítulo desenvolvemos o formalismo para o cálculo da densidade espectral de magnons do sistema de spins reconstruído. Uma vez que ela pode ser calculada plano a plano a sua determinação enriquecerá o conhecimento das características físicas dos estados do sistema, especialmente quanto à localização dos magnons superficiais.

A densidade de magnons será determinada a partir do formalismo de funções de Green de Zubarev<sup>17</sup>. As funções de Green na mecânica estatística são uma generalização apropriada do conceito de função de correlação; elas estão intimamente ligadas com a determinação de quantidades observáveis e partindo-se da definição adequada a densidade espectral poderá ser obtida a partir de uma equação de movimento para as funções de Green<sup>17</sup>, a equação de Dyson, que desenvolveremos adiante. Uma vez estabelecido o formalismo a densidade espectral de magnons será determinada para filmes constituídos de planos atômicos bem como para sistemas semi-infinitos.

#### 4.2 Equações para as Funções de Green

Definimos a função de Green (causal) de tempo duplo através do valor médio do produto ordenado temporalmente de operadores:

$$G(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle = -i \langle TA(t)B(t') \rangle =$$

$$= -i( \Theta(t'-t) \langle B(t')A(t) \rangle + \Theta(t-t') \langle A(t)B(t') \rangle ) \quad (4.1)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  indica uma média sobre o ensemble grand-canônico,  $\Theta(t)$  é a função degrau e  $\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle$  é uma notação abreviada para a função de Green correspondente:

$$\langle \dots \rangle = 1/Z \sum \exp(-\mathcal{H}/kT) \quad (4.2a)$$

$$Z = \sum \exp(-\mathcal{H}/kT) = \exp(-\Omega/kT) \quad (4.2b)$$

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

$Z$  é a função de partição para o ensemble grand-canônico e  $\Omega$  é o potencial termodinâmico das variáveis  $V$ ,  $\mu$  e  $T$ . O operador  $\mathcal{H}$  inclui um termo com o potencial químico  $\mu$ :

$$\mathcal{H} = H - \mu N \quad (4.4)$$

Na equação acima  $N$  é o operador para o número total de partículas e  $H$  é o operador hamiltoniano independente do tempo. Os operadores  $A(t)$  e  $B(t)$  são representações de Heisenberg dos operadores  $A$  e  $B$  expressos em termo de operadores de campo quantizados.

A utilização do ensemble grand-canônico é conveniente quando não se deseja a limitação da constância do número total de partículas, como no nosso caso onde há a criação e destruição de magnons. Ainda pode-se mostrar utilizando-se as definições anteriores que no caso de equilíbrio estatístico a função de Green definida acima depende apenas da diferença  $(t-t')$ .

A equação de Dyson é obtida diferenciando-se a equação 4.1 com relação ao tempo e efetuando-se uma transformada de Fourier:

$$\omega G(\omega) = \langle [A, B] \rangle + \langle \langle [A, H], B \rangle \rangle \quad (4.5)$$

com

$$G(\omega) = \int dt G(t) \exp(i\omega t) \quad (4.6a)$$

$$G(t, t') = \int d\omega G(\omega) \exp[-i\omega(t-t')] \quad (4.6b)$$

De um modo geral podemos dizer que a função de Green do segundo termo da equação 4.5 é de ordem mais alta que a do primeiro termo. Utilizando a mesma equação para a função do segundo termo obtém-se uma nova relação entre funções de Green; procedendo-se assim sucessivamente obtemos uma cadeia de equações acopladas para as funções de Green. A solução para esse sistema acoplado de equações é, de um modo geral, extremamente complicada e geralmente utilizam-se métodos aproximativos para desacoplá-las. O sistema resultante poderá ser resolvido diretamente no caso de um filme ou então através do método da matriz transferencial no caso do sistema de spins semi-infinito.

Definimos então para  $T=0$  a função de Green:

$$G_{mn}^{\alpha\beta} = \frac{\langle\langle S(m)\alpha(\vec{k}_{\parallel}) ; S(n)\beta(\vec{k}_{\parallel}) \rangle\rangle}{2[S(m)S(n)]^{1/2}} \quad (4.7)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  representam os operadores de criação ou destruição de magnons no espaço recíproco introduzidos no capítulo anterior.

A densidade espectral de magnons para o plano  $n$  será então dada por:

$$\rho_n(\vec{k}_{\parallel}) = -1/\pi \operatorname{Im}(\langle\langle \vec{n}k_{\parallel} | G_{nn}^{aa\dagger}(\mathcal{E}+i0^+) | \vec{n}k \rangle\rangle + \langle\langle \vec{n}k_{\parallel} | G_{nn}^{bb\dagger}(\mathcal{E}+i0^+) | \vec{n}k \rangle\rangle) \quad (4.8)$$

Na equação acima estamos somando a contribuição à densidade de cada sub-rede e o argumento das funções apresenta uma parte imaginária infinitesimal. Os estados  $|\vec{n}k_{\parallel}\rangle$  são obtidos em função dos estados de Wannier  $|\vec{n}R_j\rangle$  através de uma transformação de Bloch:

$$|\mathbf{n}\vec{k}_n\rangle = N^{-1/2} \sum_{\vec{R}_j} \exp(i\vec{k}_n \cdot \vec{R}_j) |\mathbf{n}\vec{R}_j\rangle \quad (4.9a)$$

$$|\mathbf{n}\vec{R}_j\rangle = (2S)^{-1/2} S^-(\mathbf{n}\vec{R}_j) |0\rangle \quad (4.9b)$$

Lembramos que nas equações acima o vetor de posição no espaço real  $\vec{R}_j$  pode se referir a um sítio da sub-rede A ou B e o estado fundamental do sistema de spins, denotado por  $|0\rangle$  é o estado fundamental do sistema de spins reconstruído, determinado no capítulo anterior. Cada estado  $|\mathbf{n}\vec{R}_j\rangle$  do conjunto completo introduzido acima representa então um estado quântico em que somente o spin do sítio  $\vec{R}_j$  do plano de índice  $n$  é desviado da direção de magnetização da sub-rede correspondente de uma unidade.

As equações para as funções de Green que aparecem no cálculo da densidade espectral são obtidas partindo-se da equação de Dyson. Por exemplo para calcular  $G_{nm}$  podemos escrever:

$$\omega \langle\langle S^+(\mathbf{n}\vec{R}_A), S^-(\mathbf{m})a^+(k) \rangle\rangle = \langle [S^+(\mathbf{n}\vec{R}_A), S^-(\mathbf{m})a^+(k)] \rangle + \langle\langle [S^+(\mathbf{n}\vec{R}_A), H]; S^-(\mathbf{m})a^+(k) \rangle\rangle \quad (4.10)$$

Na equação acima utilizamos um operador de desvio de spin no espaço real ao invés de um operador de criação ou destruição de magnons no espaço recíproco conforme a definição (equação 4.7). Lembramos entretanto que este último é a transformada inversa de Fourier do primeiro e portanto a partir de uma simples expansão chegamos às funções de Green conforme definimos acima. Utilizamos esse artifício porque os comutadores dos operadores de desvio de spin no espaço real com o hamiltoniano do sistema magnético reconstruído já foram calculados no capítulo anterior, podendo-se então utilizar aquele resultado fazendo-se as expansões em função dos operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco depois. Como vimos o valor desse comutador é uma

função dos operadores  $S_z$ ,  $S^+$  e  $S^-$  e dos produtos do primeiro com os dois últimos calculados em sítios das duas sub-redes nos planos de índices  $n$ ,  $n+1$  e  $n-1$ . Assim a expansão da função de Green do segundo termo da equação 4.10 apresentará funções de ordem mais alta que devem ser desacopladas. Procedemos ao desacoplamento de Bogolyubov e Tyablikov<sup>10</sup>:

$$\langle\langle S_{zj} S^+_{l+1}; S(0) a_k \rangle\rangle = \langle S_{zj} \rangle \langle\langle S^+_{l+1}; S(0) a_k \rangle\rangle \quad (4.11)$$

Esse desacoplamento, para o caso de spin 1/2, é um desacoplamento de fase aleatória em que a correlação entre as fases das componentes transversais do spin e a da componente z, na direção de magnetização de cada sub-rede, é desprezada. Uma vez que estamos considerando a temperatura igual à zero o valor médio do operador  $S_z(n\vec{R}_A)$  e  $S_z(n\vec{R}_B)$  será substituído por  $S$ , o seu autovalor máximo, como extensão da aproximação de onda de spin. Lembramos que dentre os diversos desacoplamentos possíveis, o proposto por Tyablikov é extremamente simples e adequado ao nosso problema pois trabalhamos com temperatura zero.

Expandindo-se então os operadores  $S^+$  e  $S^-$  em função dos operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco obtemos a equação:

$$\begin{aligned} \omega G_{nn}^{aa^+} = & \delta_{nm} + A_n G_{nm}^{aa^+} + C_n G_{nm}^{ba^+} + F_n G_{nm}^{b^+a^+} + \\ & + B_n G_{n-1m}^{aa^+} + D_n G_{n-1m}^{ba^+} + E_n G_{n-1m}^{a^+a^+} + G_n G_{n-1m}^{b^+a^+} + \\ & + B'_n G_{n+1m}^{aa^+} + D'_n G_{n+1m}^{ba^+} + E'_n G_{n+1m}^{a^+a^+} + G'_n G_{n+1m}^{b^+a^+} \end{aligned} \quad (4.12)$$

os coeficientes dependem dos parâmetros de troca, dos ângulos de reconstrução  $\theta_n$  e das coordenadas do ponto da zona de Brillouin bidimensional considerado; eles são múltiplos dos coeficientes das equações obtidas para o cálculo das curvas de dispersão (eq. 3.22):

$$A_n = (J_1 - J_2) \cos 2\theta_n + J_1 (1 - \cos k_y a) - J_2 [\cos(\theta_{n-1} + \theta_n) + \cos(\theta_{n+1} + \theta_n)] + \\ + (1/2 J_1 - J_2) [\cos(\theta_{n-1} - \theta_n) + \cos(\theta_n - \theta_{n+1})] \quad (4.13)$$

$$B_n = 1/2 (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) [\cos(\theta_n - \theta_{n-1}) + 1] \quad (4.14)$$

$$B'_n = 1/2 (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) [\cos(\theta_n - \theta_{n+1}) + 1] \quad (4.15)$$

$$C_n = (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) (\cos 2\theta_n + 1) \cos k_x a \quad (4.16)$$

$$D_n = 1/2 J_2 \cos k_x a [\cos(\theta_n + \theta_{n-1}) + 1] \quad (4.17)$$

$$D'_n = 1/2 J_2 \cos k_x a [\cos(\theta_n + \theta_{n+1}) + 1] \quad (4.18)$$

$$E_n = 1/2 (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) [\cos(\theta_n - \theta_{n-1}) - 1] \quad (4.19)$$

$$E'_n = 1/2 (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) [\cos(\theta_n - \theta_{n+1}) - 1] \quad (4.20)$$

$$F_n = (J_2 \cos k_y a - 1/2 J_1) (\cos 2\theta_n - 1) \cos k_x a \quad (4.21)$$

$$G_n = 1/2 J_2 \cos k_x a [\cos(\theta_n + \theta_{n-1}) - 1] \quad (4.22)$$

$$G'_n = 1/2 J_2 \cos k_x a [\cos(\theta_n + \theta_{n+1}) - 1] \quad (4.23)$$

Obtemos da mesma forma um conjunto de equações para funções de Green de índices  $n$  e  $m$  definidas para os demais pares de operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco. Escrevendo a equação de Dyson (4.10) para um dos outros três operadores de desvio de spin no espaço real no lugar de  $S^+(\vec{n}\vec{R}_A)$  obtém-se uma equação análoga à 4.12, pois como mostramos no capítulo anterior o resultado do comutador de um dos três operadores de desvio restantes com o hamiltoniano é obtido a partir do resultado do comutador  $[S^+(\vec{n}\vec{R}_A), H]$  simplesmente intercambiando os operadores de criação e destruição de magnons correspondentes a  $S^+(\vec{n}\vec{R}_A)$  e ao novo operador de desvio considerado e também os operadores hermitianos conjugados. Esse procedimento resultará na alteração do primeiro operador das funções de Green da equação 4.12. Podemos alterar o segundo operador modificando-se simplesmente na equação de Dyson (4.10) o operador  $a(\vec{k})$  pelos demais operadores do



criação ou destruição de magnons no espaço recíproco. Assim obtemos equações para funções de Green de índices  $n$  e  $m$  definidas para todos os pares possíveis de operadores de criação e destruição de magnons. Esse conjunto pode ser expresso de maneira mais simples na forma matricial:

$$\omega G_{nm} = \Gamma_{nm} + R_{m_n} G_{nm} + R_{l e_n} G_{n-1m} + R_{l a_n} G_{n+1m} \quad (4.24)$$

As matrizes  $G_{mn}$ ,  $\Gamma_{mn}$ ,  $R_{m_n}$ ,  $R_{l e_n}$  e  $R_{l a_n}$  são dadas por:

$$G_{nm} = \begin{bmatrix} G_{nm}^{a^+a^+} & G_{nm}^{aa} & G_{nm}^{ab^+} & G_{nm}^{ab} \\ G_{nm}^{a^+a^+} & G_{nm}^{a^+a} & G_{nm}^{a^+b^+} & G_{nm}^{a^+b} \\ G_{nm}^{ba^+} & G_{nm}^{ba} & G_{nm}^{bb^+} & G_{nm}^{bb} \\ G_{nm}^{b^+a^+} & G_{nm}^{b^+a} & G_{nm}^{b^+b^+} & G_{nm}^{b^+b} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

$$\Gamma_{nm} = \begin{bmatrix} \delta_{nm} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta_{nm} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{nm} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\delta_{nm} \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

$$R_{m_n} = \begin{bmatrix} A_n & 0 & C_n & F_n \\ 0 & A_n & F_n & C_n \\ C_n & F_n & A_n & 0 \\ F_n & C_n & 0 & A_n \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

$$R_{l e_n} = \begin{bmatrix} B_n & E_n & D_n & G_n \\ E_n & B_n & G_n & D_n \\ D_n & G_n & B_n & E_n \\ G_n & D_n & E_n & B_n \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

$$Ria_n = \begin{bmatrix} B'_n & E'_n & D'_n & G'_n \\ E'_n & B'_n & G'_n & D'_n \\ D'_n & G'_n & B'_n & E'_n \\ G'_n & D'_n & E'_n & B'_n \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

Se considerarmos  $m=n=0$  a equação 4.24 se altera ligeiramente desaparecendo o termo que envolve  $Rie_0$  que obviamente não é definida. Também não são definidos os coeficientes  $\beta$ em linha (excetuando-se aqueles da matriz  $Rm_0$ ) no conjunto de equações 4.13 à 4.23 para  $n=0$ . Obtem-se o coeficiente  $A_0$  a partir da equação 4.13 substituindo-se os parâmetros de troca dos dois primeiros termos do lado direito pelos parâmetros equivalentes para a superfície uma vez que esse coeficiente diz respeito à interação entre spins de um mesmo plano; nos dois últimos termos obviamente desaparecem as parcelas que envolvem os ângulos  $\theta_{n-1}$ .

Assim para a obtenção da matriz  $G_{nn}$  a partir da qual calculamos a densidade espectral de magnons para o plano  $n$  e para um determinado ponto da zona de Brillouin bidimensional temos que resolver um sistema de equações acopladas para as matrizes de Green formalmente análogo às equações obtidas para o cálculo das curvas de dispersão no capítulo II (2.9a e 2.9b), ou seja, a equação para a matriz  $G_{nm}$  envolve as matrizes  $G_{nm}$ ,  $G_{n+1m}$  e  $G_{n-1m}$  para  $n$  diferente de zero. Abordaremos a seguir a solução desse sistema para duas situações distintas.

#### 4.3 Densidade Espectral de Magnons

Devido ao alcance da interação entre spins as equações obtidas para as matrizes de Green envolvem apenas mais duas matrizes distintas. No caso de um filme constituído por  $N$  planos atômicos as equações para as matrizes  $G_{00}$  e  $G_{N-1N-1}$  envolvem apenas mais uma matriz de Green, podemos portanto determinar relações de recorrência entre  $G_{mn}$  e  $G_{m+1n}$  e  $G_{m-1n}$  e  $G_{mn}$  a partir daquelas equações que dependem apenas das matrizes  $R_m$ ,  $R_{ie}$  e  $R_{ia}$  e então calcular diretamente a matriz  $G_{nn}$ . Assim a densidade espectral de magnons pode ser calculada para um filme, entretanto vamos inicialmente mostrar o cálculo para um sistema semi-infinito pois ele engloba o cálculo para filmes.

No capítulo anterior mostramos que mesmo para um filme de apenas dez planos atômicos já podíamos caracterizar uma situação do limite semi-infinito, ou seja, os ângulos de reconstrução são significativos apenas nos primeiros planos próximos à superfície. Assim trataremos o sistema semi-infinito considerando uma região superficial de dez planos atômicos cujos ângulos de reconstrução são aqueles calculados para o filme constituído pelo mesmo número de planos; fora dessa região, no volume do material, os ângulos de reconstrução são nulos.

Na região do volume devemos reformular algumas considerações do item anterior, pois para  $\Theta_n=0$  as duas sub-redes se equivalem. A primeira mudança é na zona de Brillouin bidimensional que passa a ser igual à do sistema não reconstruído, ou seja, quadrada de dimensão  $a$  enquanto que a região superficial apresenta uma zona retangular cujo tamanho na direção  $x$  é metade do da zona de volume. A matriz  $\Gamma_{nn}$  é modificada no volume pois os operadores de criação e destruição de magnons no espaço recíproco são os mesmos para as duas sub-redes alteran-

do alguns valores do primeiro comutador da equação 4.10; nós a chamamos de  $\Gamma_v$ :

$$\Gamma_v = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

Ainda vale ressaltar que se  $\Theta_n=0$  no volume os coeficientes  $F_n$  das matrizes  $Rm_n$  são nulos como também  $E_n$  e  $G_n$  e  $E'_n$  e  $G'_n$  das matrizes  $Rie_n$  e  $Ria_n$  respectivamente. O valor dos elementos das matrizes  $Rm_n$  independem de  $n$  e nós as denominamos  $Rm_v$ , as matrizes  $Rie_n$  e  $Ria_n$  são iguais e independem de  $n$  e as denominamos  $Ri$ .

Passamos então ao cálculo das densidades espectrais. A equação para a matriz  $G_{jj}$  onde  $j$  caracteriza um plano da região de volume ( $j \geq 9$ ) será:

$$\omega G_{jj} = \Gamma_v + Rm_v G_{jj} + Ri [ G_{j+1j} + G_{j-1j} ] \quad (4.31)$$

Definimos a matriz transferência,  $T_v$  para  $n \geq 9$ :

$$G_{n+1m} = T_v G_{nm} \quad (4.32)$$

Portanto obtemos a equação matricial para o cálculo de  $T_v$ :

$$T_v = [ \omega I - Rm_v - Ri T_v ]^{-1} Ri \quad (4.33)$$

Onde  $I$  é a matriz identidade de dimensão  $4 \times 4$ . A equação acima pode ser resolvida numericamente. Conhecendo-se  $T_v$  podemos obter a matriz  $G_{jj}$  a partir da seguinte equação decorrente da definição da matriz  $T_v$ :

$$G_{jj} = [ \omega I - Rm_v - 2Ri T_v ]^{-1} \Gamma_v \quad (4.34)$$

Resta-nos determinar a densidade e portanto a matriz  $G_{11}$  onde  $1$  indica um plano da região superficial. O conceito de matriz transferência não pode ser aplicado na região da superfície da mesma forma como fizemos

no volume, pois devido à diferença no valor dos ângulos de reconstrução plano a plano as matrizes  $Ria_n$  e  $Rie_n$  são distintas. Entretanto podemos definir uma matriz transferência que dependa do plano considerado e então encontrar as relações de recorrência entre as diversas funções de Green como mencionamos no início deste item. Considera-se a equação para  $G_{11}$ :

$$\omega G_{11} = \Gamma_{11} + Rm_1 G_{11} + Rie_1 G_{1-11} + Ria_1 G_{1+11} \quad (4.35)$$

para  $1 \leq i \leq 8$ .

Definimos:

$$G_{n-1m} = T'_{n-1} G_{nm} \quad (4.36)$$

e

$$G_{n+1m} = T_{n+1} G_{nm} \quad (4.37)$$

Obtemos assim a expressão para  $G_{11}$ :

$$\omega G_{11} = [\omega I - Rm_1 - Ria_1 T_{1+1} - Rie_1 T'_{1-1}]^{-1} \Gamma \quad (4.38)$$

onde  $\Gamma = \Gamma_{11}$ . Devemos então determinar  $T_{1+1}$  e  $T'_{1-1}$ . Como discutimos no início desse item a equação para  $G_{01}$  envolve apenas  $G_{01}$  e  $G_{11}$  e a equação para  $G_{91}$  envolve  $G_{91}$ ,  $G_{81}$  e  $G_{101}$  que devido à definição da matriz  $T_V$  é reescrita como  $T_V G_{91}$ . Assim partindo-se das equações para  $G_{01}$  e  $G_{91}$  podemos encontrar as relações de recorrência entre  $T'_{n-1}$  e  $T'_n$  e  $T_{n+1}$  e  $T_n$  respectivamente, que nos permitam obter as matrizes desejadas. Considera-se então a equação para  $G_{91}$ :

$$\omega G_{91} = Rm_9 G_{91} + Rie_9 G_{81} + Ri G_{101} \quad (4.39)$$

Uma vez que  $G_{101} = T_V G_{91}$  e da definição das matrizes  $T_{n+1}$ ,  $G_{91} = T_9 G_{81}$ , podemos escrever:

$$T_9 = [\omega I - Rm_9 - Ria_9 T_V]^{-1} Rie_9 \quad (4.40)$$

a equação para  $G_{81}$  já nos permite encontrar a relação de recorrência

para as matrizes  $T_n$ :

$$T_n = [\omega I - Rm_n - Ria_n T_{n+1}]^{-1} Rie_n \quad (4.41)$$

onde  $1 \leq n \leq 9$ . Agora considerando-se a equação para  $G_{01}$ :

$$\omega G_{01} = Rm_0 G_{01} + Ria_0 G_{11} \quad (4.42)$$

Da definição das matrizes  $T'_{n-1}$  podemos escrever:

$$T'_0 = [\omega I - Rm_0]^{-1} Ria_0 \quad (4.43)$$

A partir da equação para  $G_{11}$  podemos encontrar a relação de recorrência para as matrizes  $T'_n$ :

$$T'_n = [\omega I - Rm_n - Rie_n T'_{n-1}]^{-1} Ria_n \quad (4.44)$$

para  $0 \leq n \leq 9$ .

Assim para calcular a densidade espectral de magnons do plano de índice  $i$  da região superficial calculamos a matriz  $G_{11}$  através da equação 4.38. Obtemos a matriz  $T_{i+1}$  a partir da relação de recorrência da equação 4.41 partindo-se do conhecimento da matriz  $T_9$  e a matriz  $T'_{i-1}$  a partir da relação de recorrência 4.44 conhecendo-se a matriz  $T'_0$ . A equação 4.38 pode ser estendida para  $i=0$  ou  $i=9$  simplesmente desconsiderando-se os termos que envolvem  $Rie_0$  e  $Ria_9$  respectivamente.

A densidade espectral de magnons para um filme constituído por dez planos é calculada de maneira idêntica à desenvolvida acima para a região superficial com a diferença apenas que na equação 4.39 o último termo do lado direito desaparece uma vez que não existe o plano de índice dez e portanto também desaparece o termo que envolve  $T_v$  na equação 4.40.

Apresentamos inicialmente a densidade espectral de magnons calculada no ponto X da zona de Brillouin bidimensional para um siste-

ma semi-infinito cujas integrais de *exchange* são as mesmas do sistema para o qual apresentamos as curvas de dispersão na figura 2.3, para os dois primeiros planos da região superficial e para um plano do volume em dois casos: inicialmente considerando-se os ângulos de reconstrução nulos (figuras 4.1, 4.3 e 4.5 respectivamente) e utilizando-se o seu valor correto apresentado na tabela 1 do capítulo III (figuras 4.2, 4.4 e 4.6 respectivamente). Escolhemos o ponto X pois esse é o ponto em que os modos de superfície apresentam energia mínima (no sistema não reconstruído) e onde a sua separação (em energia) dos modos de volume se torna mais evidente. Ainda apresentamos curvas de densidade espectral considerando-se os ângulos de reconstrução nulos justamente para reconstituir o sistema não reconstruído e portanto possibilitar a comparação com as curvas da figura 2.3.

A observação da figura 4.1, correspondente ao primeiro plano da região superficial no sistema não reconstruído, evidencia de imediato o estado de energia negativa, que pode ser notado nas curvas de dispersão da figura 2.3, separado de uma banda que corresponde aos modos de volume obtidos nas curvas de dispersão. Comparando-se com as figuras 4.3 e 4.5 em que a densidade é mostrada para o mesmo ponto da zona de Brillouin bidimensional para o segundo plano da região superficial e para o volume respectivamente, fica evidente que o estado localizado (em energia) obtido que aparece na figura 4.1 é um estado de superfície uma vez que ele aparece com um peso muito menor em relação à banda já no segundo plano da região superficial e inexistente no volume (lembramos que a área das curvas é constante). O grau de localização do estado de superfície segue bastante de perto o resultado que se ob-

tém no problema eletrônico<sup>20</sup>. Outro fato que pode ser notado é que a energia do estado de superfície bem como a largura da banda de estados de volume obtida guardam uma proporção com os valores que aparecem nas curvas de dispersão do capítulo II.

Apresentamos nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9 as curvas de densidade espectral calculadas no ponto X para um filme constituído de dez planos atômicos para o primeiro, segundo e quinto planos respectivamente. Os parâmetros de troca são os mesmos considerados no sistema semi-infinito e estamos considerando o sistema não reconstruído (ângulos de reconstrução nulos). Observando as figuras 4.7 e 4.8 notamos que o estado de superfície tem a mesma localização em energia e praticamente o mesmo peso em relação à 'banda' (que nesse caso aparece como um conjunto de funções delta) corroborando o resultado do caso semi-infinito. Ainda na figura 4.9 notamos que o estado de superfície já não aparece no quinto plano do filme que para efeito do estado de superfície já pode ser caracterizado como volume; finalmente o perfil delineado pelas funções delta dessa figura é muito parecido com a banda de volume do sistema semi-infinito.

Passemos à análise das curvas de densidade para o sistema de spins reconstruído (figuras 4.2, 4.4 e 4.6). Uma primeira observação revela que a densidade espectral no volume (fig. 4.6) é praticamente a mesma que no sistema sem reconstrução (fig. 4.5). Esse resultado era esperado uma vez que conforme mostramos no capítulo anterior a reconstrução se restringe à região superficial e portanto consideramos que no volume não há diferenças entre os dois sistemas. As diferenças significativas ocorrem nos planos da superfície.



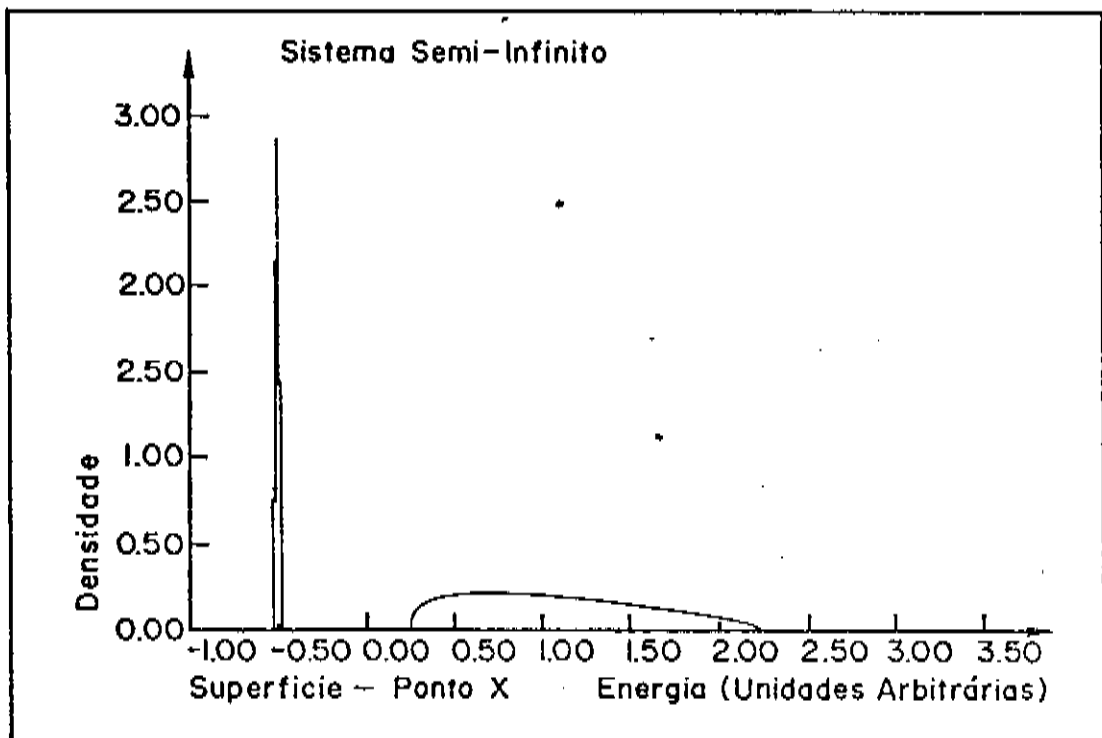


figura 4.1: Densidade espectral de magnons no ponto X para plano superficial de um sistema semi-infinito não reconstruído.

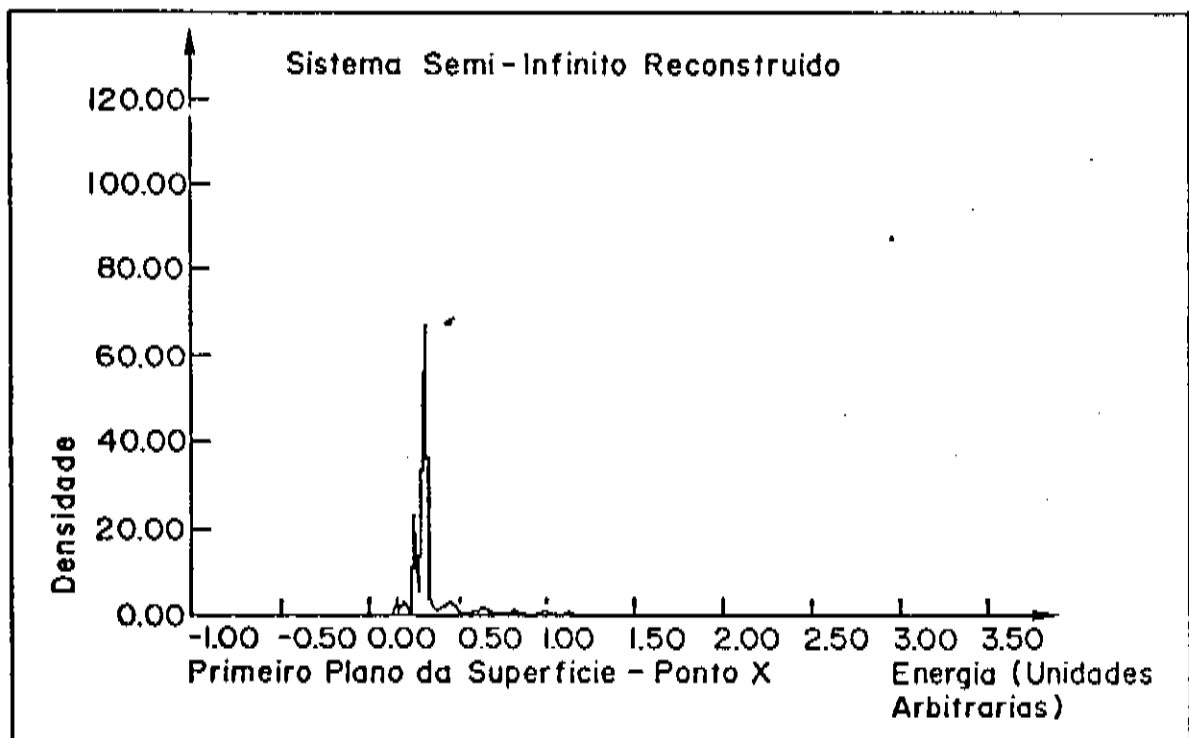


figura 4.2: Densidade espectral de magnons no ponto X para o plano superficial de um sistema semi-infinito reconstruído.

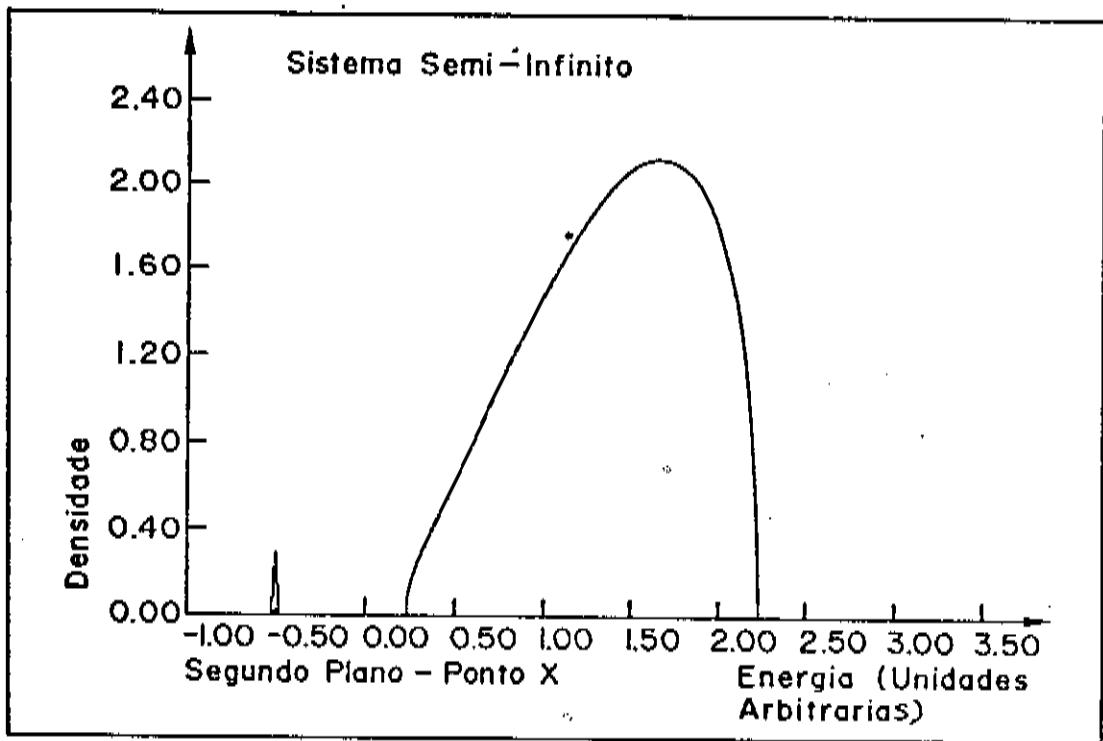


figura 4.3: Densidade espectral de magnons no ponto X para o segundo plano de um sistema semi-infinito não reconstruído.

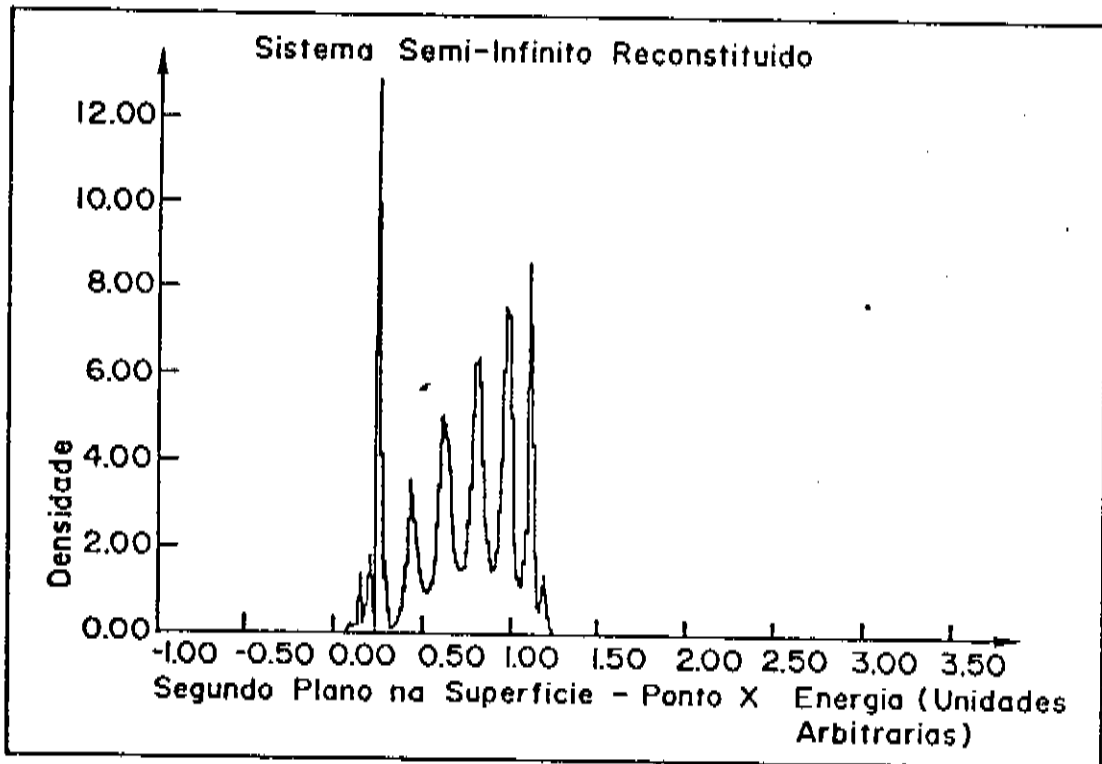
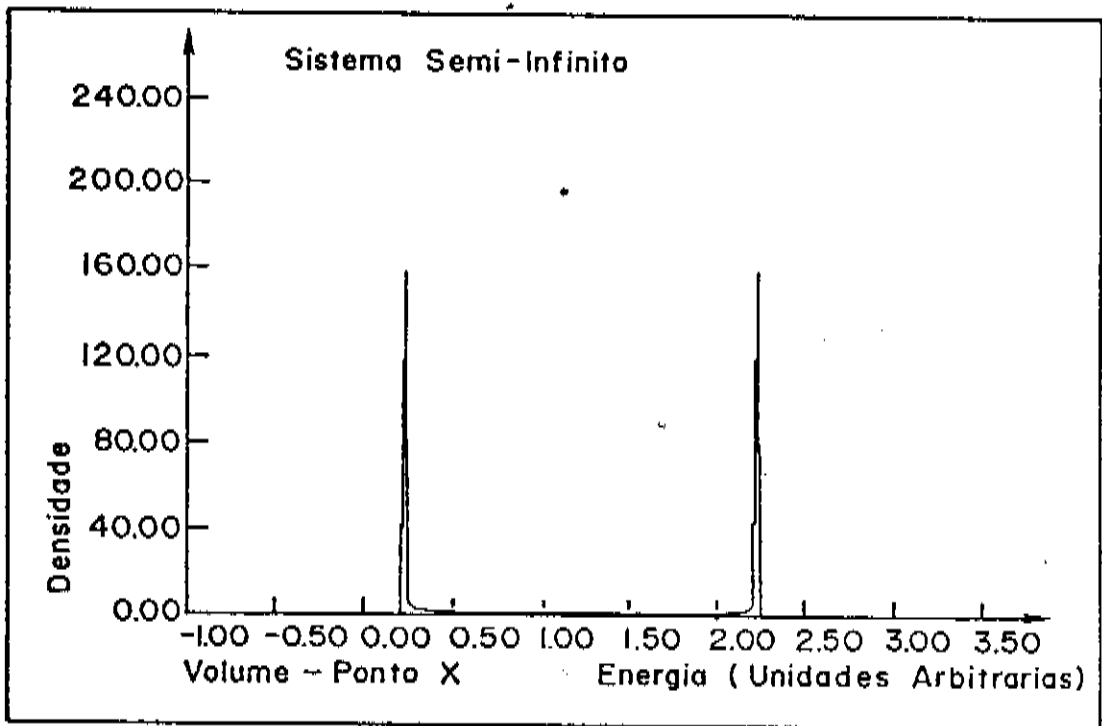
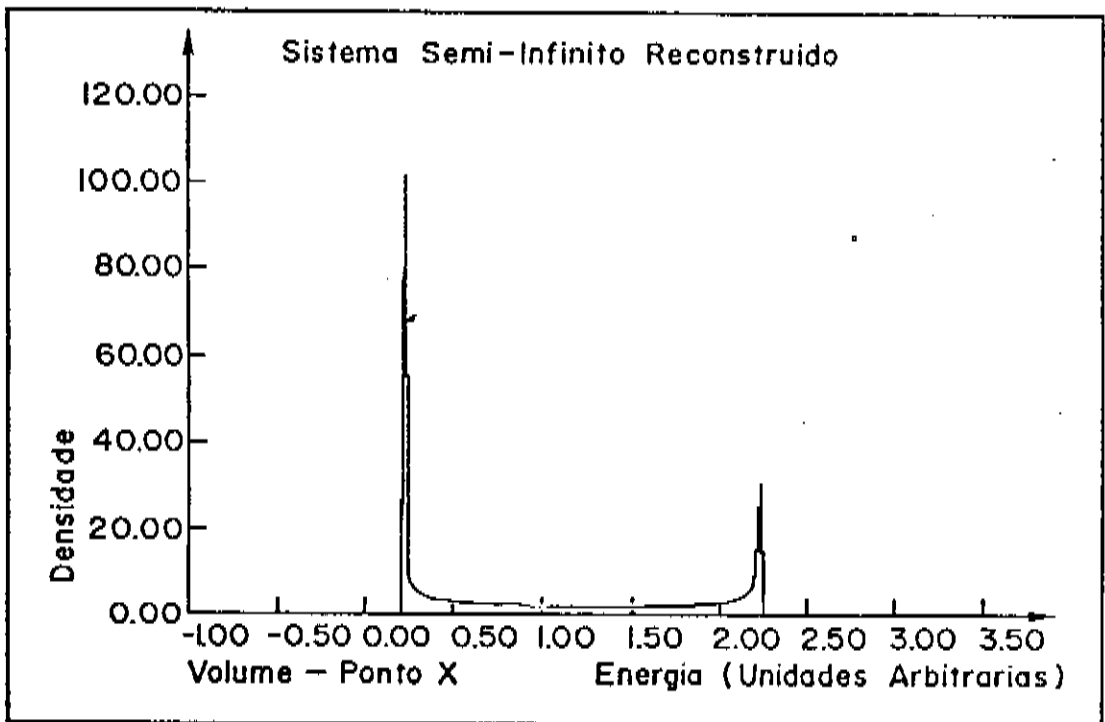


figura 4.4: Densidade espectral de magnons no ponto X para o segundo plano de um sistema semi-infinito reconstruído.



*figura 4.5: Densidade espectral de magnons no ponto X para um plano do volume de um sistema semi-infinito não reconstruído.*



*figura 4.6: Densidade espectral de magnons no ponto X para um plano do volume de um sistema semi-infinito reconstruído.*

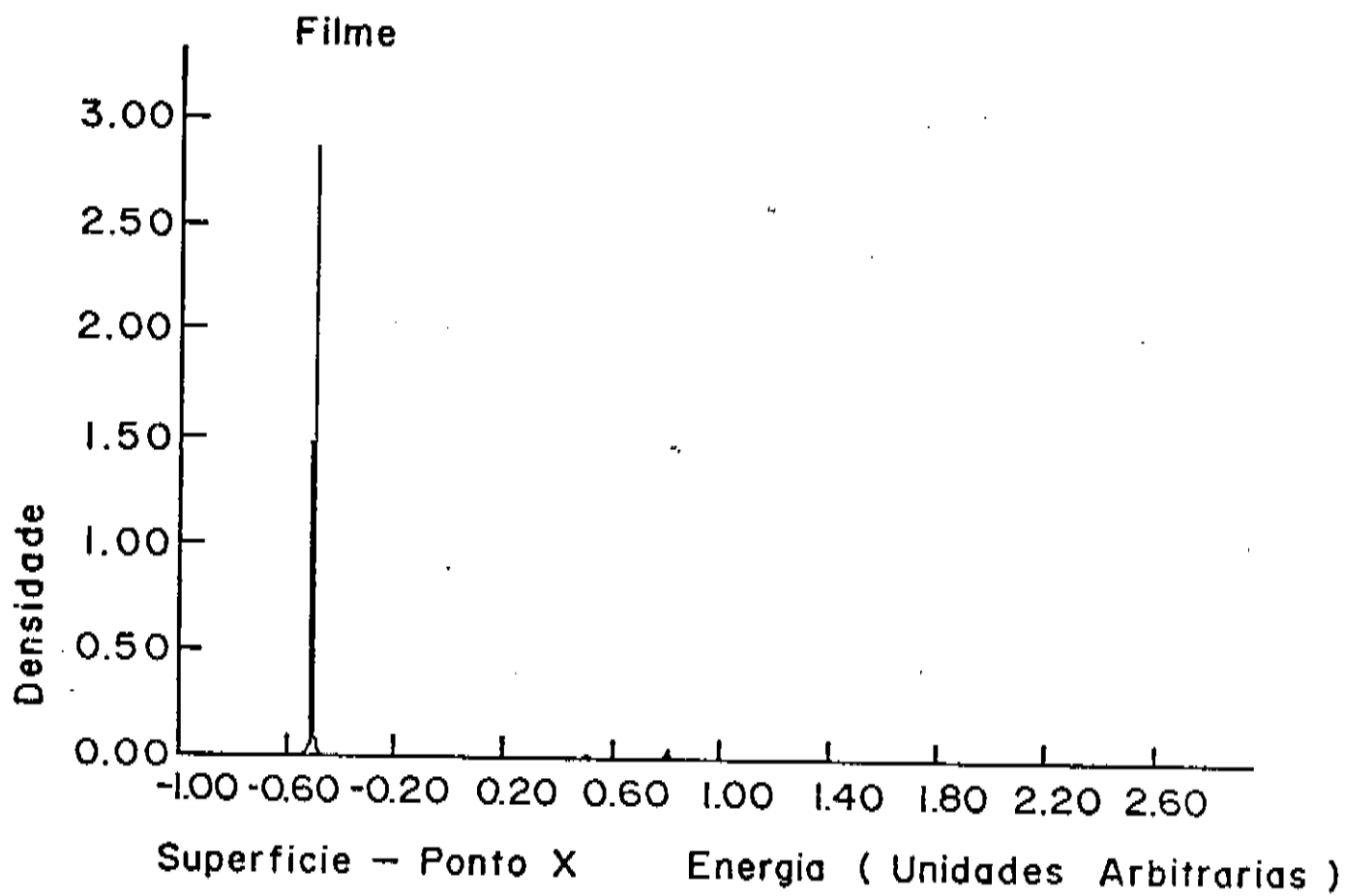


figura 4.7: Densidade espectral de magnons no ponto X para plano superficial de um filme de dez planos não reconstruído.

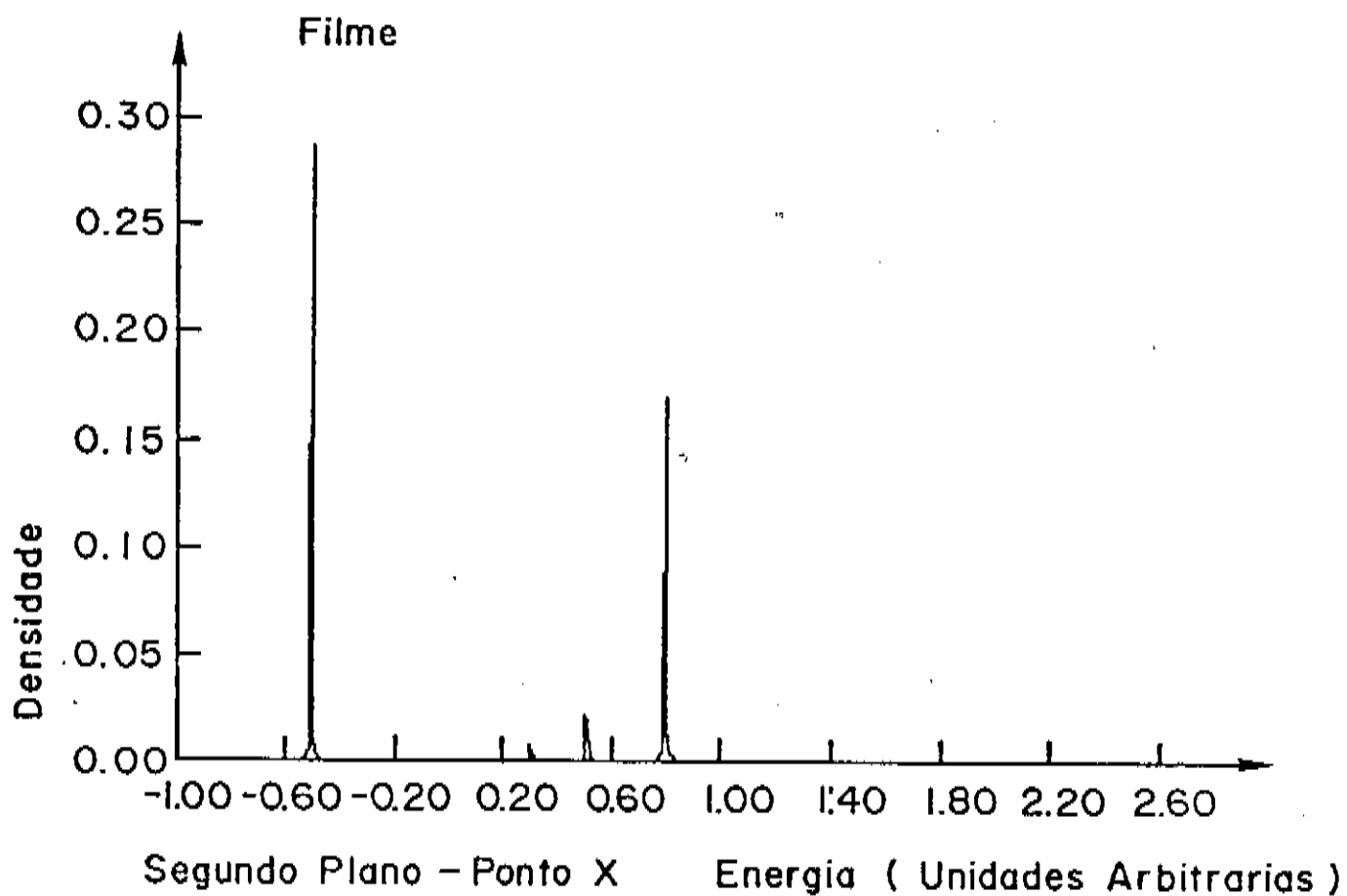


figura 4.8: Densidade espectral de magnons no ponto X para o segundo plano de um filme de dez planos não reconstruído.

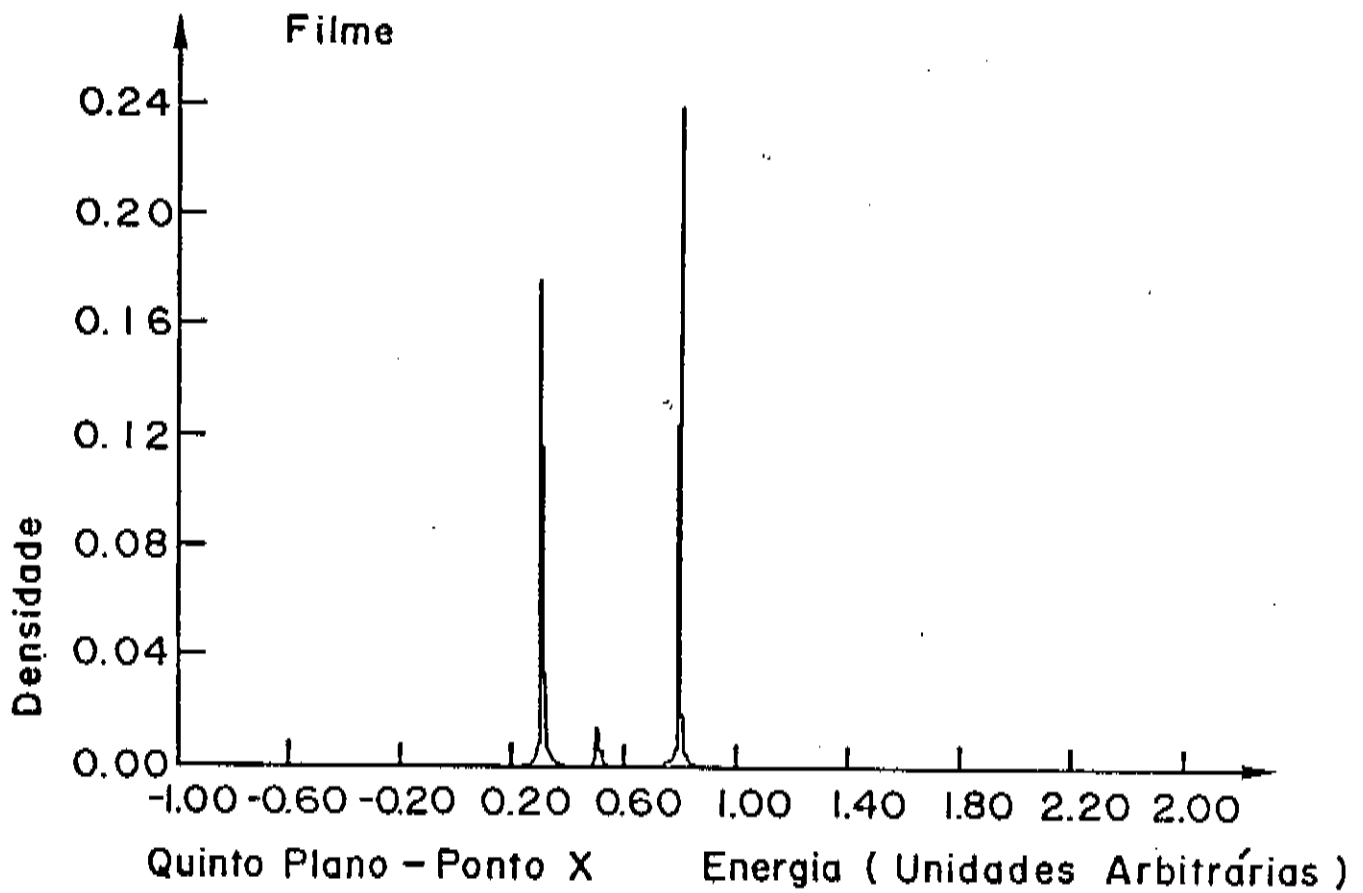


figura 4.9: Densidade espectral de magnons no ponto X para o quinto plano de um filme de dez planos não reconstruído.

As densidades espectrais de magnons calculadas para o ponto X da zona de Brillouin bidimensional do sistema de spins sem reconstrução de superfície para os planos da região superficial apresentam um estado de superfície separado de uma banda do tipo s, em analogia ao caso eletrônico. No sistema magnético reconstruído o estado de superfície é incorporado à banda, fato que já pode ser notado pelas curvas de dispersão da figura 3.2, não ocorrendo a existência de estados com energia negativa. Além disso as bandas apresentam uma estrutura de picos que é típica de um sistema em que os parâmetros de interação se modificam plano a plano. Vamos mostrar isso a partir de um exemplo simples para um sistema eletrônico.

No apêndice A apresentamos o cálculo da densidade espectral de estados de um sistema cúbico simples com um único orbital do tipo s, *i.e.*, com simetria esférica, por sítio e com interação s-s entre primeiros vizinhos. Consideramos que os parâmetros LCAO possam diferir entre si nos planos que caracterizam a superfície e que no volume eles são iguais. Por simplicidade considerou-se uma superfície constituída por três planos atômicos.

A figura 4.10 apresenta a densidade espectral de estados para o caso em que todos os parâmetros LCAO são iguais à um e a figura 4.11 para o caso em que eles são ligeiramente distintos e próximos da unidade.

Quando igualamos todos os parâmetros LCAO à um (o mesmo valor do parâmetro para o volume) nós restauramos a isotropia das interações entre os átomos e obtemos uma banda tipo s. Essa situação pode ser comparada ao sistema magnético sem reconstrução pois o estado fun-

damental assumido tem uma direção de magnetização única, independente do plano, determinando a isotropia na interação entre spins.

Para o caso em que os parâmetros são distintos criando-se uma anisotropia na interação entre os orbitais nos planos da superfície obtemos uma curva que apresenta uma estrutura de picos e vales e um deslocamento de estados de energia mais elevada no sentido de energia mais baixa provocando um estreitamento da banda. Essas características são comparáveis as das curvas para o sistema magnético reconstruído; o número de picos reproduzido no sistema eletrônico pode ser aumentado considerando-se uma superfície com um maior número de planos, ou seja, aumentando-se o número de parâmetros LCAO ou ainda como é próprio do sistema reconstruído pela introdução de duas sub-redes. Pode-se assim estabelecer uma ligação entre esses parâmetros LCAO no sistema eletrônico, e os parâmetros de *exchange* efetivos no sistema magnético.

Podemos então concluir que a preponderância anti-ferromagnética no primeiro plano de um sistema semi-infinito dá origem à uma região superficial de alguns planos atômicos reconstruída. As principais características dos planos dessa superfície, como a densidade espectral de magnons, são determinadas pela anisotropia na interação entre spins geradas a partir da reconstrução. No modelo de Heisenberg a interação entre pares de spins é proporcional ao produto escalar entre eles; como no sistema magnético reconstruído os ângulos de reconstrução são diferentes de plano para plano e em cada plano eles têm sinais opostos em cada sub-rede fica determinada uma diferença no valor da interação entre spins dependendo do posicionamento relativo entre ambos nos planos da região superficial.



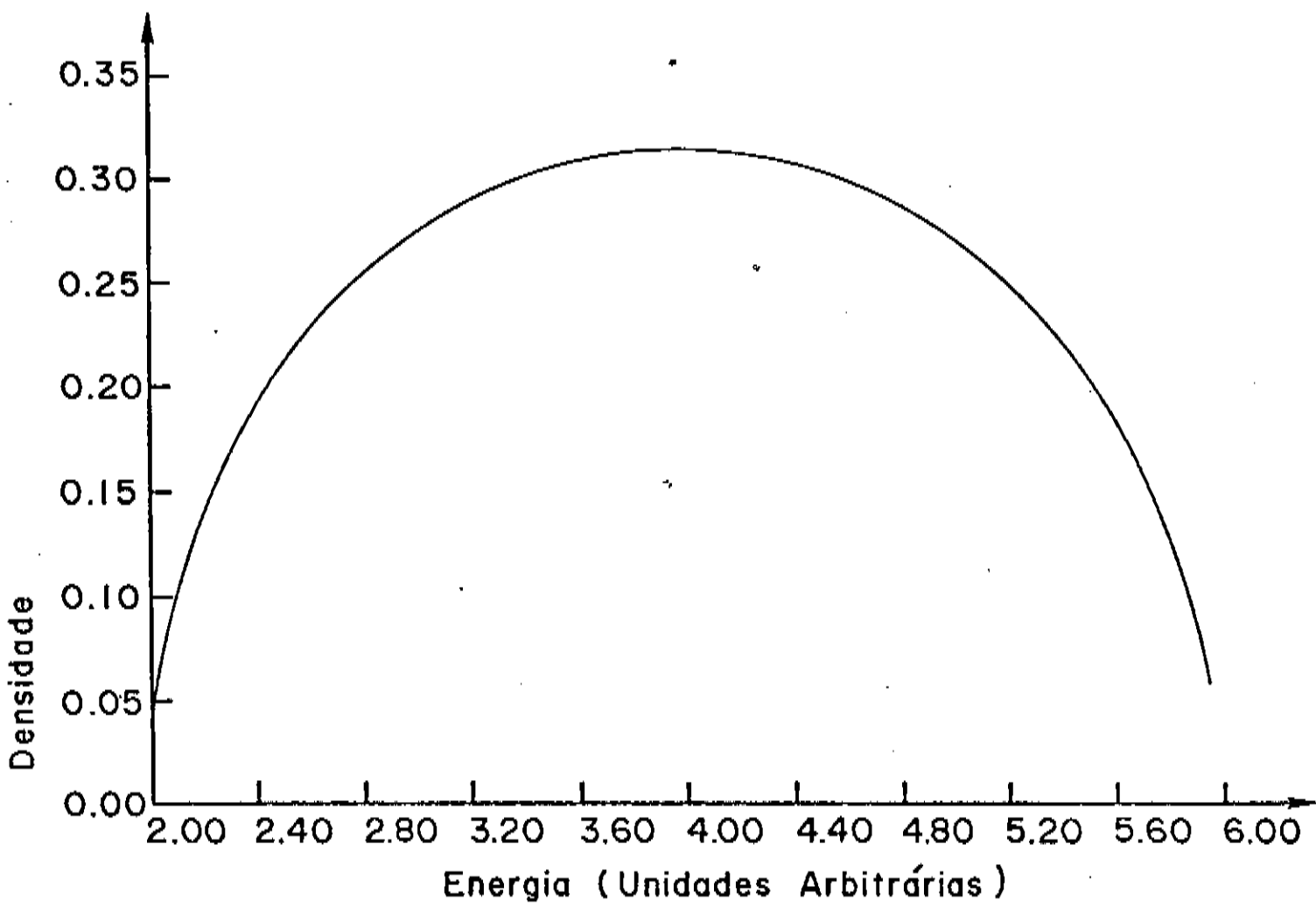
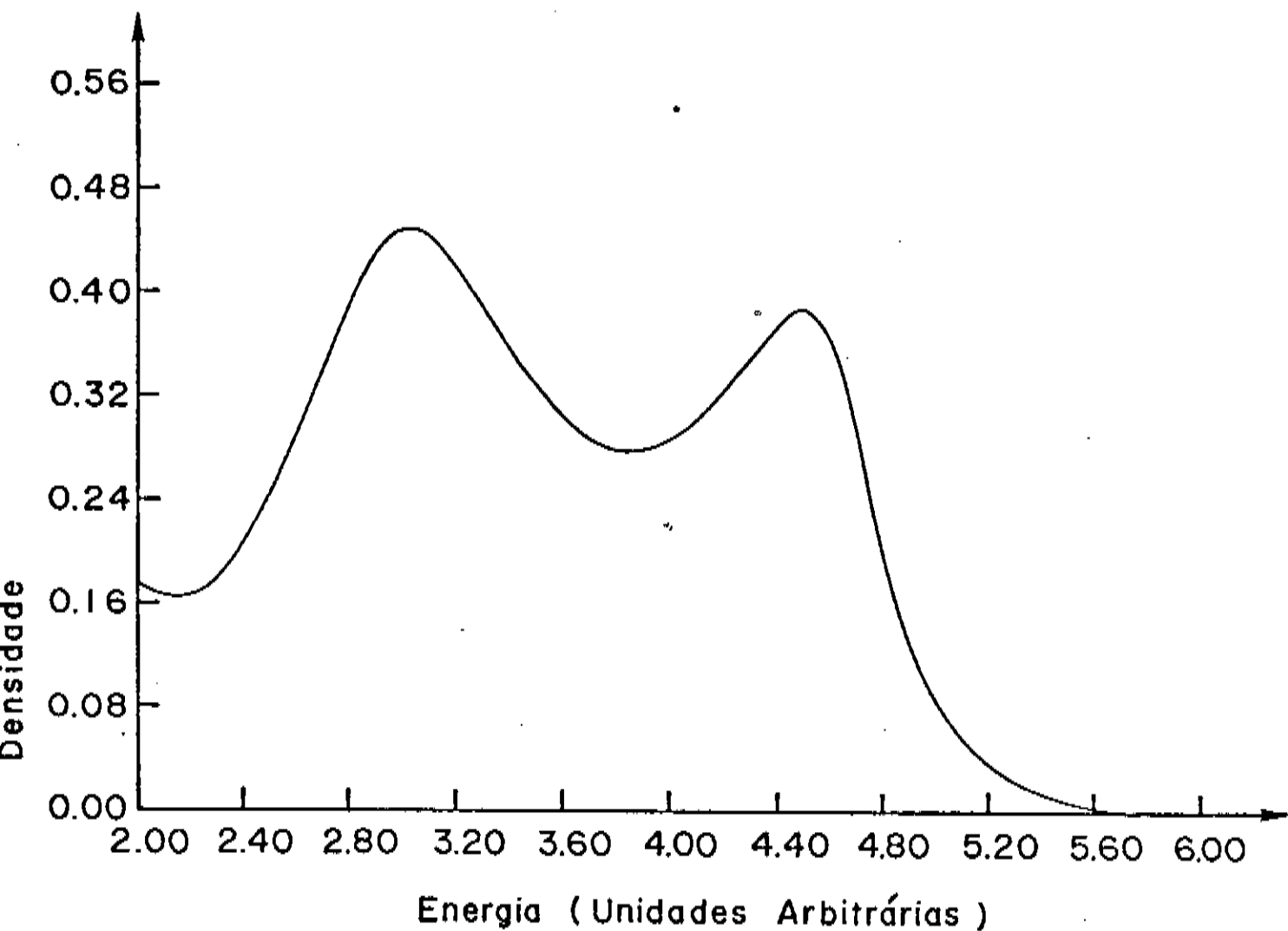


figura 4.10: Densidade espectral de estados eletrônicos no ponto  $\Gamma$  para o plano superficial. Parâmetros LCAO para os planos da superfície e volume idênticos.



*figura 4.11: Densidade espectral de estados eletrônicos no ponto  $\Gamma$  para o plano superficial. Parâmetros LCAD para os planos da superfície distintos do parâmetro de volume.*

## CAPÍTULO V

### CONCLUSÕES

Estados de um sistema cristalino periódico obedecem o teorema de Bloch e se estendem ao longo de todo o cristal. A presença de uma superfície pode gerar estados localizados próximos à região superficial que decaem exponencialmente para fora e para dentro do cristal. Esses estados são denominados de estados de superfície. No contexto deste trabalho vimos que a competição ferro-antiferromagnética aliada à presença da superfície pode causar um rearranjo no sistema de spins levando ao fenômeno de reconstrução na região superficial, com a consequente formação de sub-redes, alterando o estado fundamental do sistema periódico. A dispersão de magnons superficiais tende a sentir o efeito da reconstrução da superfície e é fortemente dependente do número de coordenação.

Finalmente vale ressaltar que a partir do conhecimento mais detalhado da estrutura magnética desses sistemas ficam abertos uma série de possíveis problemas e aprimoramentos. Pode-se, por exemplo, introduzir um efeito de anisotropia considerando-se valores diferentes para as integrais de exchange nas direções paralela e normal ao plano da superfície, problema que estamos trabalhando no momento. Ainda é possível estudar o efeito de outro tipo de anisotropia, como a axial de spin único por exemplo. Podemos adiantar que o efeito no sistema de spins é muito similar à aplicação de um campo magnético externo na

mesma direção, mas extremamente complexo no caso de instabilidade superficial pois o número de spins por célula unitária no sistema reconstruído depende da intensidade do efeito, não sendo necessariamente inteiro, criando-se portanto uma espécie de 'super-rede' de spin. Ainda utilizando-se do formalismo de funções de Green podemos tratar o problema de impurezas (não magnéticas, antiferromagnéticas) no sistema de spins e muito mais simples, tratar os efeitos da temperatura finita.

## APÊNDICE A

### O CÁLCULO DA DENSIDADE DE ESTADOS ELETRÔNICOS PARA UM MODELO SIMPLES

Apresentamos o cálculo da densidade espectral de estados eletrônicos para um sistema semi-infinito utilizando-se o método da matriz transferência. Descrevemos o sistema a partir de um hamiltoniano do tipo LCAO<sup>26</sup> e consideramos que nos planos que caracterizam a superfície do material os parâmetros LCAO possam diferir entre si, sendo iguais no volume. Assim podemos fazer uma analogia com o sistema magnético de spins reconstruído, conforme discutimos no final do capítulo IV.

Consideramos então um sistema de estrutura cúbica simples com um único orbital do tipo s, i.e. com simetria esférica, por sítio e com interação somente entre primeiros vizinhos. Temos então o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{ij} V_{ss}(\vec{R}_i, \vec{R}_j) |\vec{R}_i s\rangle \langle \vec{R}_j s| \quad (\text{A.1})$$

Onde os estados  $|\vec{R}_i s\rangle$  são orbitais de Wannier do tipo s centrados no sítio  $\vec{R}_i$ . Excluímos as auto-energias em função da simplicidade e também porque esse termo inexistente para o sistema de spins.

Na presença da superfície nós representamos a posição de um dado íon  $\vec{R}_i$  pelo índice n que enumera os planos paralelos ao plano superficial ( $l_z=0$ ) e pelo vetor  $\vec{r}_n$  que é um vetor de posição do íon no plano n. Como no caso do sistema de spins a estrutura é periódica nos planos paralelos à superfície e assim definimos estados de 'Bloch' correspondentes aos estados de Wannier acima:

$$|n\vec{k}_{||}s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}_n} \exp(i\vec{k}_{||} \cdot \vec{r}_n) |n\vec{r}_n s\rangle \quad (\text{A.2})$$

Na equação acima  $N$  é o número de íons por plano. Por simplicidade deixaremos de escrever  $s$ , já que estamos considerando apenas um orbital desse tipo por sítio e também denotaremos  $\vec{k}_{||}$  simplesmente por  $\vec{k}$ . Definimos de modo usual<sup>27</sup> o espaço recíproco bi-dimensional, como fizemos no caso dos spins, correspondente à estrutura no espaço real bi-dimensional de planos paralelos ao plano superficial reescrevendo o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \sum_{\vec{k}} \left( \sum_n H(n) |n\vec{k}\rangle \langle n\vec{k}| + \sum_{n,n'} H(n,n') |n\vec{k}\rangle \langle n'\vec{k}| \right) \quad (\text{A.3})$$

Com:

$$H(n) = \sum_{\vec{r}_n} \exp(i\vec{k}_{||} \cdot \vec{r}_n) V(n\vec{r}_n, n0) = 2V(n) [\cos k_x a + \cos k_y a] = 4\gamma(k)V(n) \quad (\text{A.4})$$

$$H(n,n') = \sum_{\vec{r}_n} \exp(i\vec{k}_{||} \cdot \vec{r}_n) V(n'\vec{r}_n, n0) = V(n,n') \quad (\text{A.5})$$

Consideramos que os parâmetros  $V(n)$  possam diferir entre si apenas nos primeiros planos que caracterizam a superfície, bem como também  $V(n,n')$ . Na situação de volume esses parâmetros são fixos e iguais. Por simplicidade de cálculo utilizamos uma superfície com apenas três planos, reduzindo assim a seis o número de parâmetros LCAO.

Definimos a função de Green  $G(E)$  a partir da equação de Dyson:

$$EG(E) = 1 + HG(E) \quad (\text{A.6})$$

e o elemento de matriz  $G_{nm}(E)$ :

$$G_{nm}(E) = \langle n\vec{k}|G(E)|m\vec{k}\rangle \quad (\text{A.7})$$

Utilizando a base de funções  $|n\vec{k}\rangle$  obtemos o seguinte conjunto de equações para as funções de Green:

$$(E - 4\gamma V(0))G_{00} = 1 + V(0,1)G_{10} \quad (\text{A.8})$$

$$(E - 4\gamma V(n))G_{n0} = V(n,n-1)G_{n-10} + V(n,n+1)G_{n+10} \quad (\text{A.9})$$

para  $n=1,2$ .

$$(E-4\gamma V(v))G_{30} = V(3,2)G_{20} + V(v)G_{40} \quad (A.10)$$

$$(E-4\gamma V(v))G_{m0} = V(v)(G_{m-10} + G_{m+10}) \quad (A.11)$$

para  $m>4$ .

Definimos a função transferência T:

$$TG_{n0} = G_{n+10} \quad (A.12)$$

Obtemos então a partir das equações para as funções de Green uma equação para a função T; tomamos o parâmetro  $V(v)$  igual à um, ou seja, o utilizamos como unidade de energia:

$$T^2 - (E-4\gamma)T + 1 = 0 \quad (A.13)$$

Resolvendo-se:

$$T = 1/2(E-4\gamma) - 1/2[(E-4\gamma)^2 - 4] \quad (A.14)$$

A raiz acima é determinada pela condição de contorno  $E \rightarrow \infty$ ,  $G(E) \rightarrow 1/E$ .

Obtem-se os limites da banda:

$$4\gamma - 2 < E < 4\gamma + 2 \quad (A.15)$$

Conhecendo-se a função de transferência determinam-se as funções de Green  $G_{nn}$ . O cálculo é inteiramente análogo ao do sistema magnético. Para o volume:

$$G_{vv} = 1/[E-4\gamma-2T] \quad (A.16)$$

e para a superfície:

$$G_{00} = E-4\gamma V_1 - V_{01} (E-4\gamma V_2 - V_{12} [E-4\gamma V_3 - V_{23} (E-4\gamma - T)^{-1} V_{23}]^{-1} V_{12})^{-1} V_{01} \quad (A.17)$$

Na equação acima escrevemos  $V_n$  ao invés de  $V(n)$  e  $V_{nm}$  no lugar de  $V(n,m)$ . Finalmente a densidade espectral de estados eletrônicos para o plano  $n$  é calculada através da relação:

$$P_n(\vec{k}, E) = -1/\pi \text{Im} G_{nn}(\vec{k}, E+i0) \quad (A.18)$$

## REFERÊNCIAS

- [1] W.Heisenbeg, Z. Physik 49,619(1928)
- [2] Ya.I.Frenkel, Z. Physik 49,31(1928)
- [3] O.Madelung, 'Introduction to Solid State Theory',Springer-Verlag, 1978, cap.3
- [4] J.H.Van Vleck, 'Theory of Eletric and Magnetic Susceptibilities', Oxford University Press, 1932, cap.12
- [5] P.A.M.Dirac, Proc.Roy.Soc,(London) A123,714(1929)
- [6] P.D.Lowdin, Rev.Mod.Phys. 34,80(1962)
- [7] S.V.Tyablikov, 'Methods in the Quantum Theory of Magnetism', Plenum Press, 1967, cap.2
- [8] F.Bloch, Z. Physik 61,206(1930)
- [9] A.I.Akhhiezer, V.G.Bar'yakhtar e M.I.Kaganov, Soviet Phys. Uspekhi 3,567(1961)
- [10] T.Wolfram e J.Callaway, Phys.Rev. 130,2207(1963)
- [11] F.J.Dyson, Phys.Rev. 102,1217(1956)
- [12] I.Tamm, Phys.Z.Sowjetunion 1,733(1932)
- [13] R.F.Wallis, A.A.Maradudin, I.P.Ipatova e A.A.Klotchikin, Solid State Commun. 5,89(1967)
- [14] L.Dobrzynski e D.L.Mills, Phys.Rev. 178,839(1969)
- [15] L.Passel, O.W.Dietrich e J.A.Als-Nielsen, Phys.Rev. B14,481(1976)
- [16] C.Demangeat e D.L.Mills, Phys.Rev. B14,4997(1976)
- [17] D.N.Zubarev, Soviet Phys. Uspekhi 3,320(1960)
- [18] N.N.Bogolyubov e S.V.Tyablikov, Soviet Phys. Doklady 4,604(1959)
- [19] J.B.Salzberg, L.M.Falicov e C.E.T.Gonçalves da Silva, Solid St. Commun. 18,1077(1976)



- [20] C.E.T.Gonçalves da Silva e B.Laks, J.Phys.C: Solid St.Phys. 10,851(1977)
- [21] A.I.Akhiezer, V.G.Bar'yakhtar e S.V.Peletminskii, 'Spin Waves', North-Holland Publishing Co., 1968, cap. 5
- [22] A.Messiah, 'Quantum Mechanics', North-Holland Publishing Co., 1968, cap. XIII
- [23] I.M.Lifshitz, Advanc.Phys. 13,485(1964)
- [24] N.W.Ashcroft e N.D.Mermin, 'Solid State Physics', Holt,Rinehart and Winston, 1976, cap.8
- [25] S.E.Trullinger e D.L.Mills, Solid St.Comm. 12,819(1973)
- [26] J.C.Slater e G.F.Koster, Phys.Rev. 94,1498(1954)
- [27] J.M.Ziman, 'Principles of Theory of Solids', Cambridge University Press, 1972, cap. 1