

## **SOBRE A TEORIA DO MAGNETISMO LOCALIZADO**

---

*Mário Alberto Tenan*

*Trabalho apresentado ao Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.*

*Setembro de 1976*

*À Lúcia e à Márcia Maria*

## AGRADECIMENTOS

*Ao Prof. José Galvão Ramos, orientador inicial,  
pela sugestão do problema e pela atenção que me  
foi concedida.*

*Ao Prof. Roberto Luzzi, pelo apoio e estímulo  
recebidos, mesmo antes de ter substituído o <sup>P</sup>prof.  
Galvão na orientação deste trabalho.*

## RESUMO

O modelo de Heisenberg na Teoria do Magnetismo apresenta dois aspectos opostos a serem conciliados em qualquer formalismo: a obediência à cinemática local e o caráter coletivo das excitações. A técnica de funções de Green tem sido extensivamente utilizada no estudo deste modelo, principalmente através de aproximações chamadas de primeira ordem. No caso de spin meio, a aproximação proposta por Dembinski é, dentre as aproximações de primeira ordem, a que procura dar o melhor tratamento simultâneo aos dois aspectos mencionados acima. Neste trabalho faz-se uma análise exaustiva desta aproximação. Examinando-se o espectro de excitações, verifica-se a existência de uma excitação localizada acima da faixa de energia de um mágnon ("estado ligado"). Mostra-se que a função de Green apresenta características semelhantes às obtidas em aproximações de segunda ordem, conservando certos aspectos da interação entre duas partículas. Verifica-se também que a forma da equação de movimento resultante atende melhor às exigências da cinemática de spin do que aquelas obtidas via aproximações de primeira ordem mais modestas. Estes aspectos, e em particular o último, sugerem que uma melhora da aproximação de Dembinski consistiria em incorporar uma renormalização da energia dos mágnons que seja dependente do comprimento de onda.

# ÍNDICE

PLANO GERAL DO TRABALHO .....	7
PARTE A: <i>Ferromagnetismo</i>	
INTRODUÇÃO .....	9
Referências .....	18
I.    O PROBLEMA DA CINEMÁTICA DE SPIN NO MODELO DE HEISENBERG PARA O FERROMAGNETISMO .....	24
A. Proposição do Modelo .....	24
B. Análise do Problema de Uma e Duas Partículas pela Técnica de Funções de Green .....	26
C. A Interação Cinemática e a Estrutura da Função de Green de Primeira Ordem, a Baixa Temperatura .....	36
Referências .....	47
II.   A APROXIMAÇÃO DE DEMBINSKI PARA A FUNÇÃO DE GREEN TRANSVERSAL .....	48
A. Funções de Correlação de Ordem Superior .....	49
B. Quantidades Termodinâmicas pelo Método Iterativo de Solução .....	51
Referências .....	56
III.  A SOLUÇÃO EXATA NO ESQUEMA DE DEMBINSKI .....	57
A. Solução Exata .....	57
B. Relação com o Formalismo da Matriz $t$ .....	58
Referências .....	61
IV.   O ESTADO LIGADO NA APROXIMAÇÃO DE DEMBINSKI .....	62
Referências .....	69

**PARTE B: Antiferromagnetismo**

INTRODUÇÃO .....	71
Referências .....	74
V. A APROXIMAÇÃO DE DEMBINSKI E A CONDIÇÃO DE ESTADO LIGADO PARA O ANTIFERROMAGNETO DE SPIN MEIO .....	76
Referências .....	84
CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	86
Referências .....	88
APÊNDICES	
A. Cálculo das Equações (1.50) e (1.51) .....	90
B. Os Pólos da Função de Green no Caso de N Finito .....	92
C. Cálculo da Função P pelo Método Iterativo .....	96
D. Análise da Eq. (4.2) .....	100
E. A Função b pelo Método Iterativo .....	103
F. Aproximações de Campo Efetivo para o Ferromagneto de Heisenberg .....	106

## PLANO GERAL DO TRABALHO

Nosso objetivo com o presente trabalho é examinar algumas questões apresentadas pela técnica de funções de Green ao se tratar, na aproximação de Dembinski, o problema do modelo de Heisenberg para o magnetismo localizado de spin  $1/2$ : certas questões, embora inerentes à aproximação, refletem o efeito da álgebra dos operadores de spin na dinâmica e termodinâmica do modelo.

Para facilitar a apresentação do trabalho, dividimo-lo em duas partes. A parte A, onde tratamos o caso do ferromagnetismo, compreende um capítulo de introdução e os capítulos I-IV. No capítulo I apresentamos certos aspectos do problema de uma e duas partículas via funções de Green; nos capítulos subsequentes discutimos a aproximação de Dembinski.

A parte B destinada ao caso do antiferromagnetismo consta de um capítulo de introdução e do capítulo V referente à aproximação de Dembinski.

Em seqüência à parte B, fazemos alguns comentários à guisa de conclusão.

Informações suplementares ao texto foram colocadas nos apêndices.

## PARTE A

---

### *Ferromagnetismo*

## INTRODUÇÃO

O modelo de Heisenberg para o ferromagnetismo tem sido estudado extensivamente desde a sua proposição em 1928 (1).

O hamiltoniano de Heisenberg conserva a componente do spin total paralela ao campo magnético externo (2). Conseqüentemente, os estados do sistema formam subespaços que podem ser classificados de acordo com o número,  $n$ , de desvios em relação ao alinhamento de todos os spins na direção e sentido do campo. O subespaço  $n = 0$  contém um único estado. O subespaço  $n = 1$ , numa representação de momento, diagonaliza o hamiltoniano. Os estados nesta representação consistem de um desvio de spin que se propaga de modo coerente através do arranjo totalmente ordenado, e são chamados de ondas de spin. Este conceito foi criado por Bloch (3). Em sua teoria, Bloch supôs explicitamente uma baixa densidade de desvios de spin de forma que a interação entre duas ou mais ondas seria desprezível. Com esta hipótese ele pôde obter as propriedades termodinâmicas de um ferromagneto isolante concordes com a experiência a baixa temperatura. Conforme a temperatura aumenta, esta aproximação se torna menos satisfatória; pela presença de maior número de desvios, as interações entre as ondas começam a se tornar relevantes. O subespaço  $n = 2$  é o primeiro a exibir os efeitos das interações entre as ondas de spin.

O problema para uma cadeia linear com interação isotrópica entre primeiros vizinhos (para a qual não há ferromagnetismo) e spin  $1/2$  foi estudado por Bethe (4). Mostrou-se que, além das ondas elementares de Bloch, há excitações tais que um bloco de dois (ou mais) desvios viaja através da cadeia. Estados representando um bloco de dois desvios de spin possuem menor energia do que duas ondas livres (5). Este fato mostra que a hipótese de

baixa densidade de desvios não é suficiente para garantir a independência de duas ondas de spin; os estados de mais baixa energia não são necessariamente os livres. Assim, uma questão importante que se coloca é a de se saber se excitações de vetor de onda  $\underline{K}$  correspondentes a duas unidades de desvio de spin podem ser formadas com energia menor do que a soma das energias de duas ondas livres com vetor de onda total  $\underline{K}$ , pois se tais excitações existirem com pequeno  $\underline{K}$  ( e baixa energia), torna-se-á impróprio o uso do conceito de ondas de spin no cálculo das propriedades termodinâmicas de um ferromagneto de Heisenberg.

O quantum de energia de uma onda de spin é chamado de mágnon e como uma extensão de linguagem, a própria excitação é chamada de mágnon. Estados ligados de dois ou mais mágnons numa cadeia linear com anisotropia ou incluindo interações entre segundos vizinhos foram investigados para  $S$  arbitrário (5-10). Em três dimensões (redes cúbicas) Dyson (11) mostrou que para pequenos valores do vetor de onda total (rigorosamente, no ponto  $\Gamma$ ), duas ondas de spin não podem formar um estado ligado de baixa energia. Os cálculos independentes de Hanus (12) ( $S = 1/2$ ) e de Wortis (13,14) (spin arbitrário) estabeleceram pela primeira vez a existência de estados ligados de dois mágnons para um ferromagneto de Heisenberg com interações entre primeiros vizinhos e com rede cúbica simples. Hanus usou em seu cálculo um potencial fictício de esfera dura para impedir a ocorrência simultânea de dois desvios num mesmo ponto da rede. Por outro lado, Wortis tratou todos os casos de spin em igualdade de condições sem introduzir qualquer interação fictícia.

Estados ligados no ponto  $\Gamma$  e com energia abaixo do contínuo de duas ondas livres podem aparecer ao se considerar uma anisotropia conveniente (13). Logo, a presença da anisotropia (7,15, 16) pode produzir uma modificação radical no espectro de dois

magnons (17). Da mesma forma, a introdução de interações entre segundos vizinhos (18) revela que os estados ligados são sensíveis à interação de longo alcance; interação esta que força para o contínuo os estados ligados de Wortis. Os estados ligados de dois magnons também foram investigados para o ferromagneto de Heisenberg com rede cúbica de face centrada (19) e de corpo centrado (20).

Resolvendo a equação de Lippmann-Schwinger relativa ao problema de duas partículas, Boyd e Callaway (21) apontaram a existência de estados de espalhamento ressonantes além dos estados ligados. A importância de ressonâncias foi enfatizada por Silberglitt e Harris (22). Eles discutiram, no limite de pequeno comprimento de onda (apropriado à região de baixa temperatura), a influência, via matriz  $t$ , dos estados ligados e dos estados ressonantes de duas ondas de spin sobre o espectro de um magnon, sugerindo a possibilidade de observação indireta dos estados ligados através de seu efeito sobre a largura e energia de um magnon a uma temperatura não nula (23).

O problema de três desvios de spin foi atacado por Majumdar (24) como uma aplicação do método de Faddeev. O problema de três magnons em três dimensões foi apenas tocado, porquanto as equações integrais revelaram-se intratáveis analiticamente, não permitindo que se extraíssem os autovalores. Mais recentemente, Van Himbergen e Tjon (25) obtiveram, pelo mesmo método, estados ligados de três magnons no caso bidimensional.

Além da chamada interação dinâmica (11) entre magnons, aparece uma outra interação entre as ondas pelo fato de não poderem ocorrer num mesmo ponto da rede mais do que 2S desvios de spin. Esta interação foi chamada por Dyson de interação cinemática (11). Este fato introduz alguma dificuldade no cálculo das propriedades termodinâmicas a baixa temperatura do modelo de

Heisenberg.

Dyson (11) estudou o problema de duas ondas de spin e calculou as correções à lei de  $T^{3/2}$  para a magnetização espontânea obtida pela teoria de Bloch. O cálculo simples de Bloch considera as ondas de spin como partículas de Bose não interagentes e com uma curva de dispersão parabólica (11). O desvio do espectro em relação a esta lei quadrática implica correções de  $O(T^{5/2})$  e  $O(T^{7/2})$  para a magnetização; enquanto que as interações dinâmicas concorrem com um termo de  $O(T^4)$ . A correção devida às interações cinemáticas é exponencialmente desprezível na termodinâmica a baixa temperatura do sistema (11).

É oportuno mencionar as conclusões obtidas por Lalovic et al. (26) ao tratarem o problema do spin 1/2 usando a representação exata de bósons (27). A representação dos operadores de spin proposta por Dyson (11) seria adequada à análise das propriedades termodinâmicas, contudo, seria inadequada para tratar outras propriedades (28); embora o hamiltoniano ideal de Dyson dê as energias corretas dos estados ligados, o mesmo não acontece com as funções de onda, implicando resultados incorretos para a probabilidade de transição entre mágnons livres e estados ligados.

Wortis também estudou cuidadosamente o comportamento do hamiltoniano de Heisenberg a baixa temperatura, formulando a mecânica de desvios de spin de modo a manter a sua verdadeira cinemática (29). De seus resultados, pôde concluir, como o fez Dyson (11), que para pequeno número de desvios, os cálculos com spins e bósons são essencialmente equivalentes no que concerne à termodinâmica de baixa temperatura. Seu tratamento segue o de Dyson (11) sob vários aspectos, mas, embora tenha chegado aos mesmos resultados termodinâmicos (por exemplo, para a expansão a baixa temperatura para a energia livre), Wortis criticou o tratamento de Dyson considerando-o

passível de inconsistência interna (29).

O efeito das interações entre  $n$  ( $n \geq 2$ ) ondas de spin sobre a magnetização a baixa temperatura foi investigado por Morita e Tanaka (30). Com a hipótese de não existir estados ligados de baixa energia (31) e usando uma expansão de virial para um conjunto de quase-partículas (32), concluíram que a contribuição do efeito das interações-entre  $n$  ondas de spin à magnetização é de  $O(T^{5n/2-1})$ .

Compreende-se, portanto, que o modelo de Heisenberg apresenta dois problemas formidáveis. O primeiro é entender os aspectos essenciais da mecânica de spin; o segundo é entender, física e formalmente, o modo pelo qual os aspectos desta mecânica se manifestam na termodinâmica.

Os trabalhos arrolados acima mostram que a maioria dos esforços desenvolvidos restringe-se à solução do problema de duas partículas, e toda a análise exata da estrutura do espectro de dois mágnons (12-14) é proveitosa apenas na região de baixa temperatura. Da mesma forma, os modelos "equivalentes" para o sistema de spins em termos de bósons (11,33,34), utilizados na análise do modelo de Heisenberg através de métodos de perturbação (11,35,36), são úteis a baixa temperatura (37).

Por outro lado, os tratamentos propostos para altas temperaturas (no entorno da temperatura de transição ou mais acima) (38,39,40) não são apropriados à região de validade das teorias de ondas de spin. Vejam-se, por exemplo, os sucessos e as deficiências das aproximações de campo efetivo (38). Estes tratamentos são válidos a altas temperaturas, onde, em princípio, se justificam. Em essência, as aproximações de campo efetivo, desde as mais simples até as mais refinadas, consideram as entidades constituintes do sistema (ou grupos destas unidades) como quase independen-

tes; por conseguinte, não têm o mesmo sucesso que as teorias de desvios de spin, para temperaturas próximas de zero [apêndice F].

Entretanto, a técnica das funções de Green da teoria de muitos corpos (41,42) tem sido empregada no estudo do magnetismo localizado a uma temperatura arbitrária (43). Nos métodos baseados nesta técnica, tem-se usado tanto os operadores de spin (44-48), quanto suas representações em termos de operadores de Bose (49). Em ambos os casos, todavia, é necessário que se proponha um esquema de desacoplamento a fim de se resolver aproximadamente uma cadeia infinita de equações de movimento das funções de Green.

Muitos destes esquemas recorrem a uma linearização da equação de movimento da função de ordem mais baixa (44-48). Isto se faz devido à complexidade matemática que sobrevém ao se deixar o desacoplamento para um estágio posterior (50). Estas aproximações conhecidas como de primeira ordem têm encontrado muitas aplicações, entre elas, no estudo de transição de fase (51) e de espalhamento de luz em materiais magnéticos isolantes (52).

Bogoliubov e Tyablikov (53), empregando operadores de spin, propuseram, para o caso do ferromagnetismo de spin 1/2, uma aproximação de primeira ordem conhecida como RPA (54). Tahir-Kheli e ter Haar (44) estenderam-na para spin qualquer, e mais tarde Callen (45) desenvolveu uma outra aproximação de primeira ordem capaz de dar bons resultados para  $S \geq 1$ .

O desacoplamento RPA dá um termo espúrio em  $T^3$  para a magnetização a baixa temperatura. Também as energias renormalizadas dos mágnons a baixa temperatura são insatisfatórias neste esquema (44,55). No entanto, seus resultados para o valor da temperatura de transição,  $T_c$ , e para a susceptibilidade a campo nulo (pa-

ra  $T \gg T_c$ ) são bons, comparados com aqueles de teorias mais precisas (42,44). Todas estas conclusões são independentes de S.

No caso de Callen, para  $S=1/2$ , embora a renormalização das energias das quase-partículas seja boa, (45,55) o resultado para a magnetização a baixa temperatura é desastroso: não aparece nenhum termo em  $T^4$  e persiste um termo espúrio em  $T^3$ . Os resultados a alta temperatura também não são satisfatórios (45,48), embora o valor de  $T_c$  tenha sido melhorado ao se modificar o parâmetro usado na teoria (56).

A aproximação de primeira ordem proposta por Dembinski (46) para o caso especial de  $S = 1/2$  removeu as dificuldades mais sérias enfrentadas pelo esquema de Callen. Hewson e ter Haar (57) já haviam atribuído estas dificuldades a uma violação da cinemática de spin decorrente da natureza das aproximações. Dembinski, levando em conta este fato, logrou calcular a magnetização (a baixa temperatura) livre de um termo espúrio em  $T^3$  e com um termo em  $T^4$  próximo do de Dyson (11). Sua teoria prevê uma temperatura de transição coincidente com a da aproximação RPA e uma suscetibilidade a campo nulo melhorada (58).

Mais recentemente, Coutinho e Fittipaldi (48) propuseram uma modificação do esquema de Dembinski, com o objetivo de melhor respeitar a cinemática de spin. Este novo esquema foi proposto de forma a levar em conta a função de correlação  $\langle (S^-(\ell))^2 S^+(\ell) S^+(m) \rangle$  corretamente até  $O(T^3)$ , - o que não se consegue na aproximação de Dembinski (59). Os resultados a alta temperatura foram melhorados, mas um termo espúrio em  $T^3$  torna a aparecer na expansão a baixa temperatura para a magnetização espontânea (60).

Cabe aqui observarmos que, embora na proposição destes esquemas empreguem-se argumentos de plausibilidade física, a natureza particular do problema não deixa claro como cada aproxima-

ção realmente trata a mecânica do modelo. Este defeito reflete-se, como se viu acima, na incapacidade de uma dada aproximação em dar resultados igualmente satisfatórios para as quantidades em análise a baixa temperatura. Por conseguinte, as aproximações foram propostas e refinadas tendo-se em mente apenas a obtenção de certas quantidades de interesse numa dada região de temperatura<sup>(61)</sup>.

Não se pode, portanto, exercer um controle efetivo sobre estas aproximações, todavia, reconhece-se que o modelo de Heisenberg apresenta dois aspectos opostos a serem conciliados em qualquer formalismo<sup>(29)</sup>, a saber, a obediência à cinemática local dada pela álgebra de spin e o caráter coletivo dos estados de energia mais baixa. À luz destas considerações, Ramos e Gomes<sup>(59)</sup> e depois Coutinho e Fittipaldi<sup>(48)</sup> examinaram o problema de como as aproximações RPA, de Callen e de Dembinski, para  $S = 1/2$ , satisfazem a condição de (a) não violar a cinemática de spin e a de (b) preservar uma boa renormalização das energias dos mágnons. O exame da condição (a) foi feito através do resultado a baixa temperatura para a função de correlação  $\langle (S^-(\ell))^2 S^+(\ell) S^+(m) \rangle$ . Para a condição (b) lançou-se mão da teoria de ondas de spin<sup>(49,55)</sup> que indica, a baixa temperatura, uma renormalização da energia de todos os modos proporcional à energia termodinâmica (com o primeiro termo dependente da temperatura aparecendo em  $T^{5/2}$ ).

No que se refere à magnetização a baixa temperatura, o trabalho de Dembinski<sup>(46)</sup> parece tratar satisfatoriamente as condições (a) e (b). Já a aproximação de Dembinski modificada<sup>(48)</sup> reforça a condição (a). Uma indicação disto são os seus bons resultados a alta temperatura, quando então a cinemática de spin revela seu caráter importante distinguindo as excitações de spin dos bósons.

Deve-se notar, entretanto, que nas duas aproximações do

tipo de Dembinski (46,48) as energias das quase-partículas não foram calculadas explicitamente. A solução da função de Green foi obtida, nestas aproximações, através de um processo iterativo, sendo considerados apenas os pólos da solução de ordem zero. Estes pólos têm a mesma forma daqueles obtidos na aproximação de Callen (45,46,48). No entanto, a função de Green possui, nestes dois esquemas, uma solução formal exata, e o propósito do presente trabalho é investigar os seus pólos no limite termodinâmico, para as três redes cúbicas.

Como é bem estabelecido experimentalmente, o conceito de excitações do tipo mágnon mantém-se além da região de baixa temperatura; mais ainda, a dependência da energia das mesmas, com relação à temperatura, é sensível ao seu comprimento de onda (62-64). Embora os mágnons de grande comprimento de onda desapareçam em  $T_c$ , pois sua energia depende da temperatura como a magnetização, mágnons paramagnéticos podem ser definidos para uma grande parte da zona de Brillouin, notadamente para sistemas de baixa dimensionalidade (64-66).

Vamos examinar, portanto, as conseqüências dos dois esquemas do tipo de Dembinski (46,48) em termos do espectro que eles prevêem perto de zero e pouco abaixo de  $T_c$ .

REFERÊNCIAS

1. A teoria para o ferromagnetismo proposta por Heisenberg [W. Heisenberg, Z. Phys. 49, 619 (1928)] explicou os altos campos moleculares de Weiss através de forças de intercâmbio, cabendo a Dirac [P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London) A123, 714 (1929)] dar pela primeira vez a forma do hamiltoniano usualmente designado como hamiltoniano de Heisenberg — ver J.H. Van Vleck, Rev. Mod. Phys. 17, 27 (1945).
2. A consideração de um campo magnético externo é desejável não só para o cálculo da susceptibilidade magnética, mas também para o cálculo de quase-médias no modelo isotrópico. Ver N. N. Bogoliubov, "Lectures on Quantum Statistics", ed. por L. Klein e S. Glass, Gordon and Breach, N. York, 1970, vol.2, p. 6.
3. F. Bloch, Z. Phys. 61, 206 (1930) — citado na ref. 11.
4. H. Bethe, Z. Phys. 71, 205 (1931) — citado na ref. 11.
5. J.B. Torrance, Jr. and M. Tinkham, J. Appl. Phys. 39, 822 (1968); Phys. Rev. 187, 587 e 595 (1969).
6. C.K. Majumdar, J. Math. Phys. 10, 177 (1969).
7. T. Tonegawa, Prog. Theor. Phys., Supp. nº 46, 61 (1970).
8. I. Ono, S. Mikado and T. Ôguchi, J. Phys. Soc. Japan 30, 358 (1971).
9. T. Ôguchi, J. Phys. Soc. Japan 31, 394 (1971).
10. I.G. Gochev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 61, 1674 (1971) [trad: Soviet Phys. JETP 34, 892 (1972)].
11. F.J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 e 1230 (1956).
12. J. Hanus, Phys. Rev. Lett. 11, 336 (1963).

13. M. Wortis, Phys. Rev. 132, 85 (1963).
14. N. Fukuda and M. Wortis, J. Phys. Chem. Solids 24, 1675 (1963).
15. R. Silbergliitt and J.B. Torrance, Jr., Phys. Rev. B2, 772 (1970).
16. D.A. Pink and P. Tremblay, Can. J. Phys. 50, 1728 (1972).
17. A anisotropia é importante na estabilidade termodinâmica do ferromagneto [ref. 2, p. 8 e ref. 42, p. 94] e mesmo na fase paramagnética ela desempenha um papel relevante [ver, por exemplo, a ref. 64]. Uma outra questão envolvendo anisotropia do ferromagneto de Heisenberg pode ser encontrada em M. A. Tenan and J.G. Ramos, Lett. Nuovo Cim. 9, 266 (1974) e A. Hengeltraub, M.A. Tenan, J.G. Ramos and A.C.S. Algarte, Lett. Nuovo Cimento 12, 687 (1975).
18. D.K. Ghosh and G. Mukhopadhyay, J. Phys. C 3, 323 (1970).
19. M.F. Thorpe, Phys. Rev. B 4, 1608 (1971). Há um erro algébrico nesta referência ao se ir da eq. (3.6) à eq. (3.7); isto implicou o resultado falso da existência de um estado ligado no ponto  $\Gamma$ . Ver A.M. Bonnot and J. Hanus, Phys. Rev. B 7, 2207 (1973).
20. A.W. Saenz and W.W. Zachary, J. Math. Phys. 14, 1837 (1973).
21. R.G. Boyd and J. Callaway, Phys. Rev. 138, A1621 (1965).
22. R. Silbergliitt and A.B. Harris, Phys. Rev. Lett. 19, 30 (1967); Phys. Rev. 174, 640 (1968).
23. Uma outra sugestão para observações indiretas de estados ligados e ressonâncias refere-se à sua influência sobre a auto-energia de um fônon a baixa temperatura. Ver R. Silbergliitt, J. Appl. Phys. 40, 1114 (1969).
24. C.K. Majumdar, Phys. Rev. B 1, 287 (1970).

25. J.E. Van Himbergen and J.A. Tjon, Phys. Lett. 50A, 189 (1974). Encontraram-se estados ligados na direção (1,1) para vetores de onda suficientemente grandes. O modelo usado foi um ferromagneto com rede cúbica simples ( $S = 1/2$ ) e interações entre primeiros vizinhos. O ponto de partida foi o hamiltoniano de Dyson da ref. (11).
26. D.I. Lašovic, B.S. Tosic, J.B. Vujaklija and R.B. Zakula, Nuovo Cim. 68B, 75 (1970).
27. D.I. Lašovic, B.S. Tosic and R.B. Zakula, Phys. St. Sol. 28, 635 (1968).
28. Ver também J.G. Ramos, J. Phys. C 6, L 449 (1973).
29. M. Wortis, Phys. Rev. 138, A1126 (1965).
30. T. Morita and T. Tanaka, J. Math. Phys. 6, 1152 (1965).
31. O comentário (viii), sec. 6 da ref. (29), dá argumentos sobre esta conjetura.
32. T. Morita and T. Tanaka, Phys. Rev. 138, A1088 (1965).
33. T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
34. S.V. Maleev, JETP (USSR) 33, 1010 (1957) [trad.: Soviet Phys. JETP 6, 776 (1958)]. Ver o apêndice deste artigo.
35. T. Oguchi, Phys. Rev. 117, 117 (1960).
36. T. Morita, Prog. Theor. Phys. 20, 614 e 728 (1958).
37. Embora haja tentativas de uso de operadores de bósons para todo o intervalo de temperatura entre zero e a temperatura de transição. Ver M. Bloch, Phys. Rev. Lett. 9, 286 (1962); J. Appl. Phys. 34, 1151 (1963).
38. P. Weiss, J. Phys. Radium 4, 661 (1907) — citado em J.S. Smart, "Effective Field Theories of Magnetism", W.B. Saunders,

Philadelphia, 1966; P.R. Weiss, Phys. Rev. 74, 1493 (1948); T. Oguchi, Prog. Theor. Phys. 13, 148 (1955); P.W. Kasteleijn and J. Van Kranendonk, Physica 22, 317 (1956).

39. W. Opechowski, Physica 4, 181 (1937); 6, 1112 (1939); V. Zehler, Z. Naturforsch. 50, 344 (1950); H.A. Brown and J.M. Luttinger, Phys. Rev. 100, 685 (1955); G.S. Rushbrooke and P.J. Wood, Mol. Phys. 1, 257 (1958); G.A. Baker, Jr., H.E. Gilbert, J. Eve and G.S. Rushbrooke, Phys. Rev. 164, 800 (1967).
40. B. Strieb, H.B. Callen and G. Horwitz, Phys. Rev. 130, 1798 (1963).
41. D.N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk 71, 71 (1960) [trad.: Soviet Phys. - Uspekhi 3, 320 (1960)].
42. S.V. Tyablikov, "Methods in the Quantum Theory of Magnetism", Plenum Press, New York, 1967, caps. VII e VIII.
43. Esta técnica tem oferecido, por exemplo, tanto uma expansão a baixa temperatura para a magnetização espontânea quanto uma a alta temperatura para a susceptibilidade a campo nulo [ver as refs. 46, 48 e 58]. Resultados numéricos, digamos, para a magnetização a qualquer temperatura na fase ferromagnética podem ser encontrados no primeiro artigo da ref. 56.
44. R.A. Tahir-Kheli and D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 88 (1962).
45. H.B. Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963).
46. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1021 (1968) [Nos capítulos seguintes será referida como Aproximação I].
47. F. Leoni and C. Natoli, Phys. Rev. B 4, 2243 (1971).
48. M.D. Coutinho Filho and I.P. Fittipaldi, Phys. Rev. B 7, 4941 (1973). [Nos capítulos seguintes será referida como Aproximação II].
49. R.A. Tahir - Kheli and D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 95 (1962).

50. T. Morita and T. Tanaka, Phys. Rev. 137, A648 (1965); Phys. Rev. 138, A1395 (1965); J.F. Cooke and H.A. Gersch, Phys. Rev. 153, 641 (1967); W. Marshall and G. Murray, J. Phys. C 2, 539 (1969).
51. F.B. Anderson and H.B. Callen, Phys. Rev. 136, A 1068 (1964)
52. R. Loudon, J. Phys. C 3, 872 (1970).
53. N.N. Bogolyubov and S.V. Tyablikov, Doklady Akad. Nauk SSSR 126, 53 (1959) [trad.: Soviet Phys. — Doklady 4, 589 (1959)]; S.V. Tyablikov, Ukr. Mat. Zhur. 11, 287 (1959) [citado na ref. 42].
54. A aproximação RPA proposta por Englert [F. Englert, Phys. Rev. Lett. 5, 102 (1960)] dá os mesmos resultados que a de Bogoliubov - Tyablikov.
55. F. Keffer and R. Loudon, Suppl. J. Appl. Phys. 32, 2S (1961).
56. J.A. Copeland and H.A. Gersch, Phys. Rev. 143, 236 (1966); R.H. Swendsen, Phys. Rev. B 5, 116 (1972).
57. A.C. Hewson and D. ter Haar, Phys. Lett. 6, 136 (1963).
58. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1502 (1968).
59. J.G. Ramos and A.A. Gomes, Can. J. Phys. 49, 932 (1971).
60. Também o termo em  $T^4$  para a magnetização é menos satisfatório. Ver a tab. II da ref. 48.
61. I.P. Fittipaldi and M.D. Coutinho Filho, Phys. Rev. B10, 4808 (1974). Os resultados contidos nesse trabalho são muito ilustrativos: com um desacoplamento do tipo de Callen (ref. 45) obtêm-se a magnetização a baixa temperatura livre de um termo espúrio em  $T^3$ , bem como bons resultados a alta temperatura. Todavia, há dificuldades com a renormalização da energia das quase-partículas.

62. P. Martel, R.A. Cowley and R.W.H. Stevenson, J. Appl. Phys. 39, 1116 (1968).
63. P.A. Fleury; Phys. Rev. 180, 591 (1969); P.A. Fleury and H. J. Guggenheim, Phys. Rev. Lett. 24, 1346 (1970); D.J. Toms, W.J. O'Sullivan and H.J. Guggenheim, Solid State Comm. 14, 715 (1974).
64. J. Skalyo, Jr., G. Shirane, R.J. Birgeneau and H.J. Guggenheim, Phys. Rev. Lett. 23, 1394 (1969).
65. S. Funahashi, F. Moussa and M. Steiner, Sol. St. Comm. 18, 433 (1976).
66. M.E. Lines, Phys. Rev. B3, 1749 (1971).

# CAPÍTULO I

## O PROBLEMA DA CINEMÁTICA DE SPIN NO

### MODELO DE HEISENBERG PARA O

#### FERROMAGNETISMO

##### A. Proposição do Modelo.

Consideremos uma rede cúbica (simples, de face centrada ou de corpo centrado) com um número finito,  $N = n^3$ , de pontos. Podemos incluir aqui também o caso da cadeia linear ou da rede quadrada. É conveniente supor-se que a rede tenha conexida de periódica, isto é, que o ponto  $\underline{R}(\ell) + n \underline{R}(m)$  seja idêntico ao ponto  $\underline{R}(\ell)$  para todos os vetores da rede  $\underline{R}(\ell)$  e  $\underline{R}(m)$ . Não há portanto efeito de borda e todos os pontos são perfeitamente equivalentes. Associemos a cada ponto da rede um spin  $\underline{S}(\ell)$  de número quântico  $S$ . Os operadores de spin (em unidades tais que  $\hbar = 1$ ) obedecem às seguintes relações de comutação:

$$[S^z(\ell), S^\pm(m)] = \pm S^\pm(m) \delta_{\ell m} \quad (1.1.a)$$

$$[S^+(\ell), S^-(m)] = 2S^z(\ell) \delta_{\ell m} \quad (1.1.b)$$

$$[S^\pm(\ell), S^\pm(m)] = 0 \quad (1.1.c)$$

onde

$$S^\pm(\ell) = S^x(\ell) \pm i S^y(\ell)$$

Além disso, satisfazem também a condição (decorrente das anteriores).

$$(S^+(\ell))^{2S+1} = (S^-(\ell))^{2S+1} = 0 \quad (1.1.d)$$

Esta condição reflete o fato de a componente  $z$  do operador de spin ser no máximo igual a  $S$ .

O espaço de estados do modelo de Heisenberg é dado pelo produto direto dos espaços de spin definidos em cada ponto da rede.

A dinâmica do sistema é determinada pelo hamiltoniano:

$$H = - \sum_{\ell, m} \{J(\ell, m) S^z(\ell) S^z(m) + I(\ell, m) (S^x(\ell) S^x(m) + S^y(\ell) S^y(m))\} - \mu h \sum_{\ell} S^z(\ell) . \quad (1.2)$$

O primeiro termo representa a interação de intercâmbio (considerada de modo genérico anisotrópica) entre pares de spins, na aproximação de primeiros vizinhos, isto é, considera-se

$$\begin{aligned} J(\ell, m) = J(m, \ell) = J > 0 \text{ se } \ell \text{ é primeiro vizinho de } m, \\ = 0 \text{ caso contrário.} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Uma definição análoga à eq. (1.3) é válida para  $I(\ell, m)$ . O segundo termo representa a interação de Zeeman de cada spin com um campo magnético externo, estático e uniforme  $h$ . A direção e o sentido do campo  $h$  definem o eixo  $+z$ . A letra  $\mu$  indica o produto do fator espectroscópico pelo magnéton de Bohr.

O hamiltoniano de Heisenberg corresponde a se fazer  $J = I$  na eq. (1.2). A nossa adoção de uma forma anisotrópica se justifica pelo fato de o hamiltoniano isotrópico não ser essencial à discussão feita neste capítulo; mais ainda, torna-se ilustrativo o emprego do hamiltoniano dado pela eq. (1.2), porquanto podemos identificar facilmente, em cada passo, as contribuições dos termos de intercâmbio transversal e longitudinal. Embora não pretendamos levantar a questão da aplicabilidade da forma (1.2) a um caso concreto de interesse experimental, observemos que estudos experimentais e teóricos mostram que em certos materiais magnéticos com alta anisotropia, a energia de acoplamento entre spins localizados pode ser aproximada por uma forma de Ising pura<sup>(1)</sup> ( $I = 0$  na eq. (1.2)); mas para outros sistemas, a anisotropia, embora importante, não é muito grande, neste caso, um acoplamento de Heisenberg puro é mais realista<sup>(2)</sup>.

Pode-se verificar facilmente que a componente  $z$  do spin total comuta com o hamiltoniano da eq. (1.2). O estado fundamental que será denotado por  $|0\rangle$  (normalizado) corresponde ao ordenamento completo dos spins no sentido  $+z$ . Sua energia é dada por

$$E(0) = -zNJS^2 - \mu h NS \quad (1.4)$$

(onde  $z$  é o número de coordenação), pois

$$S^z(\ell) |0\rangle = S |0\rangle \quad (1.5)$$

e

$$S^+(\ell) |0\rangle = 0$$

Os estados dos subespaços de um, dois, ... desvios de spin são gerados pela aplicação dos operadores  $S^-(\ell)$  sobre  $|0\rangle$ .

### B. Análise do Problema de Uma e Duas Partículas pela Técnica de Funções de Green

Sejam as funções de Green (à temperatura zero) de u ma e duas partículas (3,4).

$$\begin{aligned} G(m, m', t) &\equiv \langle\langle S^+(m; t) | S^-(m'; 0) \rangle\rangle = \\ &= -i\theta(t) \langle 0 | [S^+(m; t), S^-(m'; 0)] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (1.6)$$

e

$$\begin{aligned} G(m, n, m', n', t) &\equiv \langle\langle S^+(m; t) S^+(n; t) | S^-(m'; 0) S^-(n'; 0) \rangle\rangle \\ &= i\theta(t) \langle 0 | [S^+(m; t) S^+(n; t), S^-(m'; 0) S^-(n'; 0)] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (1.7)$$

onde  $\theta(t)$  é a função degrau definida por

$$\begin{aligned} \theta(t) &= 1 \quad \text{se } t > 0, \\ &= 0 \quad \text{se } t < 0 \end{aligned} \quad (1.8)$$

e

$$\underline{S}(\lambda; t) = \exp(i H t) \underline{S}(\lambda; 0) \exp(-i H t) \quad (1.9)$$

é o operador de spin na "representação" de Heisenberg. No que se segue, o argumento temporal dos operadores poderá ser omitido. O aparecimento da função  $\theta(t)$  nas definições (1.6) e (1.7) implica a condição de contorno

$$G(\dots, t) = 0 \quad \text{para } t < 0. \quad (1.10)$$

Estas funções trazem consigo informações úteis sobre a dinâmica do sistema<sup>(3)</sup>. Como ilustração, pode-se verificar que a transformada de Fourier de  $G(\dots, t)$ , definida por

$$G(\dots, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\dots, \omega) \exp(-i \omega t) d\omega, \quad (1.11)$$

relaciona-se formalmente com os elementos de matriz e as energias de excitação do sistema, conforme a expressão<sup>(3)</sup>:

$$\begin{aligned} G(m, \dots, m', \dots, \omega) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (1/2\pi) \sum_Y \langle 0 | S^+(m; 0) \dots | Y \rangle \langle Y | S^-(m'; 0) \dots | 0 \rangle \times \\ &\times \{\omega - (E(Y) - E(0)) + i\epsilon\}^{-1}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

onde  $\gamma$  percorre um conjunto ortonormal completo de auto-estados de  $H$ . O infinitésimo  $i\epsilon$  no denominador reflete o efeito do princípio de causalidade contido na condição de contorno (1.10).

Calcularemos a seguir as funções de Green (1.6) e (1.7), lançando mão de sua equação de movimento, da condição de contorno (1.10) e da periodicidade espacial.

A transformada de Fourier das funções de Green obedece à seguinte equação do movimento<sup>(4)</sup>

$$\begin{aligned} \omega G(m \dots, m' \dots, \omega) = (1/2\pi) \langle 0 | [ S^+(m;0) \dots, S^-(m';0) \dots ] | 0 \rangle \\ + \langle\langle [ S^+(m) \dots, H ] | S^-(m') \dots; \omega \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

No caso da função de Green de uma partícula, o desenvolvimento do comutador que aparece na segunda parcela do segundo membro da eq. (1.13) resulta em

$$\begin{aligned} [S^+(m), H] = \mu h S^+(m) + 2 \sum_{\ell} \{ J(\ell, m) S^Z(\ell) S^+(m) - \\ - I(\ell, m) S^Z(m) S^+(\ell) \}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Note-se que os operadores no segundo membro estão ordenados de tal forma que, graças à eq. (1.5), a eq. (1.13) fornece imediatamente um sistema de equações fechado, a saber,

$$\begin{aligned} \omega G(m, m', \omega) = (S/\pi) \delta_{mm'} + \mu h G(m, m', \omega) + \\ + 2S \sum_{\ell} \{ J(\ell, m) G(m, m', \omega) - I(\ell, m) G(\ell, m', \omega) \}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

A equação acima pode ser resolvida por uma transformação de Fourier. Para tal fim, definamos:

$$G(\underline{k}, m', \omega) = (1/\sqrt{N}) \sum_m G(m, m', \omega) \exp(-i\underline{k} \cdot \underline{R}(m)). \quad (1.16)$$

De (1.11), (1.15) e (1.16) resulta a solução:

$$G(m, m', t) = (2S/N) \sum_{\underline{k}} \exp\{-i\underline{k} \cdot (\underline{R}(m') - \underline{R}(m))\} \times \int_{-\infty}^{+\infty} (d\omega/2\pi) \exp(-i\omega t) (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k}) + i\varepsilon)^{-1} \quad (1.17)$$

onde

$$\Omega(\underline{k}) = 2S (J(0) - I(\underline{k})). \quad (1.18)$$

$J(\underline{k})$  é definido através de

$$J(\underline{\ell}, m) = (1/N) \sum_{\underline{k}} J(\underline{k}) \exp\{-i\underline{k} \cdot (\underline{R}(\underline{\ell}) - \underline{R}(m))\} \quad (1.19)$$

(definição análoga para  $I(\underline{k})$ ), uma vez que há equivalência entre os pontos da rede.

Como seria de se esperar, a função de Green na eq. (1.17) depende apenas da diferença  $\underline{R}(m') - \underline{R}(m)$ . Mais importante ainda é notar-se que  $G(m, m', t)$  tem a forma de (1.12). O espectro (1.18) generaliza o resultado de Bloch das ondas de spin livres<sup>(3)</sup>

No caso da função de Green de duas partículas, o comutador que envolve  $H$  em (1.13) pode ser desenvolvido rapidamente com

a. ajuda da eq. (1.14) pois

$$\begin{aligned}
 [S^+(m)S^+(n), H] &= [S^+(m), H]S^+(n) + [S^+(n), H]S^+(m) + \\
 &+ [S^+(m), [S^+(n), H]] .
 \end{aligned}
 \tag{1.20}$$

O segundo membro da eq. (1.20) foi arranjado de modo a apresentar, quando desenvolvidos os comutadores, a ordem prescrita anteriormente para os operadores de spin. Feitas as substituições dos comutadores pelos seus desenvolvimentos, tem-se para a equação (1.13):

$$\begin{aligned}
 (\omega - 2\mu h)G(mn, m'n', \omega) - 2S \sum_{\ell} \{ J(\ell, m)G(mn, m'n', \omega) - I(\ell, m)G(\ell n, m'n', \omega) \} \\
 - 2S \sum_{\ell} \{ J(\ell, n)G(mn, m'n', \omega) - I(\ell, n)G(m\ell, m'n', \omega) \} \\
 + 2J(m, n)G(mn, m'n', \omega) - 2\delta_{mn} \sum_{\ell} I(\ell, n)G(m\ell, m'n', \omega) \\
 = A(m, n, m', n') ,
 \end{aligned}
 \tag{1.21}$$

para a qual se definiu:

$$A(m, n, m', n') = (2S)^2 (2\pi)^{-1} (1 - (2S)^{-1} \delta_{mn}) (\delta_{mm'} \delta_{nn'} + \delta_{mn} \delta_{n'm'}) . \tag{1.22}$$

Os dois últimos termos do primeiro membro da equação (1.21) constituem o resultado do comutador  $[S^+(m), [S^+(n), H]]$ . Eles se referem explicitamente a ambas as posições  $m$  e  $n$  e podem ser considerados, como se verá a seguir, os responsáveis pela interação entre partículas cujo movimento livre é descrito pelos três termos anteriores <sup>(3)</sup>. Por meio desta analogia, compreende-se claramente a relevância da cinemática de spin (representada pelas relações de comutação dos operadores) no aparecimento da interação entre as partículas. Os estados ligados que podem surgir desta interação estão, por conseguinte, fortemente relacionados com a cinemática local.

Também para a eq. (1.21), recorre-se a uma transformação de Fourier para se encontrar a sua solução.

Com a ajuda das definições

$$G(\underline{k}, \underline{q}; m', n', \omega) = (1/N) \sum_{m, n} G(mn, m'n', \omega) \times \exp\{-i\underline{k} \cdot \underline{R}(m) - i\underline{q} \cdot \underline{R}(n)\} \quad (1.23)$$

e

$$A(\underline{k}, \underline{q}, m', n') = (1/N) \sum_{m, n} A(m, n, m', n') \exp\{-i\underline{k} \cdot \underline{R}(m) - i\underline{q} \cdot \underline{R}(n)\} \quad (1.24)$$

pode-se obter a eq. (1.21) escrita numa forma que ratifica a interpretação dada acima:

$$\{\omega - 2\mu h - \Omega(\underline{k}) - \Omega(\underline{q})\} G(\underline{k}, \underline{q}; \dots, \omega) +$$

$$-(1/N) \sum_p \{I(p) + I(\underline{k} + \underline{q} - \underline{p}) - J(\underline{k} - \underline{p}) - J(\underline{q} - \underline{p})\} G(\underline{p}, \underline{k} + \underline{q} - \underline{p}; \dots, \omega) =$$

$$= A(\underline{k}, \underline{q}, \dots). \quad (1.25)$$

Por economia de notação, omitiram-se os argumentos  $m'$  e  $n'$  em  $G$  e  $A$ . Com uma mudança de variáveis,

$$\underline{k} + \underline{q} = \underline{K}, \quad \underline{k} - \underline{q} = 2\underline{Q}, \quad \underline{p} = \underline{K}/2 + \underline{P}, \quad (1.26)$$

rearranja-se a eq. (1.25) de modo a se obter:

$$\begin{aligned} & \{\omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{Q}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{Q})\} G(\underline{K}/2 + \underline{Q}, \underline{K}/2 - \underline{Q}; \dots, \omega) = \\ & = A(\underline{K}/2 + \underline{Q}, \underline{K}/2 - \underline{Q}, \dots) + \\ & + (1/N) \int_{\underline{P}} \{I(\underline{K}/2 + \underline{P}) + I(\underline{K}/2 - \underline{P}) - J(\underline{Q} + \underline{P}) - J(\underline{Q} - \underline{P})\} G(\underline{K}/2 + \underline{P}, \underline{K}/2 - \underline{P}; \dots, \omega) \end{aligned} \quad (1.27)$$

Na dedução de (1.25) e (1.27) usou-se a propriedade:

$$J(\underline{k}) = J(-\underline{k}) \quad (1.28)$$

As definições (1.3), (1.19) e

$$\begin{aligned} \phi(\underline{K}, \underline{Q}, m', n', \omega) \equiv & \{\omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{Q}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{Q})\} \times \\ & \times G(\underline{K}/2 + \underline{Q}, \underline{K}/2 - \underline{Q}; m', n', \omega), \end{aligned} \quad (1.29)$$

transformam a eq. (1.27) numa equação integral de Fredholm de segunda espécie com núcleo degenerado <sup>(5)</sup>:

$$\begin{aligned} \phi(\underline{K}, \underline{Q}, \dots, \omega) &= A(\underline{K}/2 + \underline{Q}, \underline{K}/2 - \underline{Q}, \dots) + \\ &+ \sum_{i=1}^{z/2} \{I \cos(\underline{K} \cdot \underline{\delta}_i / 2) - J \cos \underline{Q} \cdot \underline{\delta}_i\} (4/N) \sum_{\underline{P}} \cos \underline{P} \cdot \underline{\delta}_i \times \\ &\times \{\omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{P}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{P})\}^{-1} \phi(\underline{K}, \underline{P}, \dots, \omega) \end{aligned} \quad (1.30)$$

Com a definição

$$\begin{aligned} x_i(\underline{K}, m', n', \omega) &= (4/N) \sum_{\underline{P}} \cos \underline{P} \cdot \underline{\delta}_i \{\omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{P}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{P})\}^{-1} \times \\ &\times \phi(\underline{K}, \underline{P}, m', n', \omega) \end{aligned} \quad (1.31)$$

introduzida em (1.30), chega-se a

$$\begin{aligned} \phi(\underline{K}, \underline{Q}, \dots, \omega) &= A(\underline{K}/2 + \underline{Q}, \underline{K}/2 - \underline{Q}, \dots) + \\ &+ \sum_{i=1}^{z/2} \{I \cos(\underline{K} \cdot \underline{\delta}_i / 2) - J \cos \underline{Q} \cdot \underline{\delta}_i\} x_i(\underline{K}, \dots, \omega) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Definindo-se ainda

$$C_i(\underline{K}, m', n', \omega) =$$

$$= (4/N) \sum_{\underline{P}} \cos \underline{P} \cdot \delta_i \{ \omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{P}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{P}) \}^{-1} \times$$

$$\times A(\underline{K}/2 + \underline{P}, \underline{K}/2 - \underline{P}, m', n')$$
(1.33)

e

$$B_{ij}(\underline{K}, \omega) =$$

$$= (4/N) \sum_{\underline{P}} \cos \underline{P} \cdot \delta_i \{ \omega - 2\mu h - \Omega(\underline{K}/2 + \underline{P}) - \Omega(\underline{K}/2 - \underline{P}) \}^{-1} \times$$

$$\times (I \cos(\underline{K} \cdot \delta_j / 2) - J \cos \underline{P} \cdot \delta_j)$$
(1.34)

então, a substituição da eq. (1.32) na eq. (1.31) resulta no sistema não homogêneo de equações algébricas em  $x_i$ :

$$\sum_{j=1}^{z/2} \{ \delta_{ij} - B_{ij}(\underline{K}, \omega) \} x_j(\underline{K}, m', n', \omega) = C_i(\underline{K}, m', n', \omega),$$
(1.35)

cujas soluções são dadas por

$$x_i(\underline{K}, m', n', \omega) = \sum_{j=1}^{z/2} \{ \Delta_{ij}(\underline{K}, \omega) / \Delta(\underline{K}, \omega) \} C_j(\underline{K}, m', n', \omega),$$
(1.36)

onde  $\Delta$  e  $|| \Delta_{ij} ||$  são o determinante e a matriz cofatora de  $|| \delta_{ij} - B_{ij}(\underline{K}, \omega) ||$ . Substituindo-se a eq. (1.33) na eq. (1.36) e o resultado, na eq. (1.32), obtém-se, por fim, a solução for -



boa idéia do número e do comportamento dos estados ligados .. As principais conclusões obtidas para o modelo isotrópico ( $J=1$ ) foram as seguintes <sup>(3)</sup>:

O modelo de Heisenberg pode apresentar  $0, 1, \dots, d$  ( $d$  é a dimensão da rede) estados ligados de dois m̄agnons; o número preciso deles depende de modo complicado do vetor de onda total  $\underline{K}$ . Os estados aparecem para  $\underline{K}$  próximo ao contorno da zona de Brillouin e suas funções de onda são muito localizadas dentro de distâncias da ordem do parâmetro da rede, alargando-se à medida que  $\underline{K}$  se afasta da borda<sup>(7)</sup>. Os pares ligados têm energia abaixo do contínuo de duas ondas livres. O número de estados ligados e a energia de ligação relativa ao contínuo crescem com  $|\underline{K}|$ . Em particular para o caso tridimensional, não aparecem estados ligados numa vizinhança do ponto  $\Gamma$ . Mesmo em duas dimensões, quando há pares com vetores de onda arbitrariamente pequenos, as energias de ligação tendem exponencialmente a zero. A ausência de estados ligados com  $\underline{K}$  pequeno implica, portanto, que seu efeito sobre a termodinâmica é desprezível a baixa temperatura.

Um estado ligado com  $\underline{K} = 0$  e energia abaixo do contínuo pode aparecer quando se introduz anisotropia no modelo. A teoria de Wortis <sup>(3)</sup> o prediz quando, no caso tridimensional,

$$0 \leq (I/J) < 0,5163/(2S + 0,5163).$$

### C. A Interação Cinemática e a Estrutura da Função de Green de Primeira Ordem a Baixa Temperatura.

Para efeito de comparação futura, limitar-nos-emos, nesta secção, ao caso de  $S = 1/2$ .

A função de Green de primeira ordem,  $G(m, m', t)$ , foi definida na secção anterior pela eq. (1.6) em termos de média no estado fundamental. Lá a função recebeu a denominação sugestiva de função de Green (à temperatura zero) de uma partícula, e a informação nela contida, eq. (1.17), restringia-se ao subespaço de um desvio de spin. A substituição da média no estado fundamental pela média estatística, - definida por

$$\langle \dots \rangle = (1/Z) \sum_{\gamma} \langle \gamma | \dots | \gamma \rangle \exp(-\beta E(\gamma)) \quad (1.39)$$

com

$$Z = \sum_{\gamma} \exp(-\beta E(\gamma)) ,$$

$\gamma$  e  $E(\gamma)$  definidos como na eq. (1.12) e  $\beta$  dado pelo recíproco do produto da constante de Boltzmann  $k_B$  pela temperatura absoluta  $T$ , - introduz na estrutura da função de Green contribuições (devidamente pesadas pela temperatura) da dinâmica de muitas partículas (4).

Nesta secção obteremos uma expressão para a função de Green de primeira ordem em termos da matriz  $t$  definida na secção anterior. Isto será feito ao se considerar de modo formal o papel desempenhado pela cinemática de spin na determinação da estrutura da função.

Para a discussão que se segue, é conveniente considerar-se os transformados de Fourier dos operadores  $S^{\pm}$  :

$$b^+(\underline{k}) = (1/\sqrt{N}) \sum_{\ell} S^-(\ell) \exp(+i \underline{k} \cdot \underline{R}(\ell)) \quad (1.40.a)$$

e

$$b(\underline{k}) = (1/\sqrt{N}) \sum_{\ell} S^+(\ell) \exp(-i \underline{k} \cdot \underline{R}(\ell)) \quad (1.40.b)$$

As relações de comutação satisfeitas por estes operadores transformados seguem das equações (1.1.b) e (1.1.c) e da relação entre  $S^z$  e  $S^{\pm}$  ;

$$S^z(\ell) = 1/2 - S^-(\ell) S^+(\ell) , \quad (1.41)$$

válida para  $S = 1/2$ . As relações são as seguintes:

$$[b^+(\underline{k}), b^+(\underline{q})] = [b(\underline{k}), b(\underline{q})] = 0 \quad (1.42.a)$$

e

$$[b(\underline{k}), b^+(\underline{q})] = \delta_{\underline{k}, \underline{q}} - (2/N) \sum_{\underline{p}} b^+(\underline{p}) b(\underline{p} + \underline{k} - \underline{q}). \quad (1.42.b)$$

A relação de comutação (1.42.b) difere daquela de operadores de Bose pelo segundo termo no segundo membro. Esta diferença é fundamental no estabelecimento da dimensão do espaço de Hilbert do sistema de spins.

Em termos dos novos operadores, o hamiltoniano da eq. (1.2) é escrito como:

$$H = E(0) + H_0 + V, \quad (1.43.a)$$

onde  $E(0)$  é a energia do estado fundamental, eq. (1.4) com  $S = 1/2$ ,

$$H_0 = \sum_{\underline{k}} \{\mu h + \Omega(\underline{k})\} b^+(\underline{k}) b(\underline{k}) \quad (1.43.b)$$

e

$$V = -(1/2N) \sum_{\underline{k}, \underline{p}, \underline{q}} \{J(\underline{k}-\underline{q}) + J(\underline{p}-\underline{q})\} b^+(\underline{k}) b^+(\underline{p}) b(\underline{q}) b(\underline{k} + \underline{p} - \underline{q}) \quad (1.43.c)$$

Note-se que  $H_0$  tem o aspecto de um hamiltoniano livre, mas a regra de comutação (1.42.b) impede esta interpretação.

Considere-se agora a função de Green

$$G(\underline{k}, t) \equiv \langle\langle b(\underline{k}; t) | b^+(\underline{k}; 0) \rangle\rangle =$$

$$= -i\theta(t) \langle [b(\underline{k}; t), b^+(\underline{k}; 0)] \rangle, \quad (1.44)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  é calculado segundo a eq. (1.39). Esta função é a transformada de Fourier de  $G(m, m', t)$  definida na eq. (1.6) - com a substituição da média no estado fundamental pela média estatística (1.39). Isto ocorre em virtude da invariância translacional de  $G(m, m', t)$  e da linearidade das funções de Green.

A transformada de Fourier,  $G(\underline{k}, \omega)$ , de  $G(\underline{k}, t)$  obedece a uma equação de movimento análoga à eq. (1.13)<sup>(4)</sup>

$$\omega G(\underline{k}, \omega) = (1/2\pi) \langle [b(\underline{k}), b^+(\underline{k})] \rangle +$$

$$+ \langle\langle [b(\underline{k}), H] | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle. \quad (1.45)$$

Se for tomado  $\ell = m$  na eq. (1.1.b), a seguir substituídos  $S^{\pm}$  pelos operadores transformados e finalmente somados em  $\ell$  ambos os membros da equação, pode-se obter, em vista da eq. (1.42.b),

$$\sigma \equiv (1/N) \sum_{\ell} \langle S^z(\ell) \rangle = (1/2) \langle [b(\underline{k}), b^+(\underline{k})] \rangle =$$

$$= 1/2 - (1/N) \sum_{\underline{q}} \langle b^+(\underline{q}) b(\underline{q}) \rangle. \quad (1.46)$$

Cumprer-se que, da invariância translacional, o valor médio da componente  $z$  do spin em qualquer ponto da rede vale  $\sigma$ . Com a eq. (1.46), a eq. (1.45) passa a ser

$$\omega G(\underline{k}, \omega) = \sigma / \pi + \langle\langle [b(\underline{k}), H] | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle. \quad (1.47)$$

Necessita-se desenvolver o comutador entre  $b(\underline{k})$  e o hamiltoniano. Das eqs. (1.42) e (1.43), conseguem-se

$$[b(\underline{k}), H_0] = (\mu h + \Omega(\underline{k})) b(\underline{k}) + (1/N) \sum_{\underline{p}, \underline{q}} \{I(\underline{p}) + I(\underline{k} + \underline{q} - \underline{p})\} b^+(\underline{q}) b(\underline{p}) b(\underline{k} + \underline{q} - \underline{p}) \quad (1.48.a)$$

e

$$[b(\underline{k}), V] = -(1/N) \sum_{\underline{p}, \underline{q}} \{J(\underline{k} - \underline{p}) + J(\underline{q} - \underline{p})\} b^+(\underline{q}) b(\underline{p}) b(\underline{k} + \underline{q} - \underline{p}) \quad (1.48.b)$$

O segundo termo no segundo membro da eq. (1.48.a.) é devido ao segundo termo do desenvolvimento do comutador na (1.42.b). Por conseguinte, como já foi mencionado, não se pode interpretar  $H_0$  como um hamiltoniano livre; mesmo se  $H_0$  fosse considerado como um hamiltoniano aproximado do sistema, apareceria, de acordo com a eq. (1.48.a), uma interação entre as ondas de spin. Seguindo o uso corrente, vamos denominar esta interação de interação cinemática.

Como uma ilustração, vamos considerar a aproximação crua

$$[b(\underline{k}), H] \approx \Omega(\underline{k}) b(\underline{k}) \quad (1.49)$$

na eq. (1.47); colocou-se  $h = 0$  para os propósitos da discussão que se segue. Neste caso, a eq. (1.46) fornece (ver o apêndice A):

$$1/2 \sigma = 1 + (2/N) \sum_{\underline{k}} (\exp \beta \Omega(\underline{k}) - 1)^{-1} \quad (1.50)$$

Da eq. (1.50) resulta a seguinte expansão para a magnetização espontânea, no caso do hamiltoniano isotrópico ( $J = I$ ), (ver o apêndice A):

$$\begin{aligned} \sigma = 1/2 - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} + \\ + 2a_0^2 \theta^3 + 4 a_0 a_1 \theta^4 + O(\theta^{9/2}) \end{aligned} \quad (1.51)$$

A temperatura reduzida  $\theta$  e os coeficientes  $a_i$  encontram-se definidos nas eqs. (2.12) do capítulo II.

Se em vez de operadores de spin fossem usados operadores do tipo de Bose (8,9), a aproximação da eq. (1.49) implicaria

$$\sigma = 1/2 - (1/N) \sum_{\underline{k}} (\exp \beta \Omega(\underline{k}) - 1)^{-1}$$

A equação acima dá a contribuição correta das ondas de spin livres à magnetização espontânea (10). O resultado correto é da do pela eq. (1.51), omitidos o quinto e sexto termos.

A seguir, vamos levar em conta na eq. (1.47) o desenvolvimento exato do comutador de  $b(\underline{k})$  com o hamiltoniano:

$$\begin{aligned} (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})) G(\underline{k}, \omega) = \sigma/\pi + \\ + (1/N) \sum_{\underline{p}', \underline{q}'} \{I(\underline{p}') + I(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{p}') - J(\underline{k} - \underline{p}') - J(\underline{q}' - \underline{p}')\} \times \\ \times \langle\langle b^\dagger(\underline{q}') b(\underline{p}') b(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{p}') | b^\dagger(\underline{k}), \omega \rangle\rangle \end{aligned} \quad (1.52)$$

A função de Green de ordem superior que aparece na eq. (1.52) obedece à seguinte equação de movimento:

$$\begin{aligned}
 & (\omega - \mu h + \Omega(\underline{r}) - \Omega(\underline{k}') - \Omega(\underline{q}')) \langle \langle b^+(\underline{r}) b(\underline{k}') b(\underline{q}') | b^+(\underline{k}), \omega \rangle \rangle - \\
 & - (1/N) \sum_{\underline{p}'} \{ I(\underline{p}') + I(\underline{k}' + \underline{q}' - \underline{p}') - J(\underline{k}' - \underline{p}') - J(\underline{q}' - \underline{p}') \} \times \\
 & \times \langle \langle b^+(\underline{r}) b(\underline{p}') b(\underline{k}' + \underline{q}' - \underline{p}') | b^+(\underline{k}), \omega \rangle \rangle + 0 (\langle \langle b^+ b^+ b b | b^+ \rangle \rangle) = \\
 & = A'(\underline{r}, \underline{k}', \underline{q}', \underline{k}) \quad , \quad (1.53)
 \end{aligned}$$

com

$$A'(\underline{r}, \underline{k}', \underline{q}', \underline{k}) = (1/2\pi) \langle [b^+(\underline{r}) b(\underline{k}') b(\underline{q}'), b^+(\underline{k})] \rangle \quad . \quad (1.54)$$

A eq. (1.53) tem a mesma forma da eq. (1.25), suprimidas as contribuições das funções de Green de ordem superior. Se desprezarmos estas contribuições, a solução aproximada da eq. (1.53) segue a da eq. (1.25).

Façamos na eq. (1.53) as seguintes identificações:

$$\underline{r} = \underline{q}' \quad \text{e} \quad \underline{k}' = \underline{k}$$

e a seguir somemos sobre  $\underline{q}'$ ; rearranjados os termos e feita a aproximação sugerida acima, resulta a equação:

$$\begin{aligned}
 & (1/N) \sum_{\underline{p}', \underline{q}'} \{ I(\underline{p}') + I(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{p}') - J(\underline{k} - \underline{p}') - J(\underline{q}' - \underline{p}') \} \times \\
 & \times \langle \langle b^+(\underline{q}') b(\underline{p}') b(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{p}') | b^+(\underline{k}), \omega \rangle \rangle \equiv \\
 & = \sum_{\underline{q}'} \{ (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})) \langle \langle b^+(\underline{q}') b(\underline{k}) b(\underline{q}') | b^+(\underline{k}), \omega \rangle \rangle - A'(\underline{q}', \underline{k}, \underline{q}', \underline{k}) \} \\
 & \quad \quad \quad (1.55)
 \end{aligned}$$

que deve ser substituída no segundo membro da eq. (1.52) ; daí ,  
então, surge

$$\begin{aligned}
 (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})) G(\underline{k}, \omega) = \sigma/\pi + \sum_{\underline{q}} \{ (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})) \times \\
 \times \langle\langle b^+(\underline{q}) b(\underline{k}) b(\underline{q}) | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle - A'(\underline{q}, \underline{k}, \underline{q}, \underline{k}) \}.
 \end{aligned}
 \tag{1.56}$$

A solução aproximada de (1.53) para a função de Green que aparece no segundo membro da eq. (1.56) é

$$\begin{aligned}
 (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})) \langle\langle b^+(\underline{q}) b(\underline{k}) b(\underline{q}) | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle = A'(\underline{q}, \underline{k}, \underline{q}, \underline{k}) + \\
 + (2/N) \sum_{\underline{p}} T(\underline{k} + \underline{q}, (\underline{k} - \underline{q})/2, \underline{p}, \omega + \mu h + \Omega(\underline{q})) \times \\
 \times \{ \omega - \mu h + \Omega(\underline{q}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 + \underline{p}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 - \underline{p}) \}^{-1} \times \\
 \times A'(\underline{q}, (\underline{k} + \underline{q})/2 + \underline{p}, (\underline{k} + \underline{q})/2 - \underline{p}, \underline{k}) ,
 \end{aligned}
 \tag{1.57}$$

onde T é definido pela eq. (1.38) [ há um  $- 2\mu h$  implícito na definição de T ]. Finalmente, de (1.56) e (1.57), decorre uma aproximação para  $G(\underline{k}, \omega)$  que envolve a dinâmica de duas partículas:

$$\{\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})\} G(\underline{k}, \omega) = \sigma / \pi +$$

$$+ (2/N) \sum_{\underline{P}, \underline{q}} T(\underline{k} + \underline{q}, (\underline{k} - \underline{q})/2, \underline{P}, \omega + \mu h + \Omega(\underline{q})) \times$$

$$\times \{\omega - \mu h + \Omega(\underline{q}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 + \underline{P}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 - \underline{P})\}^{-1} \times$$

$$\times A'(\underline{q}, (\underline{k} + \underline{q})/2 + \underline{P}, (\underline{k} + \underline{q})/2 - \underline{P}, \underline{k}) \quad (1.58)$$

Devido às eqs. (1.42), a função  $A'$  definida por (1.54) contém funções de correlação a dois e a quatro operadores, da forma  $\langle b^+ b \rangle$  e  $\langle b^+ b^+ b b \rangle$ , respectivamente. Propondo-se uma aproximação simétrica,

$$\langle b_1^+ b_2^+ b_3 b_4 \rangle \approx \langle b_1^+ b_3 \rangle \langle b_2^+ b_4 \rangle + \langle b_1^+ b_4 \rangle \langle b_2^+ b_3 \rangle$$

para as funções de correlação envolvidas na eq. (1.58), pode-se chegar à seguinte expressão para  $G(\underline{k}, \omega)$ :

$$\{\omega - \mu h - \Omega(\underline{k})\} G(\underline{k}, \omega) = (1/2\pi) \{2\sigma + \Lambda^{(2)}(\underline{k}, \omega) + \Lambda^{(3)}(\underline{k}, \omega)\} + \Xi(\underline{k}, \omega) G^{(0)}(\underline{k}, \omega)$$

onde

$$(1.59)$$

$$\Lambda^{(2)}(\underline{k}, \omega) = -(4/N^2) \sum_{\underline{P}, \underline{q}} T(\underline{k} + \underline{q}, (\underline{k} - \underline{q})/2, \underline{P}, \omega + \mu h + \Omega(\underline{q})) \times$$

$$\times \{\omega - \mu h + \Omega(\underline{q}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 + \underline{P}) - \Omega((\underline{k} + \underline{q})/2 - \underline{P})\}^{-1} n(\underline{q})$$

com

$$n(\underline{q}) = \langle b^+(\underline{q}) b(\underline{q}) \rangle ;$$

mais ainda

$$\Lambda^{(3)}(\underline{k}, \omega) = -(8/N^2) \sum_{\underline{p}, \underline{p}, \underline{q}} T(\underline{k}+\underline{q}, (\underline{k}-\underline{q})/2, \underline{p}, \omega+\mu h+\Omega(\underline{q})) \times$$

$$\times \{ \omega - \mu h + \Omega(\underline{q}) - \Omega((\underline{k}+\underline{q})/2+\underline{p}) - \Omega((\underline{k}+\underline{q})/2-\underline{p}) \}^{-1} \times$$

$$\langle b^+(\underline{q}) b(\underline{p} - (\underline{k}-\underline{q})/2 - \underline{p}) \rangle \langle b^+(\underline{p}) b((\underline{k}+\underline{q})+\underline{p}) \rangle ,$$

$$\Xi(\underline{k}, \omega) = (4/N) \sum_{\underline{q}} T(\underline{k}+\underline{q}, (\underline{k}-\underline{q})/2, (\underline{k}-\underline{q})/2, \omega+\mu h+\Omega(\underline{q})) n(\underline{q})$$

e

$$G^{(0)}(\underline{k}, \omega) = (1/2\pi) 2\sigma \{ \omega - \mu h - \Omega(\underline{k}) \}^{-1} .$$

Usando-se a eq. (1.46) e definindo-se

$$\Lambda^{(1)} = -(2/N) \sum_{\underline{q}} n(\underline{q})$$

e

$$\Lambda(\underline{k}, \omega) = \Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}(\underline{k}, \omega) + \Lambda^{(3)}(\underline{k}, \omega) ,$$

pode-se rearranjar a eq. (1.59) para se obter:

$$\{ \omega - \mu h - \Omega(\underline{k}) \} G(\underline{k}, \omega) =$$

$$= (1/2\pi) \{ 1 + \Lambda(\underline{k}, \omega) \} + \Xi(\underline{k}, \omega) G^{(0)}(\underline{k}, \omega) . \quad (1.60)$$

O resultado (1.60) parece ser o primeiro termo da expansão, em potências de  $\Xi(\underline{k}, \omega) / (\omega - \mu h - \Omega(\underline{k}))$ , de

$$\{\omega - \mu h - \Omega(\underline{k}) - \Xi(\underline{k}, \omega)\} G(\underline{k}, \omega) = (1/2\pi) \{1 + \Lambda(\underline{k}, \omega)\} \quad (1.61)$$

A equação acima, com  $\Lambda = \Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}$ , é formalmente o resultado a baixa temperatura (para  $S=1/2$ ) obtido na ref. (6), onde foi empregada a representação de Dyson-Maleev<sup>(8,9)</sup> para os operadores de spin. O aparecimento em (1.60) de  $\Xi G^{(0)}$  em vez de  $\Xi G$  está ligado ao truncamento da eq. (1.53). Embora a aproximação (1.55) seja insatisfatória, ela é capaz de conferir à função de Green,  $G(\underline{k}, \omega)$ , as principais características que se esperam a baixa temperatura.

REFERÊNCIAS

1. K. Yosida, J. Appl. Phys. 39, 511 (1968)..
2. A.R. Miedema, R. F. Wielinga and W.J. Huiskamp, Physica 31, 1585 (1965).
3. M. Wortis, Phys. Rev. 132, 85 (1963).
4. D.N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk 71, 71 (1960)  
[ trad.: Soviet Phys. - Uspekhi 3, 320 (1960) ].
5. J. Lam and Ç. Mavroyannis, Physica 71, 325 (1974).
6. R. Silbergliitt and A.B. Harris, Phys. Rev. Lett. 19, 30 (1967);  
Phys. Rev. 174, 640 (1968).
7. N. Fukuda and M. Wortis, J. Phys. Chem. Solids 24, 1975 (1963).
8. F.J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 e 1230 (1956).
9. S.V. Maleev, JETP( USSR) 33, 1010 (1957) [ trad.: Soviet Phys.  
- JETP 6, 776 (1958) ]. Ver o apêndice deste artigo.
10. R.A. Tahir - Kheli and D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 95 (1962).

## CAPÍTULO II

### A APROXIMAÇÃO DE DEMBINSKI PARA A

#### FUNÇÃO DE GREEN TRANSVERSAL

A teoria de Dembinski <sup>(1)</sup> para o estudo do modelo de Heisenberg isotrópico de spin 1/2 trata da função de Green dependente da temperatura,  $G(m, m', t)$ , considerada no capítulo anterior. Neste caso, é de interesse, para a discussão que se segue, escrever-se a equação de movimento obedecida pela transformada de Fourier  $G(m, m', \omega)$ :

$$\begin{aligned} \omega G(m, m', \omega) &= (\sigma / \pi) \delta_{mm'} + \mu h G(m, m', \omega) \\ &+ 2 \sum_{\ell} J(\ell, m) \{ \langle \langle S^z(\ell) S^+(m) | S^-(m'), \omega \rangle \rangle \\ &- \langle \langle S^z(m) S^+(\ell) | S^-(m'), \omega \rangle \rangle \}. \end{aligned} \tag{2.1}$$

O cálculo da equação acima é análogo ao da eq. (1.15), bastando para tal considerar-se, na eq. (1.13), a média estatística, eq. (1.39), em vez da média no estado fundamental. Note-se que na eq. (2.1) a soma em  $\ell$  restringe-se, por força da definição (1.3) aos primeiros vizinhos de  $m$ ;  $\sigma$  é dado pela eq. (1.46).

A aproximação de Dembinski <sup>(1)</sup> (denominada, de agora em diante, I) lineariza a eq. (2.1) ao substituir a função de Green de ordem superior que aparece no segundo membro pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \langle \langle S^z(m) S^+(\ell) | S^-(m'), \omega \rangle \rangle &= \sigma G(\ell, m', \omega) + \\ &+ \delta_{mm'} 2\sigma \langle S^-(m) S^+(m) \rangle G(\ell, m', \omega) + \\ &- 2\sigma \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle G(m, m', \omega) + \end{aligned} \tag{2.2}$$

A eq. (2.2), omitidos os dois últimos termos no seu segundo membro, corresponde à aproximação RPA<sup>(2)</sup>; a aproximação de Callen<sup>(3)</sup>, por sua vez, corresponde a se ignorar apenas o terceiro termo.

A aproximação de Dembinski modificada<sup>(4)</sup> (chamada, a partir de agora, II) substitui a eq. (2.2) pela seguinte:

$$\begin{aligned} \langle\langle S^z(m) S^+(\ell) | S^-(m'), \omega \rangle\rangle &= \sigma G(\ell, m', \omega) + \\ &- 2\sigma \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle G(m, m', \omega) + \\ &+ \delta_{mm'}, 2\sigma \{ \langle S^-(m) S^+(m) \rangle + \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle \} G(\ell, m', \omega) \end{aligned} \quad (2.3)$$

A diferença entre as eqs. (2.2) e (2.3) reside apenas no último termo do segundo membro destas equações. Além da correção de Dembinski para a cinemática de spin, proporcional a  $\langle S^-(m) S^+(m) \rangle$ , o esquema II introduz uma correção que leva em conta a correlação de spin entre pontos distintos (para os propósitos do desacoplamento, primeiros vizinhos entre si).

Vejamos agora os principais resultados das aproximações I e II tratados nas refs. (1), (4) e (5).

#### A. Funções de Correlação de Ordem Superior (4,5).

Devido ao seu papel importante na proposição das aproximações, é ilustrativo considerarem-se as implicações que I e II reservam às funções de correlação de ordem superior.

Da relação existente entre funções de correlação e as correspondentes funções de Green<sup>(6)</sup>, tem-se, das eqs. (2.2) e (2.3), (para  $m = m'$ ):

$$\langle S^-(m) S^Z(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = \sigma \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle \quad (2.4)$$

na aproximação I, e

$$\langle S^-(m) S^Z(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = \sigma \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle \Gamma, \quad (2.5)$$

com

$$\Gamma = 1 + 2 \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle,$$

na aproximação II.

Como é salientado na ref. (4), as eqs. (2.4) e (2.5) apresentam para a função de correlação  $\langle S^-(m) S^Z(m) S^+(\ell) \rangle$  uma forma que lembra, no limite de alta temperatura, a aproximação de campo molecular. Já o esquema de Callen<sup>(3)</sup> implica a seguinte aproximação:

$$\langle S^-(m) S^Z(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = 2\sigma^2 \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle,$$

o que é um indicativo do seu insucesso a alta temperatura.

Com a substituição da eq. (1.41) nas eqs. (2.4) e (2.5), seguem as expressões:

$$\langle (S^-(m))^2 S^+(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = (1/2 - \sigma) \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle \quad (aprox. I) \quad (2.6)$$

$$\langle (S^-(m))^2 S^+(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = (1/2 - \sigma) \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle$$

$$(aprox. II). \quad (2.7)$$

De acordo com a eq. (1.1.d), a função de correlação no primeiro membro das equações acima deve ser nula, no entanto, os resultados obtidos indicam que este fato só ocorre rigorosamente à temperatura zero. Com efeito, a baixa temperatura, a magnetização  $\sigma$  e a função de correlação entre pares de primeiros vizinhos - são dadas por <sup>(3)</sup> ( $h = 0$ ):

$$\sigma = 1/2 - a_0 \theta^{3/2} + \dots$$

e

$$\langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle = a_0 \theta^{3/2} + \dots,$$

e, portanto,

$$\langle (S^-(m))^2 S^+(m) S^+(\ell) \rangle_{(m \neq \ell)} = a_0^2 \theta^3 \quad (aprox. I)$$

$$= 0 + O(\theta^4) \quad (aprox. II)$$

Nas refs. (4) e (5) chama-se a atenção para os resultados acima - que, embora espúrios, são algo melhores do que o de Callen <sup>(3)</sup> - que envolve um erro de  $2a_0^2 \theta^3$  [ $a_0$  e  $\theta$  estão definidos nas eqs. (2.12.a) e (2.12.d) deste capítulo].

## B. Quantidades Termodinâmicas pelo Método Iterativo de Solução <sup>(1,4)</sup>

Introduzindo-se na eq. (2.1) a aproximação dada pela -

eq. (2.2) ou pela eq. (2.3), obtêm-se, depois de uma transformação de Fourier, a equação básica para o cálculo das quantidades termodinâmicas do sistema:

$$\begin{aligned}
 (\omega - \mu h - \epsilon(\underline{k})) G(\underline{k}, \omega) = \sigma/\pi + \\
 + R(\eta) \Omega(\underline{k}) (2/N) \sum_{\underline{q}} \{\gamma(\underline{q})/\gamma(0)\} G(\underline{q}, \omega)
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

onde

$$\epsilon(\underline{k}) = 2\sigma P \Omega(\underline{k}) , \tag{2.9.a}$$

$$P = 1 + (2/N) \sum_{\underline{k}} \{\gamma(\underline{k}) / \gamma(0)\} \psi(\underline{k}) , \tag{2.9.b}$$

$$\gamma(\underline{k}) = J(\underline{k}) / J, \tag{2.9.c}$$

$$R(\eta) = \sigma(2\sigma - 1 - \eta), \tag{2.9.d}$$

$$\eta = 0 \quad \text{na aprox. I}$$

$$= P - 1 \quad \text{na aprox. II} \tag{2.9.e}$$

e  $\Omega(\underline{k})$  é dado pela eq. (1.18), com  $J = I$  e  $S = 1/2$ .

A função  $\psi(\underline{k})$  que aparece em (2.9.b) é a transformada de Fourier da função de correlação  $\langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle$ .

A eq. (2.8) foi resolvida na ref. (1) ( $\eta = 0$ ) e na ref. (4) ( $\eta = P - 1$ ) por um método de iteração, considerando-se apenas os pólos em

$$\omega - \mu h - \epsilon(\underline{k}) = 0. \tag{2.10}$$

Por este método, resulta, na aproximação I, a seguinte expansão assintótica para a magnetização espontânea a baixa temperatura:

$$\sigma = 1/2 - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - 4 a_0 a_1 Q \theta^4, \quad (2.11)$$

onde

$$a_0 = \zeta(3/2), \quad (2.12.a)$$

$$a_1 = (3/4)\pi v \zeta(5/2), \quad (2.12.b)$$

$$a_2 = \pi^2 w v^2 \zeta(7/2), \quad (2.12.c)$$

$$\theta = 3k_B T / (2\pi J(0) v) \quad (2.12.d)$$

e Q dado na tab. 2.1. Nas equações acima,  $\zeta(x)$  é a função zeta de Riemann, e  $v$  e  $w$  são constantes dependentes da geometria da rede; seus valores numéricos são:

$$\zeta(3/2) = 2,612; \quad \zeta(5/2) = 1,341; \quad \zeta(7/2) = 1,127;$$

$$v = 1 \text{ (sc)}; \quad (3/4) 2^{2/3} \text{ (bcc)}; \quad 2^{1/3} \text{ (fcc)};$$

$$w = 33/32 \text{ (sc)}; \quad 281/288 \text{ (bcc)}; \quad 15/16 \text{ (fcc)}.$$

O resultado (2.11) difere daquele obtido por Dyson<sup>(7)</sup> apenas no valor numérico do fator Q. Note-se incidentalmente (tab.2.1) o bom resultado para o caso da rede cúbica simples.

Tabela 2.1 - Valores numéricos do fator Q (eq. 2.11) em diferentes aproximações.

rede	Aprox. I <sup>a</sup>	Dyson <sup>b</sup>	Aprox. II <sup>c</sup>
sc	1,68	1,68	2,70
bcc	1,52	1,45	2,38
fcc	1,45	1,35	2,24

a - ref.(1)

b - ref.(7)

c - ref.(4)

A expansão a baixa temperatura para a magnetização espontânea calculada na aproximação II não é satisfatória: deve-se inserir na eq. (2.11) um termo  $-2a_0^2\theta^3$  e também modificar o fator Q. Conforme se conclui da tab. 2.1, o termo em  $\theta^4$  se afasta mais do resultado de Dyson do que o correspondente na aproximação I. Contudo, melhor destino é reservado pela aproximação II para o valor de  $T_c$  e para a susceptibilidade a campo nulo ( $T \gg T_c$ ). A susceptibilidade é dada por

$$\chi / \mu^2 = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ \sigma \rightarrow 0}} (\sigma / \mu h) =$$

$$= (\beta/4) [1 + (T_m/T) + a_2' (T_m/T)^2 +$$

$$+ a_3' (T_m/T)^3 + \dots] \quad (2.13)$$

com

$$T_m \equiv J(0) / (2k_B).$$

Nas tabelas 2.2 e 2.3 são comparados os valores de  $T_c$  e  $\chi$  nas duas aproximações com aqueles de Baker et al.<sup>(8)</sup> calculados pelo método de expansão em série a alta temperatura.

Tabela 2.2 - A temperatura de Curie em unidades de  $k_B/J$ .

rede	Aprox. I <sup>a</sup>	Baker et al. <sup>b</sup>	Aprox. II <sup>c</sup>
sc	1,98	1,68	1,85
bcc	2,87	2,52	2,74
fcc	4,46	4,01	4,28
	a-ref.(1)	b-ref.(8)	c-ref.(4)

Tabela 2.3 - Os coeficientes  $a'_2$  e  $a'_3$  da s̄erie para a suscetibilidade.

	Aprox. I <sup>a</sup>			Baker et al. <sup>b</sup>			Aprox. II <sup>c</sup>		
	sc	bcc	fcc	sc	bcc	fcc	sc	bcc	fcc
$a'_2$	0,83	0,88	0,91	0,66	0,75	0,83	0,83	0,88	0,91
$a'_3$	0,64	0,73	0,80	0,40	0,54	0,63	0,61	0,72	0,79
	a-ref.(9)			b-ref.(8)			c-ref.(4)		

REFERENCIAS

1. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1021 (1968).
2. S.V. Tyablikov, "Methods in the Quantum Theory of Magnetism", Plenum Press, New York, 1967, Secs. 32 e 33.
3. H.B. Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963).
4. M.D. Coutinho Filho and I.P. Fittipaldi, Phys. Rev. B 7, 4941 (1973).
5. J.G. Ramos and A.A. Gomes, Can. J. Phys. 49, 932 (1971).
6. D.N. Zubarev, Usp . Fiz. Nauk 71, 71(1960) [ Trad.: Soviet Phys. - Uspekhi 3 , 320 (1960) ] .
7. F.J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 e 1230 (1956).
8. G.A. Baker, Jr., H.E. Gilbert, J. Eve and G.S. Rushbrooke, Phys. Rev. 164, 800 (1967).
9. S.T. Dembinski, Can J.. Phys. 46, 1502 (1968).

## CAPÍTULO III

### A SOLUÇÃO EXATA NO ESQUEMA DE

#### DEMBINSKI

##### A. Solução Exata.

A equação (2.8) pode ser resolvida exatamente; e o resultado é dado por

$$\begin{aligned} \{\omega - \mu h - \epsilon(\underline{k})\} G(\underline{k}, \omega) &= \sigma / \pi + \\ &+ (2/N) \sum_{\underline{q}} \tau(\underline{k}, \underline{q}, \omega - \mu h) \{\omega - \mu h - \epsilon(\underline{q})\}^{-1} \sigma / \pi \end{aligned} \quad (3.1)$$

com as definições:

$$\tau(\underline{k}, \underline{q}, \omega - \mu h) = R(n) \Omega(\underline{k}) \{\gamma(\underline{q}) / \gamma(0)\} D^{-1}(\omega - \mu h) \quad (3.2)$$

e

$$\begin{aligned} D(\omega - \mu h) &= 1 - R(n) \cdot (2/N) \sum_{\underline{q}} \{\gamma(\underline{q}) / \gamma(0)\} \Omega(\underline{q}) \times \\ &\times \{\omega - \mu h - \epsilon(\underline{q})\}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Para se obter (3.1), deve-se multiplicar ambos os membros de (2.8) por

$$(2/N) \{\gamma(\underline{k}) / \gamma(0)\} \{\omega - \mu h - \epsilon(\underline{k})\}^{-1},$$

a seguir, somar em  $\underline{k}$  e finalmente inserir o resultado obtido no segundo membro de (2.8).

Observe-se que  $\epsilon(\underline{k})$ ,  $D$  e  $\tau$  são funções implícitas da temperatura via  $\sigma$  e  $P$ . É interessante notar-se também que  $\tau$  se anula quando a temperatura é zero ou (considerando-se  $h_c = 0$ ) igual a  $T_c$ .

A eq. (3.1) sem o último termo no seu segundo membro tem uma forma válida para sistemas de partículas interagentes que sejam férmions ou bósons normais; logo, a forma anômala do operador de massa no presente caso é uma manifestação da cinemática mais complexa apresentada pelos spins<sup>(1,2)</sup>.

No apêndice B nós mostramos que, dos vários pólos,  $\omega = \mu h + \epsilon(\underline{k})$ , considerados no método iterativo<sup>(3,4)</sup>, somente  $\omega = \mu h + \epsilon(0)$  e  $\omega = \mu h + 2\sigma P J(0)$  são pólos da função de Green<sup>(5)</sup>. O primeiro aparece para todo  $\underline{k}$  e contribui para função de correlação transversal  $\psi(\underline{k})$  com um termo de  $O(1/N)$ . O segundo aparece em  $G(\underline{k}, \omega)$  somente para  $\underline{k}$  tal que  $\gamma(\underline{k}) = 0$ . Os outros pólos da função de Green, para  $\underline{k} \neq 0$ , são dados pela condição:

$$D(\omega - \mu h) = 0. \quad (3.4)$$

Os pólos dados pelas condições (2.10) e (3.4) entremesam-se<sup>(5)</sup>. No limite de  $N \rightarrow \infty$ , os pólos tendem a formar uma faixa e eventualmente um daqueles dados pela eq. (3.4) pode separar-se do contínuo. Logo, no limite de  $N \rightarrow \infty$ , os pólos dados pela eq. (2.10) determinam a faixa de energia renormalizada de um magnon, enquanto que o eventual pólo externo à banda representa um estado ligado. Este estado ligado aparece como uma peculiaridade dos dois esquemas do tipo de Dembinski, isto é, de desacoplamentos de primeira ordem que tentam conceder um tratamento melhor à cinemática de spin.

## B. Relação com o Formalismo da Matriz t.

Em vista de

$$\int_{\underline{k}} G(\underline{k}, \omega) \exp(i\underline{k} \cdot \underline{\delta})$$

ser independente do particular vetor de translação primitivo  $\underline{\delta}$ , a eq. (2.8) pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 (\omega - \mu h - \epsilon(\underline{k})) G(\underline{k}, \omega) = \sigma/\pi + \\
 + R(\eta)(1/N) \sum_{\underline{q}} \{J(\underline{q}) + J(-\underline{q}) - J(\underline{k} + \underline{q}) - J(\underline{k} - \underline{q})\} G(\underline{q}, \omega)
 \end{aligned}
 \tag{3.5}$$

Vamos comparar a equação acima com a equação de movimento aproximada da função de Green de segunda ordem

$$\langle\langle b^+(0) b(\underline{k}) b(-\underline{k}) | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle.$$

Dentro da aproximação a baixa temperatura considerada na sec. C do cap. I, obtem-se da eq. (1.53):

$$\begin{aligned}
 (\omega - \mu h - 2\Omega(\underline{k})) \langle\langle b^+(0) b(\underline{k}) b(-\underline{k}) | b(\underline{k}), \omega \rangle\rangle = \\
 = A'(0, \underline{k}, -\underline{k}, \underline{k}) + \\
 + (1/N) \sum_{\underline{q}} \{J(\underline{q}) + J(-\underline{q}) - J(\underline{k} + \underline{q}) - J(\underline{k} - \underline{q})\} \\
 \langle\langle b^+(0) b(\underline{q}) b(-\underline{q}) | b^+(\underline{k}), \omega \rangle\rangle
 \end{aligned}
 \tag{3.6}$$

As eqs. (3.5) e (3.6) têm essencialmente a mesma forma. Duas diferenças principais entre elas são a ausência de um fator dois no primeiro membro da eq. (3.5) e a do fator  $R(\eta)$  no segundo membro da eq. (3.6). A teoria de Dembinski dá, portanto, um carã-

ter de segunda ordem a estrutura de  $G(\underline{k}, \omega)$ , embora estejam envolvidas na eq. (3.5) apenas funções de Green de primeira ordem. Para explorarmos mais a analogia, consideremos a solução da eq. (3.6). De acordo com o cap. I, a solução da eq. (3.6) é dada por

$$\begin{aligned} (\omega - \mu h - 2\Omega(\underline{k})) \langle \langle b^+(0) b(\underline{k}) b(-\underline{k}) | b^+(\underline{k}), \omega \rangle \rangle = \\ = A'(0, \underline{k}, -\underline{k}, \underline{k}) + \\ + (2/N) \sum_{\underline{q}} T(0, \underline{k}, \underline{q}, \omega + \mu h) \{ \omega - \mu h - 2\Omega(\underline{q}) \}^{-1} A'(0, \underline{q}, -\underline{q}, \underline{k}) \end{aligned}$$

onde  $T(0, \underline{k}, \underline{q}, \omega + \mu h)$  é a matriz  $t$  para o problema do espalhamento de dois mágnons de vetores de onda opostos. O vetor de onda total do par é indicado pelo zero que aparece como primeiro argumento de  $T$  na equação acima.

Sob este aspecto a função  $\tau$  na eq. (3.1) tem um significado semelhante no esquema de Dembinski. Devemos notar, entretanto, que esta analogia é apenas formal, pois as funções de Green nas eqs. (3.5) e (3.6) não são de mesma ordem; uma analogia melhor pode ser feita com a eq. (1.52) cuja solução aparece na eq. (1.58).

Embora a eq. (1.58) seja uma aproximação a baixa temperatura, ela serve para mostrar que a aproximação de Dembinski, tentando levar em conta a cinemática de spin, introduz um efeito médio da dinâmica de muitas partículas (através da relação de autoconsistência que existe entre  $\tau$ ,  $\epsilon(\underline{q})$  e a função de correlação  $\psi(\underline{q})$ ) de forma tal que se conservam alguns aspectos do problema do espalhamento de dois mágnons.

REFERÊNCIAS

1. M.E. Lines, Phys. Rev. B 3, 1749 (1971).
2. R.A. Tahir - Kheli, Phys. Lett. 11, 275 (1964).
3. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1021 (1968).
4. M.D. Coutinho Filho and I.P. Fittipaldi, Phys. Rev. B 7, 4941 (1973).
5. M.A. Tenan and J.G. Ramos, Phys. Stat. Sol.(b) 72, K147 (1975).

## CAPÍTULO IV

### O ESTADO LIGADO NA APROXIMAÇÃO DE

#### DEMBINSKI

Para os propósitos deste capítulo consideraremos o campo magnético externo igual a zero.

Os pólos da função de Green transversal  $G(\underline{k}, \omega)$  provenientes da condição (3.4) são examinados qualitativamente no apêndice B para o caso da cadeia linear finita. A condição (3.4) aparece lá reescrita na forma [eq. (B.6)]:

$$C(\Omega) = \sigma P / R(\eta) \quad , \quad (4.1)$$

onde  $\Omega = \omega / 2\sigma P$ . A função  $C(\Omega)$ , com  $\Omega$  real, está esboçada na fig. B.1. Essa figura, embora se refira ao caso particular de  $N = 20$  pontos, traz consigo as características gerais de  $C(\Omega)$  mesmo para o caso tridimensional. A localização de  $\sigma P / R(\eta)$  no eixo vertical negativo determina as soluções de (4.1) (ou de (3.4)). Como podemos concluir da figura B.1, existe uma solução acima da banda. O objetivo do presente capítulo é investigar a persistência desta solução no limite de  $N$  tendendo a infinito, para as três redes cúbicas.

No limite da rede infinita, é conveniente reescrevermos a eq. (3.4) na seguinte forma:

$$g(\lambda) \equiv (\lambda/d - 1) [1 - \lambda G(\lambda)] = - \sigma P / R(\eta) \quad , \quad (4.2)$$

onde  $d = 3, 1$  ou  $3$  para as redes sc, bcc e fcc, respectivamente. Mais ainda,

$$\lambda = d [1 - (\omega / 2\sigma P) J(0)] \quad (4.3)$$

$$G(\lambda) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1/\pi) \int_0^\pi dx dy dz (\lambda - \zeta + i\epsilon)^{-1}, \quad (4.4)$$

com

$$\begin{aligned} \zeta &= \cos x + \cos y + \cos z, && \text{para sc} \\ &= \cos x \cos y \cos z, && \text{para bcc} \\ &= \cos x \cos y + \cos x \cos z + \cos y \cos z, && \text{para fcc.} \end{aligned}$$

Para obtermos a eq. (4.2) da eq. (3.4), fizemos uso dos seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \gamma(\underline{q})(\Omega(\underline{q})/J) \{A - \gamma(\underline{q})\}^{-1} &= \gamma(\underline{q}) - \gamma(0) + A + \\ &+ A(\gamma(0) - A)\{A - \gamma(\underline{q})\}^{-1} \end{aligned}$$

(A, constante qualquer),

$$\sum_{\underline{k}} \gamma(\underline{k}) = 0$$

e

$$(1/N) \sum_{\underline{k}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} v_c \int_{-\pi}^{\pi} d^3 \underline{k} = (1/2\pi)^3 \int_{-\pi}^{\pi} dx dy dz.$$

A integral na eq. (4.4) é uma função analítica sobre todo o plano complexo  $\omega + i\epsilon$ , com um corte no eixo real  $\lambda$  nos intervalos  $|\lambda| \leq 3$  para a rede sc,  $|\lambda| \leq 1$  para a rede bcc e  $-1 \leq \lambda \leq 3$  para a rede fcc <sup>(1)</sup>. Estes intervalos correspondem à faixa de energia de um magnon <sup>(2)</sup>; logo, vamos procurar as so

luções eq. (4.2) fora destes intervalos.

A fig. 4.1 mostra a função  $g(\lambda)$  definida como o primeiro membro da eq. (4.2), nas regiões de interesse. A função é finita exceto para o caso da rede fcc no ponto  $\lambda = -1$ . Próximo a este ponto,  $g(\lambda)$  admite a seguinte expansão assintótica<sup>(1)</sup>

$$g(\lambda) = -4/3 + (1/\pi^2) [\ln(\xi/16)]^2 + O(\xi(\ln\xi)^2), \quad (4.5)$$

onde  $\xi = -(1 + \lambda)$ ,  $0 < \xi \ll 1$ ;  $\xi$  é, portanto, uma medida do afastamento de  $\lambda$  a partir do topo da faixa. A eq. (4.5) é uma boa aproximação até  $\xi$  da ordem de  $10^{-3}$ .

O segundo membro da eq. (4.2) é uma função positiva da temperatura; conseqüentemente, a região para soluções de (4.2) restringe-se aos valores negativos de  $\lambda$ , o que corresponde, de acordo com a eq. (4.3), a energias acima da faixa.

No apêndice C, desenvolvemos uma expansão de baixa temperatura para a função  $P$ , lançando mão do método iterativo citado na sec.B do capítulo II. A fig.4.2 mostra a referida expansão, no caso da aproximação I, extrapolada até a temperatura de Curie. A figura também mostra, para comparação, o valor limite  $P_c$  de  $P$  na temperatura de transição calculado pelo mesmo método.

O segundo membro da eq. (4.2) pode-se tornar arbitrariamente grande conforme  $T$  se aproxima de zero; por outro lado, como já se mencionou,  $g(\lambda)$  aumenta sem limite apenas no caso da rede fcc para  $\lambda$  tendendo a  $-1$ . Portanto, qualquer que seja o valor da temperatura ( $0 < T < T_c$ ) é possível ajustar  $\lambda$  próximo de  $-1$  para que a eq. (4.2) seja satisfeita no caso da rede fcc. Todavia, o mesmo não se dá com as outras duas redes. Da análise feita no apêndice D conclui-se que a eq. (4.2) pode ter solução apenas para a rede sc, na aproximação II e para temperaturas próximas de  $T_c$  que justifiquem  $\sigma \approx 0$ . Além disso, uma vez que o segundo membro de (4.2) é função decrescente da temperatura, o

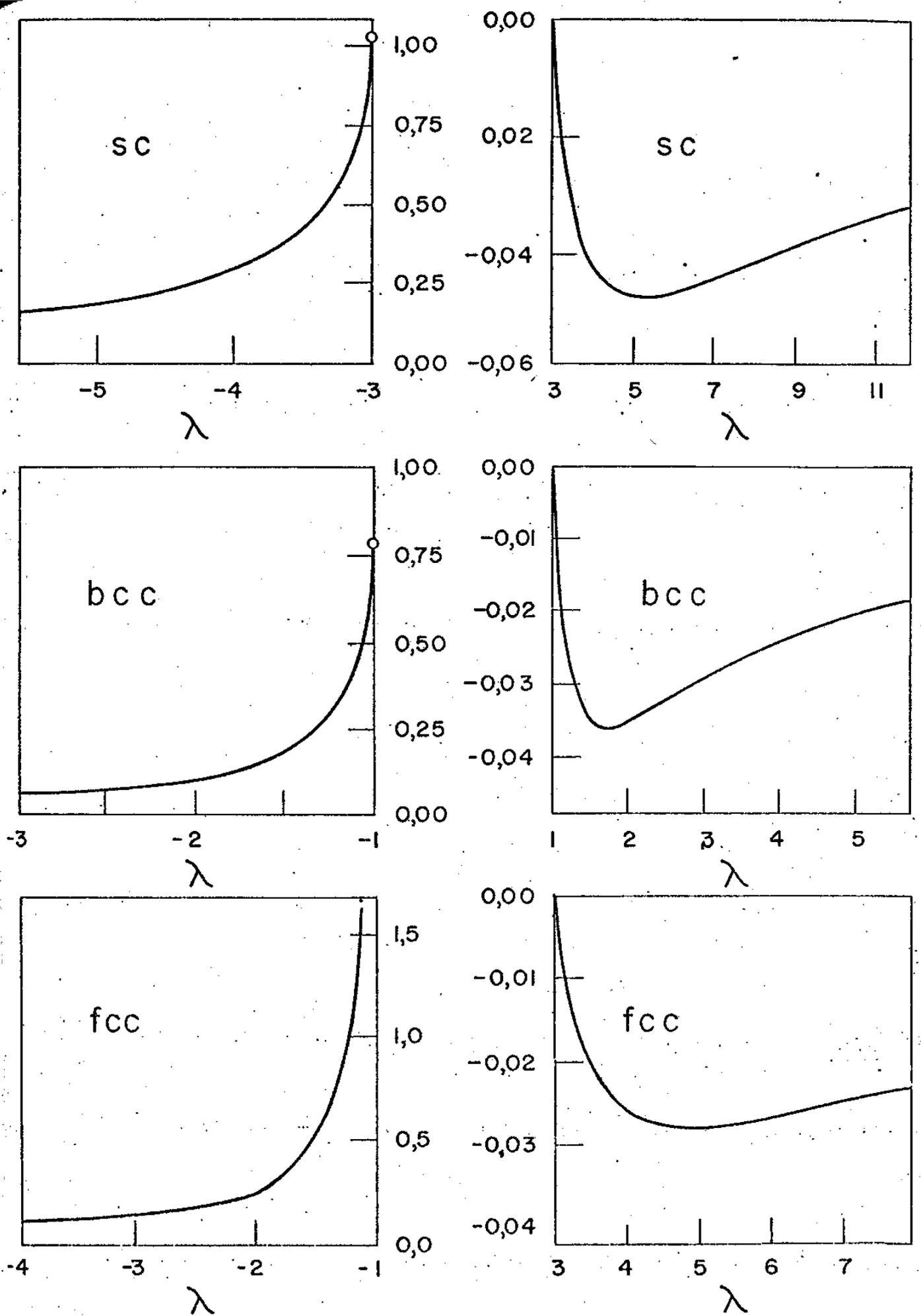


Fig. 4.1 A função  $g(\lambda)$  no exterior da faixa de energia de um mágnon.

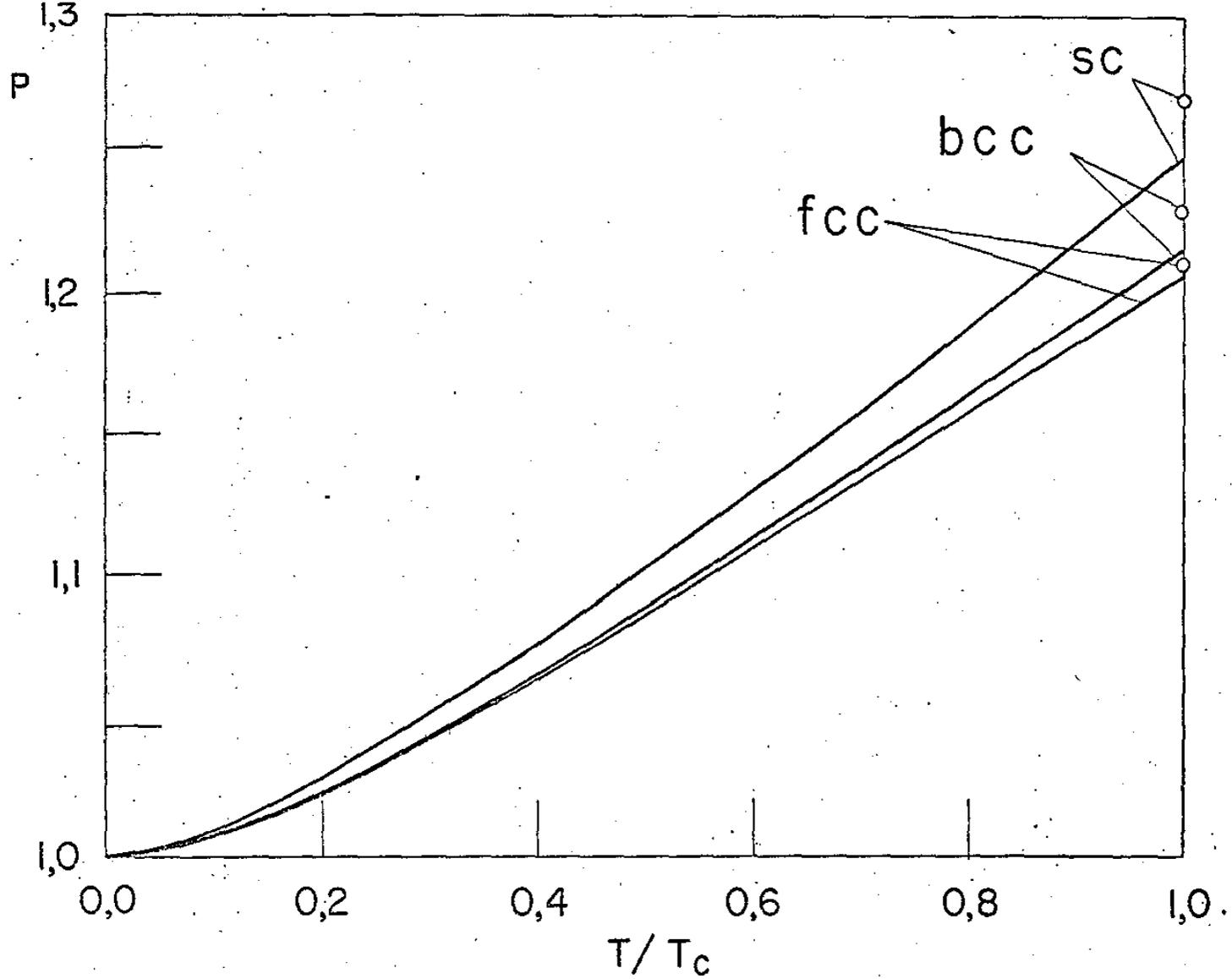


Fig. 4.2 Aproximação a baixa temperatura para a função  $P$ , extrapolada até  $T_c$ . O valor limite  $P_c$  de  $P$  em  $T_c$  é indicado por um pequeno círculo.

pôlo afasta-se da faixa com o aumento da temperatura.

Como ilustração do que se deve esperar a baixa temperatura no caso da rede fcc, apresentamos na figura 4.3 o comportamento da solução da eq. (4.2),  $\lambda = -(1+\xi)$ , na aproximação I. A figura foi obtida das eqs. (2.11), (C.8) e (4.5).

Em todos os casos em que o pôlo aparece, ele se mantém próximo à faixa de energia de um magnon. Estimamos que o seu afastamento do topo da faixa não excede as porcentagens apresentadas na tab. 4.1.

Tabela 4.1 Afastamento do estado ligado relativamente à energia do topo da banda de um magnon (em porcentagem).

rede	Aprox. I	Aprox. II
fcc	4%	5 %
sc	-	0,002%

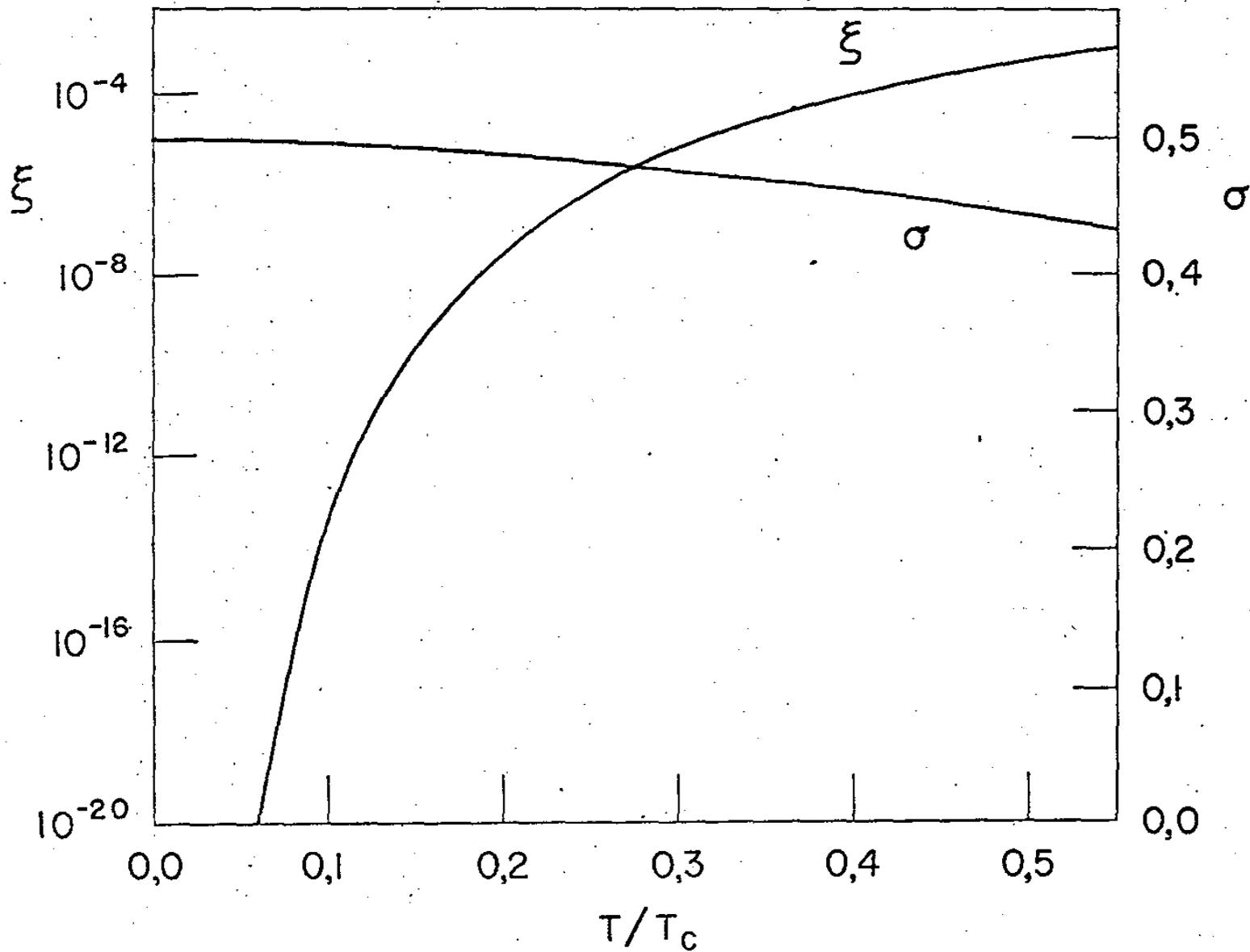


Fig. 4.3 A solução  $\lambda = -(1+\xi)$  da eq. (4.2), a baixa temperatura, para o caso da rede fcc, na aproximação de Dembinski. A magnetização  $\sigma$ , na mesma aproximação, é mostrada para efeito de comparação.

REFERÊNCIAS

1. T. Morita and T. Horiguchi, " Table of the Lattice Green's Function for the Cubic Lattices", Tohoku Univ., Sendai, - Japan (1971); J. Math. Phys. 12, 981 e 986 (1971).
2. S. Katsura, T. Morita, S. Inawashiro, T. Horiguchi and Y. Abe, J. Math. Phys. 12, 892 (1971).

## PARTE B

---

### *Antiferromagnetismo*

## INTRODUÇÃO

O antiferromagnetismo é um outro exemplo de fenômeno cooperativo que tem sido objeto de teorias mecânico-estatísticas. Entretanto, todos os tratamentos existentes são insatisfatórios devido às dificuldades matemáticas que aparecem quando se deseja tratar rigorosamente o problema da dinâmica de spin. As complicações são ainda maiores do que aquelas associadas ao tratamento do ferromagnetismo. Por exemplo, os efeitos cinemáticos introduzidos pela álgebra dos operadores de spin devem ser considerados já no estudo das propriedades mecânico-quânticas do estado fundamental <sup>(1)</sup>. Em contraste com o caso do modelo de Heisenberg de um ferromagneto, o parâmetro de ordem de longo alcance (magnetização de sub-rede) não é uma constante de movimento <sup>(2)</sup>. O estado de Néel (componente z dos spins alternando-se em sentidos opostos) não é nem o estado fundamental nem qualquer outro auto-estado da energia. As propriedades do estado fundamental não são ainda completamente compreendidas <sup>(3,4,5)</sup>, mesmo no caso mais simples da cadeia linear <sup>(6 - 9)</sup>. Embora a análise rigorosa de Bethe-Hülthén <sup>(6,7)</sup> para a cadeia linear possa dar a energia exata do estado fundamental e também informação sobre a ordem a curta distância <sup>(8)</sup>, o conhecimento da natureza da função de onda do estado fundamental não é completo, em particular no que se refere à ordem a longa distância <sup>(8,9)</sup>. Como consequência, o método das ondas de spin dá origem apenas a teorias aproximadas para o antiferromagnetismo. Apesar desta dificuldade, suas previsões sobre as propriedades de baixa temperatura do antiferromagneto são razoavelmente seguras <sup>(10-13)</sup>, e algumas tentativas para estender a teoria a temperaturas mais altas foram feitas com um certo sucesso <sup>(13)</sup>.

O problema de estados ligados de dois mágnons também foi investigado no caso do antiferromagnetismo <sup>(14 - 17)</sup>, apresentando, como é de se esperar, dificuldades consideráveis. Os resultados, embora não muito seguros devido às aproximações introduzidas, sugerem que não se deve esperar estados ligados no caso tridimensional isotrópico: partindo-se do modelo de Ising,

pode ser visto (15,16) que conforme os termos de intercâmbio transversais vão sendo introduzidos perturbativamente, os estados ligados tendem a desaparecer no contínuo de dois mágnons. As componentes transversais tendem, portanto, a destruir os estados ligados; e eles provavelmente desaparecem no caso isotrópico (15,16). Mais uma vez pode-se apreciar a importância dos efeitos de anisotropia na dinâmica dos momentos magnéticos e, em particular, na existência dos estados ligados de mágnons.

A técnica das funções de Green também tem sido extensivamente utilizada no tratamento do antiferromagneto de Heisenberg (15,17 - 23). Os métodos derivados dessa técnica são mais complicados do que no caso do ferromagnetismo. No que se refere à magnetização de sub-rede a baixa temperatura (18), não se encontra concordância entre os resultados de teorias de funções de Green (18,19) e teorias de ondas de spin (12,24).

Dembinski (18) também aplicou seu esquema de desacoplamento ao antiferromagneto de Heisenberg de spin 1/2. Antes de seu trabalho, a discordância entre resultados mencionada no parágrafo anterior já aparecia no termo dominante, em  $T^2$ , da série a baixa temperatura para a magnetização de sub-rede (19). A causa das discrepâncias foi atribuída por Dembinski (18) aos diferentes tratamentos dados à interação cinemática em cada aproximação. Contudo, a expansão em série a baixa temperatura para a magnetização de sub-rede obtida na ref. 18 difere, no termo proporcional a  $T^4$ , da fórmula de Oguchi dada pela teoria de ondas de spin (12). Dembinski atribuiu a esta disparidade de resultados uma origem cinemática, pois Oguchi (12) já havia mostrado que a interação dinâmica entre as ondas de spin antiferromagnéticas contribui somente com um termo proporcional a  $T^6$ . Todavia, permanece em aberto se o resultado de Dembinski é espúrio ou não (18).

Investigamos também, no presente trabalho, a existência de um estado ligado, tanto na aproximação de Dembinski da referência 18, quanto na modificada em analogia à aproximação II discutida na parte A. Foi-nos possível mostrar que ambas as aproximações não apresentam estado ligado para as duas redes cúbicas compatíveis com o modelo de duas sub-redes, isto é, para as redes sc e bcc.

Finalmente, cabe observarmos que, por fugir ao objeti

vo desta tese, não nos ocupamos do estudo das propriedades termodinâmicas do antiferromagneto de Heisenberg tratadas na aproximação de Dembinski modificada.

REFERÊNCIAS

1. R.P. Kenan, Phys. Rev. 159, 430 (1967); D.C. Herbert, J. Math. Phys. 10, 2255 (1969). O estudo dos efeitos cinemáticos para temperatura não nula é também consideravelmente mais difícil do que no caso do ferromagnetismo; ver, por exemplo, J. Szaniecki, Physica 31, 1357(1965) e Acta Phys. Pol. A40, 103 (1971); S.T. Dembinski, Physica 35, 119(1967); E.A.G. Armour, Physica 53, 304 (1971). Armour [última referência] tentou aplicar o método de Dyson-Wortis [F.J. Dyson, Phys.Rev. 102, 1217 e 1230 (1956); M. Wortis, Phys. Rev. 138, A1126 (1965)] ao cálculo das propriedades termodinâmicas do antiferromagneto de Heisenberg e mostrou que as condições que possibilitam um cálculo rigoroso no caso do ferromagneto não se verificam para o antiferromagneto.
2. T. Nagamiya, K. Yosida and R. Kubo, Adv. Phys. 4, 1 (1955).
3. P.W. Anderson, Phys. Rev. 86, 694 (1952).
4. J.M. Ziman, Proc. Phys. Soc. (London) A65, 540 (1952).
5. H.L. Davis, Phys. Rev. 120, 789 (1960);  
R.R. Bartkowski, Phys. Rev. B 5, 4536(1972);  
M.F. Collins and V.K. Tondon, Can. J. Phys. 50, 2991(1972).
6. H.A. Bethe, Z. Physik 71, 205 (1931) - citado na ref. 2.
7. L. Hulthén, Arkiv. Mat. Astron. Fysik 26A (11), 1(1938)- citado nas refs. 2 e 20.
8. R. Orbach, Phys. Rev. 112, 309 (1958).
9. S. Rodriguez, Phys. Rev. 116, 1474 (1959).
10. J.M. Ziman, Proc. Phys. Soc. (London) A65, 548 (1952).
11. R. Kubo; Phys. Rev. 87, 568 (1952).

12. T. Oguchi, Phys. Rev. 117, 117 (1960).
13. O. Nagai and T. Tanaka, Phys. Rev. 188, 821 (1969) e referências contidas neste artigo.
14. K.M. Salikhov, Phys. Met. Metallography 24 (1), 9 (1967).
15. R.J. Elliott and A.J. Smith, J. Phys. (Paris) 32, C1 - 585 (1971).
16. T. Oguchi, J. Phys. Soc. Japan 31, 394 (1971); T. Oguchi - and T. Ishikawa, J. Phys. Soc. Japan 34, 1486 (1973).
17. Y. Endo and T. Ishikawa, J. Phys. Soc. Japan 37, 681 (1974).
18. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1435 (1968).
19. Fu-cho Pu, Dokl. Akad. Nauk SSSR 130, 1244 (1960); 131, 546 (1960) [trad.: Soviet. Phys. - Doklady 5, 128, 321 (1960)] ; F.B. Anderson and H.B. Callen, Phys. Rev. 136, A1068 (1964); K. H. Lee and S.H. Liu, Phys. Rev. 159, 390 (1967)-citados - na ref. 18.
20. D.K. Ghosh, Phys. Rev. B 8 , 392 (1973).
21. R.H. Swendsen, Phys. Letters 46A, 63 (1973).
22. F. Leoni, Nuovo Cim. 18B, 277 (1973).
23. A. Bunde and W. Biem, Z. Physik 269, 65 (1974).
24. S.H. Liu, Phys. Rev. 142, 267 (1966).

## CAPÍTULO V

### A APROXIMAÇÃO DE DEMBINSKI E A CONDIÇÃO DE ESTADO LIGADO PARA O ANTIFERROMAGNETO DE SPIN 1/2

O modelo adotado corresponde a um arranjo cúbico simples ou de corpo centrado de  $N$  pontos que formam duas sub-redes magnéticas interpenetrantes. Convecionemos que  $j, m$  e  $m'$  indicarão pontos da sub-rede denotada por 1, enquanto que  $\ell, n$  e  $n'$  corresponderão a pontos da sub-rede 2.

O hamiltoniano do sistema é dado por (considera-se o campo externo nulo):

$$H = + \sum_{\ell m} J(\ell, m) \underline{S}(\ell) \cdot \underline{S}(m) \quad , \quad (5.1)$$

onde  $J(\ell, m)$  é definido como na eq. (1.3). Note-se que, pela convenção estabelecida,  $m$  na eq. (5.1) percorre os  $N/2$  pontos da sub-rede 1, ao mesmo tempo que  $\ell$ , de acordo com a definição (1.3), percorre efetivamente os pontos da sub-rede 2 que sejam primeiros vizinhos de  $m$ .

Vamos introduzir para cada sub-rede duas funções de Green transversais. Para a sub-rede 1:

$$G(1, m, m', t) = \langle\langle S^+(m; t) \mid S^-(m'; 0) \rangle\rangle \quad (5.2)$$

e

$$F(1, n, m', t) = \langle\langle S^+(n; t) \mid S^-(m'; 0) \rangle\rangle; \quad (5.3)$$

para a sub-rede 2:

$$G(2, n, n', t) = \langle\langle S^+(n; t) \mid S^-(n'; 0) \rangle\rangle \quad (5.4)$$

e

$$F(2,m,n',t) = \langle\langle S^+(m;t) | S^-(n';0) \rangle\rangle. \quad (5.5)$$

As transformadas temporais de Fourier de  $G(1)$  e  $F(1)$  obedecem ao seguinte sistema de equações de movimento <sup>(1)</sup>:

$$\begin{aligned} \omega G(1,m,m',\omega) &= (\sigma(1)/\pi) \delta_{mm'} + \\ &+ \sum_{\ell} J(m,\ell) \{ \langle\langle S^z(m) S^+(\ell) | S^-(m'),\omega \rangle\rangle - \\ &- \langle\langle S^z(\ell) S^+(m) | S^-(m'),\omega \rangle\rangle \} \end{aligned} \quad (5.6)$$

e

$$\begin{aligned} \omega F(1,n,m',\omega) &= \sum_j J(j,n) \{ \langle\langle S^z(n) S^+(j) | S^-(m'),\omega \rangle\rangle - \\ &- \langle\langle S^z(j) S^+(n) | S^-(m'),\omega \rangle\rangle \}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

com

$$\sigma(1) = \langle S^z(m) \rangle.$$

O desacoplamento para as eqs. (5.6) e (5.7) proposto por Dembinski <sup>(1)</sup> é dado, por analogia ao caso do ferromagnetismo, pelo seguinte:

$$\begin{aligned} \langle\langle S^z(m) S^+(\ell) | S^-(m'),\omega \rangle\rangle &= \sigma(1) F(1,\ell,m',\omega) + \\ &- 2\sigma(1) \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle G(1,m,m',\omega) + \end{aligned}$$

$$+ \delta_{mm'} A(1) F(1, \ell, m', \omega) \quad (5.8.a)$$

e

$$\begin{aligned} \langle S^z(\ell) S^+(m) | S^-(m'), \omega \rangle &= \sigma(2) G(1, m, m', \omega) + \\ &- 2\sigma(2) \langle S^-(\ell) S^+(m) \rangle F(1, \ell, m') \quad , \end{aligned} \quad (5.8.b)$$

com a definição:

$$A(1) = \sigma(1) (1 - 2\sigma(1)) \quad (5.9)$$

Para as funções  $G(2)$  e  $F(2)$  têm-se equações análogas às equações (5.6), (5.7) e (5.8) [que podem ser obtidas destas - pela troca simultânea de índices :  $1 \leftrightarrow 2$ ,  $j \leftrightarrow \ell$ ,  $m \leftrightarrow n$  e  $m' \leftrightarrow n'$ ]. A função  $A(2)$  correspondente à eq. (5.9) foi tomada, na ref. (1), como sendo

$$A(2) = \sigma(2) (1 + 2\sigma(2)), \quad (5.10)$$

para que o sistema de quatro equações que envolvem  $G(1)$ ,  $F(1)$ ,  $G(2)$  e  $F(2)$  impliquem, pelo método iterativo de solução<sup>(1)</sup>, equações de autoconsistência independentes dos índices 1 e 2 ao se fazer a adoção:

$$\sigma(1) = -\sigma(2) \equiv \sigma > 0 \quad (5.11)$$

Cumpre-nos ressaltar, no entanto, que a escolha (5.9)-(5.10), embora satisfaça a exigência mencionada acima, não leva

as funções de correlação  $\langle (S^-(m))^2 S^+(m) S^-(\ell) \rangle$  e  $\langle (S^-(\ell))^2 S^+(\ell) S^+(m) \rangle$  a um resultado simétrico. Com efeito, podemos obter da eq.(5.8.a) e da sua correspondente para a sub-rede 2 o seguinte resultado :

$$\langle (S^-(m))^2 S^+(m) S^+(\ell) \rangle = (1/2 - \sigma) \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle$$

$$\langle (S^-(\ell))^2 S^+(\ell) S^+(m) \rangle = (1/2 + \sigma - 4\sigma^2) \langle S^-(\ell) S^+(m) \rangle,$$

quando se consideram as eqs. (5.9) - (5.11).

A modificação do desacoplamento de Dembinski análoga à da eq. (2.3) corresponde a se inserir no segundo membro de (5.8.a) a correlação entre pares de primeiros vizinhos:

$$\delta_{mm'} 2\sigma(1) \langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle F(1, \ell, m', \omega) \quad (5.12)$$

(procedência análoga para a sub-rede 2).

Substituindo-se as eqs. (5.8) (ou a modificação sugerida por (5.12)) nas eqs. (5.6) e (5.7) e definindo-se as transformadas de Fourier:

$$J(\ell, m) = (2/N) \sum_{\underline{k}} J(\underline{k}) \exp[i\underline{k} \cdot (\underline{R}(\ell) - \underline{R}(m))] ,$$

$$G(1, m, m', \omega) = (2/N) \sum_{\underline{k}} G(1, \underline{k}, \omega) \exp[i\underline{k} \cdot (\underline{R}(m) - \underline{R}(m'))] ,$$

$$F(1, n, m') = (2/N) \sum_{\underline{k}} F(1, \underline{k}, \omega) \exp[i\underline{k} \cdot (\underline{R}(n) - \underline{R}(m'))]$$

e

$$\langle S^-(m) S^+(\ell) \rangle = (2/N) \sum_{\underline{k}} \psi(\underline{k}) \exp[i\underline{k} \cdot (\underline{R}(m) - \underline{R}(\ell))]$$

(procedimento análogo para a sub-rede 2), chega-se ao seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} [\omega + (-1)^s J(0)\sigma b] G(s, \underline{k}, \omega) + (-1)^s J(\underline{k})\sigma b F(s, \underline{k}, \omega) = \\ = (-1)^{s+1} \{ \alpha / \pi + [A + \xi \sigma (1-b)] (2/N) \sum_{\underline{q}} J(\underline{q}) F(s, \underline{q}, \omega) \} \end{aligned} \quad (5.13.a)$$

$$\begin{aligned} (-1)^{s+1} J(\underline{k})\sigma b G(s, \underline{k}, \omega) + [\omega + (-1)^{s+1} J(0)\sigma b] F(s, \underline{k}, \omega) = \\ = (-1)^s [A + \xi \sigma (1-b)] (\gamma(\underline{k}) / \gamma(0)) (2/N) \sum_{\underline{q}} J(\underline{q}) F(s, \underline{q}, \omega) \end{aligned} \quad (5.13.b)$$

onde

$$s = 1, 2$$

$$A = \sigma(1 - 2\sigma) \quad (5.14)$$

$$b = 1 - 2(2/N) \sum_{\underline{k}} (\gamma(\underline{k}) / \gamma(0)) \psi(\underline{k}) \quad (5.15)$$

$$\xi = 0 \quad \text{na aproximação de Dembinski}$$

$$= 1 \quad \text{na aproximação de Dembinski modificada.}$$

Para se obterem as eqs. (5.13) fez-se uso também das eqs. (5.9) - (5.11).

Podemos manipular as eqs. (5.13) de forma a obtermos:

$$\begin{aligned}
 [\omega^2 - E^2(\underline{k})] F(s, \underline{k}, \omega) &= -(\sigma/\pi) J(\underline{k}) \sigma b + \\
 &+ (-1)^S [A + \xi \sigma (1-b)] \omega (\gamma(\underline{k})/\gamma(0)) (2/N) \sum_q J(\underline{q}) F(s, \underline{q}, \omega)
 \end{aligned}
 \tag{5.16.a}$$

$$\begin{aligned}
 [\omega^2 - E^2(\underline{k})] G(s, \underline{k}, \omega) &= (-1)^{S+1} \{ (\sigma/\pi) [\omega + (-1)^{S+1} J(0) \sigma b] \} + \\
 &+ [A + \xi \sigma (1-b)] [\omega + (-1)^{S+1} J(0) \sigma b \omega^2(\underline{k})] (2/N) \sum_q J(\underline{q}) F(s, \underline{q}, \omega)
 \end{aligned}
 \tag{5.16.b}$$

com

$$E(\underline{k}) = J(0) \sigma b \omega(\underline{k}) \tag{5.17}$$

$$\omega(\underline{k}) = \sqrt{1 - (\gamma(\underline{k})/\gamma(0))^2} \tag{5.18}$$

e  $\gamma(\underline{k})$  definido de modo análogo ao da eq. (2.9.c).

É interessante notar-se que a eq. (5.16.a) lembra a eq. (2.8). Resolvendo-se formalmente a eq. (5.16.a) de modo semelhante ao que se descreveu no início do cap. III, podemos obter a seguinte condição de estado ligado:

$$1 + (-1)^{s+1} [A + \xi \sigma (1-b)] J(0) \omega \times \\ \times (2/N) \sum_q [\gamma(q)/\gamma(0)]^2 [\omega^2 - E^2(q)]^{-1} = 0 \quad (5.19)$$

A faixa de energia renormalizada de um m̃agnon ẽ deter-  
minada por

$$- J(0)\sigma b \leq \omega \leq J(0)\sigma b \quad (5.20)$$

Nosso objetivo, neste capitulo, ẽ verificar que (no limite de  $N \rightarrow \infty$ ) a eq. (5.19) ño admite soluç̃o externa ao intervalo (5.20), isto ẽ, que a aproximaç̃o de Dembinski ño conduz a nenhum estado ligado para o antiferromagneto de Heisenberg. De fato, definindo-se

$$E = \omega / (J(0)\sigma b) ,$$

podemos reescrever a eq. (5.19) na forma conveniente dada abaixo:

$$1 + (-1)^{s+1} I(E) [1 - 2\sigma + \xi(1-b)] / b = 0 , \quad (5.21)$$

onde

$$I(E) = (2/N) \sum_q E [1 - \omega^2(q)] [E^2 - \omega^2(q)]^{-1} . \quad (5.22)$$

Subentende-se na eq. (5.22) que a variável E est̃a acrescentada de uma parte imaginária de forma que  $I(E)$  ẽ dado pelo limite da express̃o (5.22) quando esta parte imaginária tende a zero. A funç̃o  $I(E)$ , quando  $N \rightarrow \infty$ , ẽ complexa no interior da faixa,  $|E| < 1$ , e ẽ real caso contrário.

Como  $I(\pm 1) = \pm 1$  e  $|I(E)|$  ẽ decrescente para  $|E| \geq 1$ , concluimos que a eq. (5.21) ño admite soluç̃o pois  $1 < b < 2$  (ver estimativa no apêndice E) e conseqüentemente

$$- 1 < -\frac{2\sigma}{b} \leq \frac{1-2\sigma+\xi(1-b)}{b} < 1$$

Vemos, portanto, que o tratamento dado por ambos os esquemas às correlações não conduz, contrastando com o caso - do ferromagneto, à previsão de um estado ligado para as duas - redes cúbicas (sc e bcc) compatíveis com o modelo de duas sub-redes. Sob este aspecto, encontra-se um paralelo com os resultados dos cálculos mecânico-quânticos do espectro de dois m $\grave{a}$ gnons: os estados ligados não são esperados no caso do antiferromagneto isotr $\acute{o}$ pico<sup>(2,3)</sup>, enquanto que eles aparecem no caso do ferro - magneto<sup>(4,5)</sup>.

REFERÊNCIAS

1. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1435 (1968).
2. R.J. Elliott and A.J. Smith, J. Phys. (Paris) 32, C1 -585(1971).
3. T. Oguchi, J. Phys. Soc. Japan 31, 394 (1971);  
T. Oguchi and T. Ishikawa, J. Phys. Soc. Japan 34, 1486(1973).
4. M. Wortis, Phys. Rev. 132, 85 (1963).
5. A.W. Saenz and W.W. Zachary, J. Math. Phys. 14, 1837 (1973).

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

## CONSIDERAÇÕES FINAIS.

Verificamos no capítulo IV que as duas aproximações do tipo de Dembinski prevêem para a função de Green transversal de primeira ordem (no caso do ferromagnetismo) um pólo que se localiza acima da faixa de energia renormalizada de um mágnon. Este pólo é uma peculiaridade destas duas aproximações. Sua existência, no entanto, reforça o papel importante desempenhado pela cinemática de spin na formação de estados ligados de mágmons, pois, como vimos, o caráter de segunda ordem que estas aproximações conferem à estrutura da função de Green é uma decorrência do melhor tratamento que se procura dar aos aspectos cinemáticos do problema.

Uma peculiaridade destas aproximações de primeira ordem, que se pode considerar satisfatória, é a forma apresentada na eq. (3.1), a saber,

$$[\omega - \epsilon(\underline{k})] G(\underline{k}, \omega) = \sigma / \pi + L(\underline{k}, \omega) \quad ,$$

forma esta que é uma consequência necessária da cinemática de spin (1,2).

Os esquemas do tipo de Dembinski dados pelas eqs. (2.2), (2.3) e (5.8) não permitem prever, evidentemente, um bom comportamento das excitações nas proximidades da temperatura de transição. Entretanto, é desejável que uma aproximação de primeira ordem introduza alguma dependência de comprimento de onda na renormalização da energia dos mágmons (1,3,4). Logo, seria oportuno tentar uma modificação do esquema de Dembinski de modo a acrescentar este tipo de informação às boas características que o esquema já apresenta.

Lines (1) analisou o problema da renormalização da energia dos mágmons no caso do ferromagnetismo, utilizando uma aproximação *ad hoc*, da forma

$$[\omega - \epsilon(\underline{k})] G(\underline{k}, \omega) = \sigma / \pi \quad ,$$

onde  $\epsilon(\underline{k})$  contém um fator de renormalização dependente de  $|\underline{k}|$ . Este fator é introduzido mediante um parâmetro L (comprimento de coe-

rência) de modo que m̄agnons de comprimento de onda,  $\lambda$ , maior do que  $L$  são tratados na aproximação RPA, e aqueles com  $\lambda$  menor do que  $L$ , numa aproximação sugerida pela teoria das ondas de spin <sup>(5)</sup>. O comprimento de coerência  $L$ , a ser determinado autoconsistentemente, deve tornar-se infinito no limite de baixa temperatura, para se obter a essência da teoria das ondas de spin interagentes <sup>(6)</sup>, e deve tender a zero no limite de alta temperatura, a fim de recobrar-se a aproximação RPA.

Uma possibilidade de modificação do esquema de Dembinski seria, portanto, a de tentar estender a este esquema o tratamento proposto por Lines.

REFERÊNCIAS

1. M.E. Lines, Phys. Rev. B 3, 1749 (1971).
2. R.A. Tahir-Kheli, Phys. Lett. 11, 275 (1964); Phys. Rev. 132, 689 (1963).
3. S. Funahashi, F. Moussa and S. Steiner, Solid St. Comm. 18, 433 (1976).
4. J. Skalyo, Jr., G. Shirane, R.J. Birgeneau and H.J. Guggenheim, Phys. Rev. Lett. 23, 1394 (1968); P. Martel, R.A. Cowley and R. W.H. Stevenson, J. Appl. Phys. 39, 1116 (1968).
5. Argumenta-se na ref. 1 que as teorias de ondas de spin indicam, a baixa temperatura, uma renormalização independente do comprimento de onda e proporcional a  $\langle \underline{S}_0 \cdot \underline{S}_{\underline{\delta}} \rangle^{1/2}$  ( $\underline{\delta}$  é um vetor de translação primitivo).

## APÉNDICES

## APÊNDICE A

### CÁLCULO DAS EQUAÇÕES (1.50) e (1.51).

Consideremos dois operadores A e B. A função de correlação dependente do tempo,  $\langle B(0)A(t) \rangle$ , e a transformada de Fourier da função de Green,

$$G(t) = \langle\langle A(t) | B(0) \rangle\rangle ,$$

relacionam-se por meio da seguinte equação<sup>(1)</sup>:

$$\langle B(0)A(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{+\infty} (G(\omega+i\epsilon) - G(\omega-i\epsilon)) (\exp\beta\omega - 1)^{-1} \exp(-i\omega t) d\omega . \quad (A.1)$$

(A equação acima é subentendida no limite de  $\epsilon \rightarrow 0^+$ ). Logo o conhecimento da função de Green dada pela eq. (1.47) na aproximação da eq. (1.49),

$$G(\underline{k}, \omega) = (\sigma/\pi) (\omega - \Omega(\underline{k}))^{-1} ,$$

provê a função de correlação  $\langle b^+(\underline{k})b(\underline{k}) \rangle$ , através do cálculo especificado na eq. (A.1):

$$\langle b^+(\underline{k})b(\underline{k}) \rangle = 2\sigma (\exp\beta\Omega(\underline{k}) - 1)^{-1} . \quad (A.2)$$

No cálculo de (A.2) utilizou-se a bem conhecida representação da função  $\delta$

$$(2\pi/i) \delta(x) = (x+i\epsilon)^{-1} - (x-i\epsilon)^{-1} . \quad (A.3)$$

Das eqs. (1.46) e (A.2) resulta a eq. (1.50):

$$1/2\sigma = 1 + (2/N) \sum_{\underline{k}} (\exp\beta\Omega(\underline{k}) - 1)^{-1} . \quad (A.4)$$

A fim de simplificar-se a notação na eq. (A.4), definamos:

$$\phi = (1/N) \sum_{\underline{k}} (\exp\beta\Omega(\underline{k}) - 1)^{-1} , \quad (A.5)$$

donde

$$\sigma = 1/(2(1+2\phi)) \quad (A.6)$$

No limite de baixa temperatura,  $\phi$  admite a seguinte expansão (2):

$$\phi = a_0 \theta^{3/2} + a_1 \theta^{5/2} + a_2 \theta^{7/2} + o(\theta^{9/2}) \quad (A.7)$$

(os detalhes do cálculo para a rede sc podem ser encontrados no apêndice B da ref. 3). Os coeficientes  $a_i$  e  $\theta$  estão definidos nas eqs. (2.12).

Expandindo-se a eq. (A.6) em potências de  $\phi$  e substituindo-se (A.7), obtêm-se a eq. (1.51):

$$\sigma = 1/2 - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} + 2a_0^2 \theta^3 + 4a_0 a_1 \theta^4 + o(\theta^{9/2}) \quad (A.8)$$

## REFERÊNCIAS

1. D.N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk 71, 71 (1960). [trad.: Soviet Phys. - Uspekhi 3, 320 (1960)].
2. S.T. Dembinski; Can. J. Phys. 46, 1021 (1968).
3. J.G. Ramos, Tese de Doutorado, USP (1970).

## APÊNDICE B

### OS PÓLOS DA FUNÇÃO DE GREEN NO CASO DE N FINITO.

Neste apêndice investigaremos, com algum detalhe, os pólos da função de Green na eq. (3.1) para o caso de uma rede finita<sup>(1)</sup>.

O campo externo será tomado igual a zero por simplicidade de notação.

Como

$$\sum_{\underline{k}} \gamma(\underline{k}) = 0 ,$$

é fácil ver que

$$\begin{aligned} (1/N) \sum_{\underline{q}} (\gamma(\underline{q})/\gamma(0)) \omega[\omega - \epsilon(\underline{q})]^{-1} &= \\ &= (1/N) \sum_{\underline{q}} (\gamma(\underline{q})/\gamma(0)) \epsilon(\underline{q}) [\omega - \epsilon(\underline{q})]^{-1} , \end{aligned} \quad (B.1)$$

donde segue uma expressão para a função de Green, útil à nossa discussão:

$$G(\underline{k}, \omega) = (\sigma/\pi\omega) [1 + \epsilon(\underline{k}) (\omega - \epsilon(\underline{k}))^{-1} D^{-1}(\omega)] . \quad (B.2)$$

As linhas usadas nos somatórios na eq. (B.1) servem para indicar que termos correspondentes a alguns valores do vetor de onda estão ausentes. De fato, termos que correspondam a  $\gamma(\underline{q}) = 0$ , no primeiro membro, e a  $\gamma(\underline{q}) = 0$  ou a  $\epsilon(\underline{q}) = 0$ , no segundo membro, não aparecem em (B.1).

Vamos repetir aqui a equação (3.3) de definição de  $D(\omega)$ :

$$D(\omega) = 1 - R(n) (2/N) \sum_{\underline{q}} (\gamma(\underline{q})/\gamma(0)) \Omega(\underline{q}) [\omega - \epsilon(\underline{q})]^{-1} . \quad (B.3)$$

Podem-se ver da equação acima que

$$D(0) = 1 + O(1/N) ;$$

portanto,  $\omega = 0$  é pólo simples de  $G(\underline{k}, \omega)$  qualquer que seja o vetor de onda; além disso:

$$\begin{aligned} \text{Res } G(\underline{k}, 0) &= \sigma/\pi, & \text{para } \underline{k} = 0 \\ &= (\sigma/\pi)(1-D^{-1}(0)) = O(1/N), & \text{para } \underline{k} \neq 0. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Um pólo na origem é um resultado espúrio para funções de Green definidas via comutadores <sup>(2)</sup>. Esta inconveniência pode ser removida, no caso presente, pela introdução de um pequeno campo magnético externo. De acordo com (B.4), o pólo deslocado contribui para a função de correlação  $\psi(\underline{k})$  com um termo de  $O(1/N)$ , sendo, portanto, irrelevante no limite termodinâmico.

Considere-se agora um vetor de onda  $\underline{k}$  tal que  $\gamma(\underline{k}) = 0$  ou equivalentemente  $\epsilon(\underline{k}) = 2\sigma PJ(0)$ . Decorre de (B.2) e (B.3) que  $\omega = 2\sigma PJ(0)$  é pólo simples de  $G(\underline{k}, \omega)$ .

Se  $\underline{k}$  é diferente de zero e dos valores mencionados acima, a eq. (B.3) garante que  $\omega = \epsilon(\underline{k})$  é uma singularidade removível de  $(\omega - \epsilon(\underline{k}))D(\omega)$  e, conseqüentemente, não é um pólo de  $G(\underline{k}, \omega)$ .

Os outros pólos de  $G(\underline{k}, \omega)$  aparecem quando

$$D(\omega) = 0 \quad (\text{B.5})$$

Os estados ligados investigados no capítulo IV são soluções da eq. (B.5) no limite de  $N \rightarrow \infty$ .

Sejam  $0 = \epsilon_0 < \epsilon_1 < \dots < \epsilon_M$  os valores distintos assumidos por  $\epsilon(\underline{q})$  e seja  $n_j$  o número de diferentes vetores  $\underline{q}$  para os quais  $\epsilon(\underline{q}) = \epsilon_j$ . Uma definição análoga aplica-se aos  $\Omega(\underline{q})$ 's. Com estas definições, reescrevemos a eq. (B.5) como se segue:

$$\sigma P/R = C(\omega/2\sigma P), \quad (\text{B.6})$$

onde

$$C(\Omega) = (1/N) \sum_{j=1}^M n_j (\gamma_j/\gamma_0) \Omega_j (\Omega - \Omega_j)^{-1} \quad (\text{B.7})$$

A linha na equação acima foi usada para indicar a omissão de algum  $j$  para o qual  $\gamma_j = 0$ .

A função  $C(\Omega)$  tem a forma genérica mostrada na fig. B.1. A figura refere-se ao caso particular de uma rede unidimensional com  $N = 20$  pontos que é bastante geral para servir de ilustração. As retas verticais indicam na figura os valores distintos de  $\Omega_j$ . Veja-se que não há singularidade no ponto médio da faixa, devido à existência de um  $\gamma_j$  nulo. A localização de  $\sigma_{P/R}$  sobre o eixo vertical determina as soluções da eq. (B.5) (note-se a existência de uma solução acima da faixa). Quanto maior for o valor de  $N$ , mais estas soluções se aproximam dos  $\epsilon_j$ 's. Devemos também observar que todas estas soluções são pólos de  $G(\underline{k}, \omega)$  para cada valor de  $\underline{k}$  não nulo.

## REFERÊNCIAS

1. M.A. Tenan and J.G. Ramos, Phys. St. Sol. (b) 72, K147 (1975).
2. J.G. Ramos and A.A. Gomes, Nuovo Cim. 3A, 441 (1971).

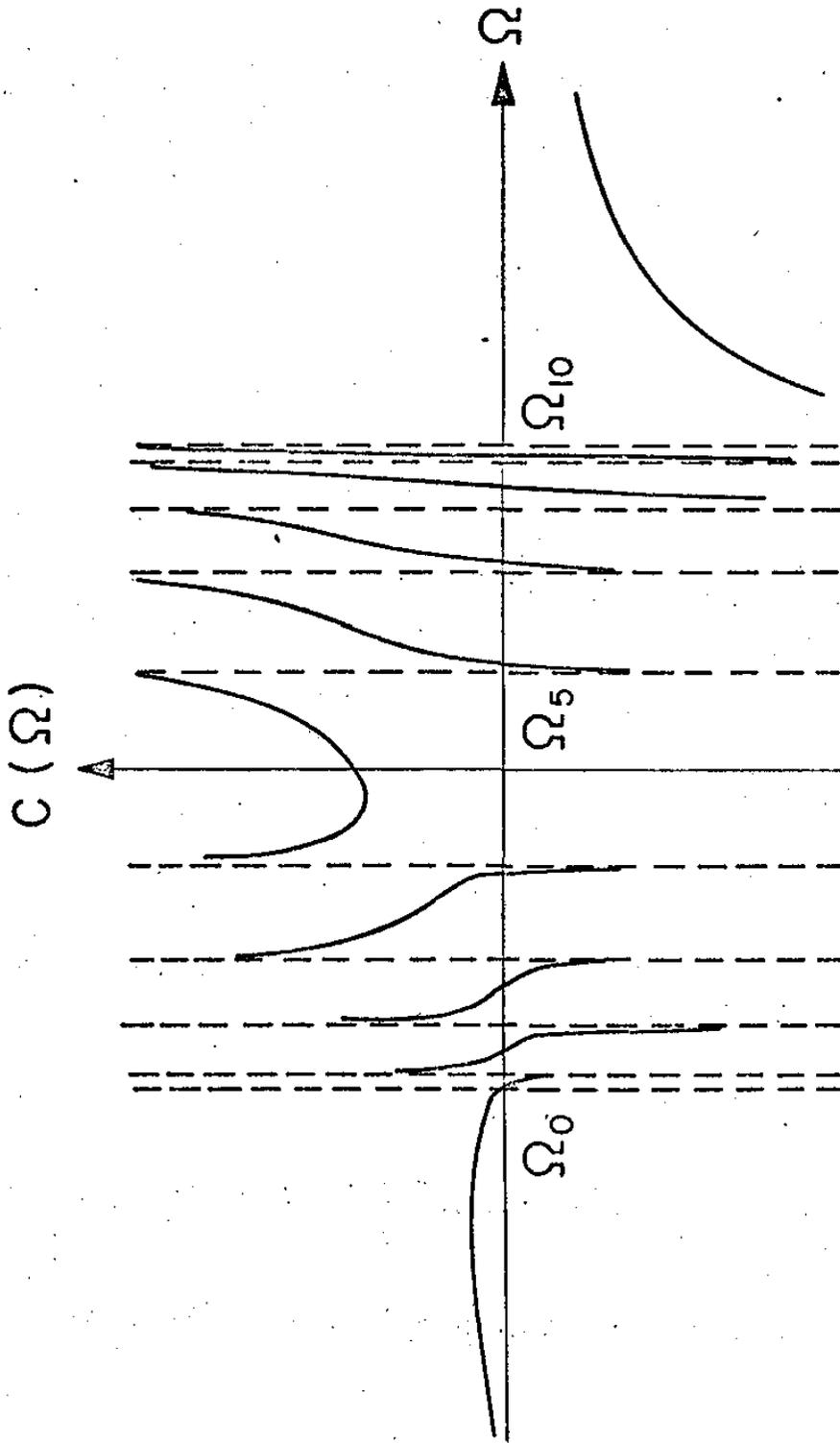


Fig. B.1 A função  $C(\Omega)$ , com  $\Omega = \omega/2\sigma P$  considerado uma variável real, para uma cadeia linear com  $N = 20$  pontos.

## APÊNDICE C

### CÁLCULO DA FUNÇÃO P PELO MÉTODO ITERATIVO

O método iterativo usado nas refs. (1) e (2) para a solução da eq. (2.8) implica o seguinte resultado para a eq.(2.9.b) que define a função P:

$$P = 1 + (4\sigma/N) \sum_{\underline{k}} [\gamma(\underline{k})/\gamma(0)] \phi(\underline{k}) + 4\sigma \sum_{n=1}^{\infty} [(2\sigma-1-n)/P]^n F_{n+1}, \quad (C.1)$$

onde

$$\phi(\underline{k}) = (\exp \beta \epsilon(\underline{k}) - 1)^{-1} \quad (C.2)$$

e

$$F_{n+1} = (1/\gamma(0)N)^{n+1} \sum_{\underline{k}_1 \dots \underline{k}_{n+1}} \gamma(\underline{k}_1) \Omega(\underline{k}_1) \dots \Omega(\underline{k}_n) \gamma(\underline{k}_{n+1}) \times \sum_{m=1}^{n+1} [W'_{n+1}(\Omega(\underline{k}_m))]^{-1} \phi(\underline{k}_m), \quad (C.3)$$

com

$$W_{n+1}(z) = \prod_{m=1}^{n+1} (z - \Omega(\underline{k}_m))$$

$W'$  na eq. (C.3) indica a derivada de primeira ordem do polinômio  $W$ . O campo magnético externo é considerado nulo.

#### A. Expansão a Baixa Temperatura

Vamos desenvolver para a função  $P$  uma expansão a baixa temperatura até  $O(T^4)$ . Para tanto, basta que se considere apenas o primeiro termo da série em (C.1) (1). A função  $P$ , nesta aproximação, pode ser reescrita na forma:

$$P = 1 + 4\sigma\phi - 4\sigma E_1 + 4\sigma [(2\sigma-1-n)/P] F_2, \quad (C.4)$$

onde

$$\phi = (1/N) \sum_{\underline{k}} \phi(\underline{k})$$

e

$$\bar{E}_1 = (1/N) \sum_{\underline{k}} (\Omega(\underline{k})/J(0)) \phi(\underline{k})$$

As expansões a baixa temperatura para as funções  $\phi$ ,  $\bar{E}_1$  e  $F_2$  estão bem estabelecidas na ref. (1); seus resultados são:

$$\phi = a_0 x^{3/2} + a_1 x^{5/2} + a_2 x^{7/2} + o(\theta^{9/2}) \quad , \quad (C.5)$$

$$\bar{E}_1 = (4/3) a_1 x^{5/2} + (5/4w) a_2 x^{7/2} + o(\theta^{9/2}) \quad , \quad (C.6)$$

$$F_2 = -2 \bar{E}_1 [F(-1) - 1] + o(\theta^{7/2}) \quad , \quad (C.7)$$

onde

$$F(-1) = (1/N) \sum_{\underline{k}} (\Omega(\underline{k})/J(0))^{-1} = 1,516 \quad , \quad \text{para sc}$$

$$= 1,393 \quad , \quad \text{para bcc}$$

$$= 1,345 \quad , \quad \text{para fcc.}$$

Os coeficientes  $a_i$ , a temperatura reduzida  $\theta$  e  $w$  encontram-se definidos nas eqs. (2.12);

$$x = \theta/2\sigma P$$

Com as equações (C.5) - (C.7) substituídas em (C.4), pode-se obter a seguinte expansão assintótica para  $P$ :

$$P = 1 + 2a_0 \theta^{3/2} - (2/3) a_1 \theta^{5/2} +$$

$$- 4a_0^2 \theta^3 + (2 - 5/2w) a_2 \theta^{7/2} +$$

$$+ (16/3) [1 - 2\alpha + 2\alpha F(-1)] a_0 a_1 \theta^4 +$$

$$+ o(\theta^{9/2}) \quad , \quad (C.8)$$

com

$$\begin{aligned} \alpha &= 1 & , & \text{ para a aproximação I,} \\ &= 2 & , & \text{ para a aproximação II.} \end{aligned}$$

B. O Valor Limite  $P_C$  de  $P$  em  $T_C$ .

A função  $\phi(\underline{k})$  na eq. (C.2) admite a seguinte expansão no limite de  $T \rightarrow T_C$  e  $\sigma \rightarrow 0$ :

$$\phi(\underline{k}) = (k_B T / 2\sigma \Omega(\underline{k}))^{-1/2} + o(\sigma)$$

Neste limite, a eq. (C.1) se reduz a

$$\begin{aligned} P &= 1 + (2k_B T / P) \left\{ (1/N) \sum_{\underline{k}} (\gamma(\underline{k}) / \gamma(0)) (1/\Omega(\underline{k})) + \right. \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left[ (2\sigma - 1 - n) / P \right]^n (1/\gamma(0) N)^{n+1} \sum_{\underline{k}_1, \dots, \underline{k}_{n+1}} \gamma(\underline{k}_1) \Omega(\underline{k}_1) \dots \Omega(\underline{k}_n) \gamma(\underline{k}_{n+1}) \\ &\times \sum_{m=1}^{n+1} \left[ \Omega(\underline{k}_m) W'_{n+1}(\Omega(\underline{k}_m)) \right]^{-1} \left. \right\} + o(\sigma) \end{aligned} \quad (C.10)$$

Dado que (1)

$$\sum_{m=1}^{n+1} \left[ \Omega(\underline{k}_m) W'_{n+1}(\Omega(\underline{k}_m)) \right]^{-1} = \frac{(-1)^{n+2}}{\pi \prod_{m=1}^{n+1} \Omega(\underline{k}_m)}$$

então se conclui que a série na eq. (C.10) se anula, pois

$$\sum_{\underline{k}} \gamma(\underline{k}) = 0$$

Tomando-se o limite de (C.10) quando  $T \rightarrow T_C$  e  $\sigma \rightarrow 0$ , obtêm-se a seguinte equação a ser satisfeita por  $P$ :

$$P_C^2 - P_C - (2k_B T_C / J(0)) [F(-1) - 1] = 0 \quad (C.11)$$

Os valores numéricos da solução de (C.11) são apresentados na tabela C.1.

Tabela C.1 - Valores numéricos de  $P_c$  obtidos da eq. (C.11)

rede	Aprox.I	Aprox.II
sc	1,27	1,25
bcc	1,23	1,22
fcc	1,21	1,20

REFERENCIAS

1. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1021 (1968).
2. M.D. Coutinho Filho and I.P. Fittipaldi, Phys. Rev. B 7, 4941 (1973).

## APÊNDICE D

### ANÁLISE DA EQ. (4.2)

Vamos escrever explicitamente a condição de estado ligado, eq. (4.2), para as duas aproximações do tipo de Dembinski:

$$g(\lambda) = P/(1-2\sigma) \quad , \quad \text{na aproximação I} \quad (D.1)$$

$$g(\lambda) = 1/(1-2\sigma/P) \quad , \quad \text{na aproximação II.} \quad (D.2)$$

#### A. Redes sc e bcc.

Como se pode ver da fig. 4.1,  $g(\lambda)$  é uma função limitada na região externa à faixa de um magnon, tanto para a rede sc quanto para a rede bcc. O valor máximo,  $\bar{g}$ , de  $g(\lambda)$  para  $\lambda$  negativo pode ser encontrado na tabela D.1.

Tabela D.1 - Valor máximo,  $\bar{g}$ , de  $g(\lambda)$  para  $\lambda < 0$   
(externamente à faixa)

rede:	sc	bcc
$\bar{g}$ :	~ 1,03	~ 0,79

Os segundos membros das eqs. (D.1) e (D.2) crescem indefinidamente conforme a temperatura tende a zero, pois, neste limite,  $2\sigma$  e  $P$  tendem à unidade. Por outro lado, no limite de  $T \rightarrow T_c$ , temos os seguintes resultados para os segundos membros de (D.1) e (D.2):

$$P/(1-2\sigma) \longrightarrow P_c = \begin{cases} 1,27 \text{ (sc)} \\ 1,23 \text{ (bcc)} \end{cases} \quad , \quad \text{na aproximação I. (D.3)}$$

$$1/(1-2\sigma/P) \longrightarrow 1 \quad , \quad \text{na aproximação II. (D.4)}$$

Os limites nas eqs. (D.3) e (D.4) são os valores míni-

mos que se esperam para os segundos membros de (D.1) e (D.2); estes mínimos devem ser confrontados com os máximos  $\bar{g}$  da tabela D.1. Conclui-se daí que apenas a eq. (D.2), e no caso da rede cúbica simples, admite solução. Além disso, a solução que se pode obter é uma solução a alta temperatura ( $T \lesssim T_c$ ) porque  $\sigma$  deve obedecer à seguinte desigualdade decorrente de (D.2):

$$2\sigma/P = 1 - 1/g(\lambda) \leq 1 - 1/\bar{g} \approx 0,03$$

A região de solução de (D.2) no caso da rede sc está contida no intervalo

$$- 3,001 < \lambda < -3, \quad (D.5)$$

porquanto  $g(-3,001) \approx 0,991$ . Em termos de energia, o intervalo (D.5) se converte em

$$\bar{\epsilon} < \omega < 1,0002 \bar{\epsilon}$$

onde  $\bar{\epsilon} = 24\sigma PJ$  é a máxima energia da faixa; logo o afastamento do estado ligado não excede 0,02% de  $\bar{\epsilon}$ .

#### B. Rede fcc.

No caso da rede fcc, ao contrário das duas outras redes cúbicas,  $g(\lambda)$  não é limitada. Este fato possibilita a existência de solução de (D.1) e (D.2) para qualquer valor da temperatura entre zero e  $T_c$ .

Limitar-nos-emos nesta secção à estimativa do máximo afastamento do estado ligado no caso da rede fcc. Para tal empresa, façamos

$$g(\lambda) \gtrsim P_c \approx 1,21, \quad \text{na aproximação I,} \quad (D.6)$$

e

$$g(\lambda) \gtrsim 1, \quad \text{na aproximação II ;} \quad (D.7)$$

isto equivale a se fazer  $\sigma \gtrsim 0$  nas eqs. (D.1) e (D.2).

Note-se, de (D.6) e (D.7) [e da fig. 4.1], que o esta

do ligado pode-se afastar mais do contínuo de um mágnon na aproximação II do que na aproximação I. Os valores de  $\lambda$  que satisfazem (D.6) e (D.7) são

$$\lambda \gtrsim -1,152 \quad , \quad \text{na aproximação I}$$

e

$$\lambda \gtrsim -1,205 \quad , \quad \text{na aproximação II.}$$

Portanto,

$$\omega \lesssim 1,04\bar{\epsilon} \quad , \quad \text{na aproximação I}$$

e

$$\omega \lesssim 1,05\bar{\epsilon} \quad , \quad \text{na aproximação II.}$$

onde  $\bar{\epsilon} = 32\sigma PJ$  é a máxima energia da faixa no caso da rede fcc.

## APÊNDICE E

### A FUNÇÃO b PELO MÉTODO ITERATIVO

O método iterativo de solução das eqs. (5.16) conduz-nos, de modo análogo ao que se fez no apêndice C, às seguintes expressões a baixa temperatura para  $b$  e  $\sigma^{(1)}$ :

$$b = 1 + 2\sigma C_0 + 4\sigma E(-1) - 4\sigma E(1) \quad ,$$

$$\sigma = \sigma(0) + \alpha_0 \tau^2 + \alpha_1 \tau^4 + O(\tau^6)$$

com

$$E(-1) = \alpha_0' (\tau/\sigma b)^2 + \alpha_1' (\tau/\sigma b)^4 + O(\tau^6)$$

e

$$E(1) = \alpha_1' (\tau/\sigma b)^4 + O(\tau^6) \quad ,$$

onde

$$\tau = k_B T/J(0)$$

As constantes  $C_0$ ,  $\sigma(0)$ ,  $\alpha_0'$  e  $\alpha_1'$  encontram-se na tabela E.1.

Com as equações acima, pode-se levantar as curvas mostradas na figura E.1.

Por outro lado, no limite de  $T \rightarrow T_N$  (temperatura de transição) e  $\sigma \rightarrow 0$ , a função  $b$  obedece à seguinte equação (1):

$$b_N^2 - b_N - [4k_B T_N/J(0)] [F(-2) - 1] = 0 \quad ,$$

onde

$$k_B T_N/J(0) = 1/[4F(-2)]$$

e.

$$F(-2) = (2/N) \sum_{\underline{k}} [\omega(\underline{k})]^{-2} = 1.516 \quad \text{sc ,}$$

$$= 1.393 \quad \text{bcc.}$$

Na Tabela E.2 apresentamos os valores numéricos de  $b_N$  para a rede cúbica simples e de corpo centrado. Estes valores aparecem também na fig. E.1 para efeito de comparação com a aproximação a baixa temperatura extrapolada até a temperatura de transição.

Tabela E.1 - Valores numéricos dos coeficientes das expansões em série a baixa temperatura consideradas neste apêndice.

rede <sup>(a)</sup>	$C_0$	$\sigma(0)$	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_0$	$\alpha_1$
sc	0,253	0,422	-2,79	-56,8	0,866	3,42
bcc	0,223	0,425	-2,28	-42,1	0,667	2,63

a - ref.1

Tabela E.2 - Valores numéricos de  $b_N$

rede:	sc	bcc
$b_N$ :	1,27	1,23

REFERÊNCIA

1. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1435 (1968).

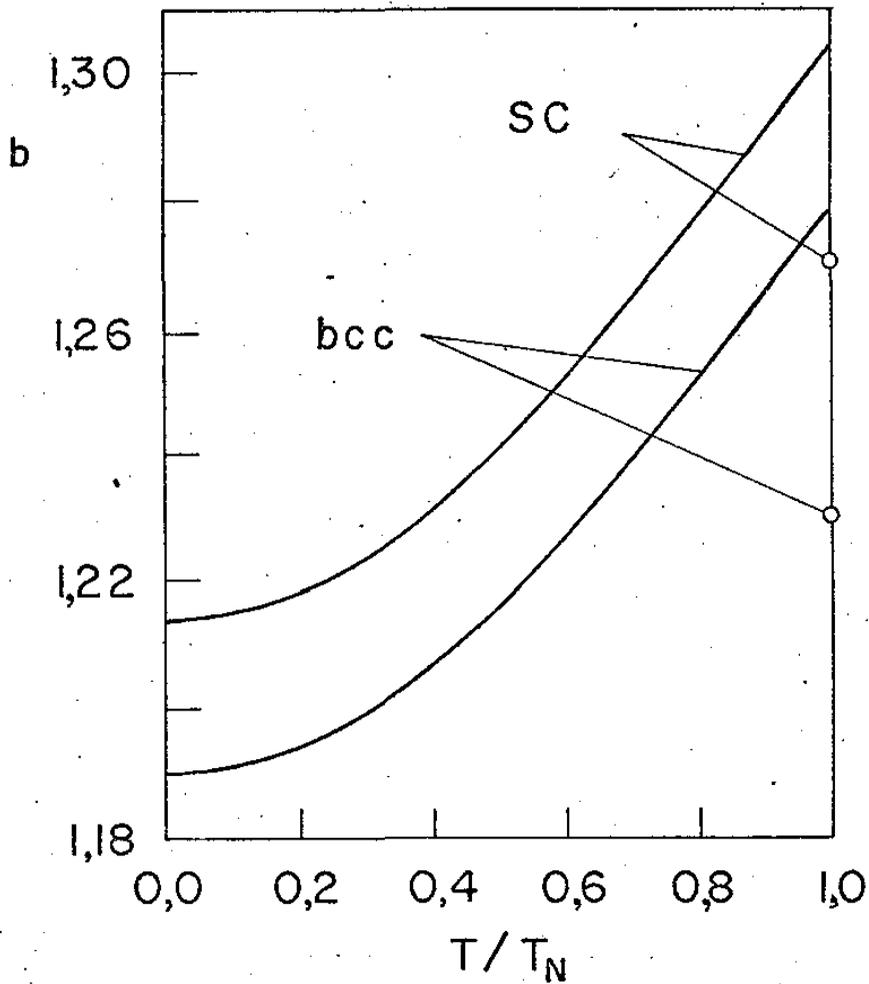


Fig. E.1 Aproximação a baixa temperatura para a função  $b$ , extrapolada até  $T_N$ . O valor limite  $b_N$  de  $b$  em  $T_N$  é indicado por um pequeno círculo.

## APÊNDICE F

### APROXIMAÇÕES DE CAMPO EFETIVO PARA

#### O FERROMAGNETO DE HEISENBERG

As teorias de campo efetivo são aproximações propostas para o cálculo mecânico-estatístico de quantidades termodinâmicas de um ferromagneto de Heisenberg (1).

As aproximações consistem em se considerar um hamiltoniano de um pequeno número de spins em vez do hamiltoniano total do sistema, mas de forma tal que a interação entre os constituintes do pequeno aglomerado e os spins restantes é levada em conta via um campo efetivo. Quantidades termodinâmicas que se supõe serem representativas do sistema são obtidas, então, ao se impor apropriadamente alguma condição de consistência.

O objetivo deste apêndice é apresentar uma descrição qualitativa e muito sucinta de algumas das aproximações mais significativas. Informações mais detalhadas podem ser obtidas nas referências.

A exposição que se segue está ordenada de acordo com o número de spins cujo hamiltoniano é considerado no cálculo estatístico.

#### A. A Aproximação do Campo Molecular de Weiss

A aproximação do campo molecular de Weiss<sup>(1,2)</sup> considera um hamiltoniano efetivo de um único spin:

$$H_{ef} = - 2J\sigma S_i^Z - \mu h S_i^Z ,$$

onde

$$\sigma \equiv \langle S_i^Z \rangle \equiv \langle S^Z \rangle$$

deve obedecer à condição de autoconsistência

$$\sigma = \text{Tr}(\rho S^Z) ,$$

com

$$\rho = \exp(-\beta H_{ef}) / \text{Tr} [\exp(-\beta H_{ef})]$$

A magnetização espontânea  $\sigma$  obtida das equações acima apresenta um comportamento qualitativo satisfatório, como é esboçado na fig. F.1. No entanto, próximo de  $T = 0$ ,

$$\sigma \sim 1 - (1/S) \exp(-\text{const}/T),$$

e próximo de  $T = T_c$ ,

$$\sigma \sim (1 - T/T_c)^{1/2} \quad (F.1)$$

A temperatura de Curie,

$$T_c = 2zJS(S+1)/(3k_B)$$

é alta demais comparada com os resultados do método de expansão a alta temperatura <sup>(3)</sup> [z é o número de primeiros vizinhos; J definido na eq. (1.3) é a integral de intercâmbio; S é o número quântico de spin;  $k_B$  é a constante de Boltzmann].

A suscetibilidade a campo nulo,  $\chi$ , na região paramagnética, obedece à lei de Curie-Weiss:

$$\chi^{-1} \sim T - \theta,$$

onde  $\theta = T_c$ .

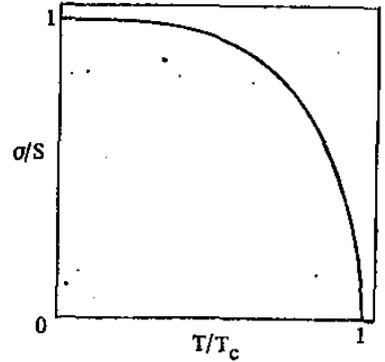


Fig. F.1. Comportamento qualitativo da magnetização espontânea em função da temperatura.

O resultado para o calor específico magnético,  $C$ , também não é muito satisfatório, conforme se pode apreciar na fig. F.2.

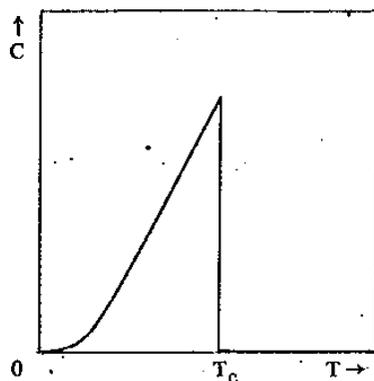


Fig. F.2. O calor específico magnético na aproximação do campo molecular de Weiss.

### B. A Aproximação de Oguchi

A aproximação proposta por Oguchi (4) leva em conta o seguinte hamiltoniano de dois spins:

$$H_{0g} = - 2J S_1 \cdot S_2 - \mu h_{ef} (S_1^Z + S_2^Z) ,$$

com

$$h_{ef} \equiv h + [2(z-1)J/\mu] \sigma ,$$

onde

$$\begin{aligned} \sigma &= (1/2) \langle S_1^Z + S_2^Z \rangle \\ &= \text{Tr}[\langle S_1^Z + S_2^Z \rangle \exp(-\beta H_{0g})] / \{2 \text{Tr}[\exp(-\beta H_{0g})]\} . \end{aligned}$$

O comportamento da magnetização espontânea,  $\sigma$ , nesta aproximação, é razoável (comparável ao resultado do campo molecular de Weiss (1,2)) para temperaturas longe de  $T = 0$  e  $T = T_c$ .

A temperatura de Curie,  $T_c$ , também é alta demais, cerca de alguns por cento abaixo da temperatura de Curie do campo molecular (1,2).

O fato de alguma correlação entre pares de spins vizinhos próximos ser levada em consideração reflete-se nos resultados para a susceptibilidade paramagnética,  $X$ , e o calor específico,  $C$ , (figs. F.3 e F.4). O desvio da lei de Curie-Weiss apresentado por  $X$  e a cauda da curva do calor específico, acima de  $T_c$ , podem ser interpretados como devidos à ordem a curta distância.

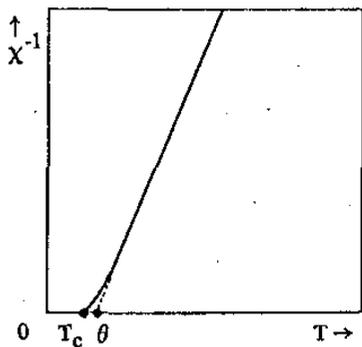


Fig. F.3. Comportamento qualitativo do recíproco da suscetibilidade em função da temperatura.

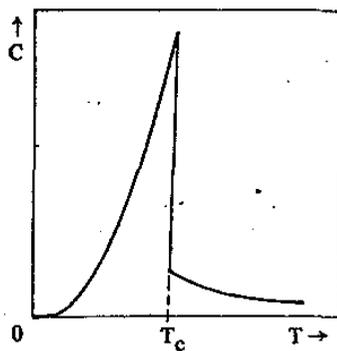


Fig. F.4. Comportamento qualitativo do calor específico magnético em função da temperatura.

### C. A Aproximação do Acoplamento Constante

Da mesma forma que a aproximação de Oguchi (1,4), a aproximação do acoplamento constante (5) envolve um hamiltoniano de dois spins.

A magnetização,  $\sigma$ , é calculada através da expressão:

$$\sigma = (1/2) \text{Tr} [\rho^{(2)} (S_1^Z + S_2^Z)] ,$$

onde

$$\rho^{(2)} = \exp(-\beta H_{AC}) / \text{Tr} [\exp(-\beta H_{AC})] ,$$

com

$$H_{AC} = -2JS_1 \cdot S_2 - \mu A_1 (S_1^Z + S_2^Z) .$$

O parâmetro  $A_1$  que aparece no hamiltoniano acima é determinado impondo-se:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} \ln Z_\sigma = 0 ,$$

onde

$$\ln Z_\sigma = - \int_0^\beta E_\sigma d\beta' + \ln g(\sigma) ,$$

com

$$E_{\sigma} = (NZ/2) \text{Tr} [\rho^{(2)} H^{(2)}] ,$$

sendo

$$H^{(2)} = - 2JS_1 \cdot S_2 - (\mu h/z)(S_1^z + S_2^z)$$

e  $g(\sigma)$ , o número de estados com auto-valor  $\sigma$  de  $\frac{1}{N} \sum_i S_i^z$  fixo.

Da proposição acima exposta decorrem os seguintes resultados:

A magnetização espontânea apresenta, longe de  $T=0$  e  $T=T_c$ , um bom comportamento. A aproximação do acoplamento constante não prevê, no entanto, a saturação para  $T=0$ . Por exemplo, no caso de  $z=6$  e  $S=1/2$ , obtém-se  $2\sigma \approx 0,98$ . Para  $T$  próximo da temperatura de Curie, a magnetização tem um comportamento dado pela eq. (F.1).

A temperatura de Curie,  $T_c$ , é satisfatória; cerca de uns 10% acima da temperatura prevista pelo método de expansão a alta temperatura (3).

A suscetibilidade e o calor específico são dados qualitativamente pelas figs. F.3 e F.4, prevendo, portanto, uma ordem a curta distância.

#### D. Aproximação de Bethe-Peierls-Weiss

Na aproximação de Bethe-Peierls-Weiss (6), considera-se um hamiltoniano de um spin central,  $S_0$ , e seus  $z$  primeiros vizinhos,  $S_i$ :

$$H_{BPW} = - 2JS_0 \cdot S_T - \mu h S_0^z - \mu h_1 S_T^z ,$$

onde

$$S_T = \sum_{i=1}^z S_i$$

e  $h_1$ , determinado pela condição de consistência

$$\langle S_0^Z \rangle = \langle S_i^Z \rangle, \quad i=1,2,\dots,z$$

A magnetização,  $\sigma$ , obtida nesta aproximação é insatisfatória, apresentando um antiponto de Curie (fig. F.5).

A temperatura de Curie,  $T_C$ , é boa, comparável à da aproximação do acoplamento constante (1,5).

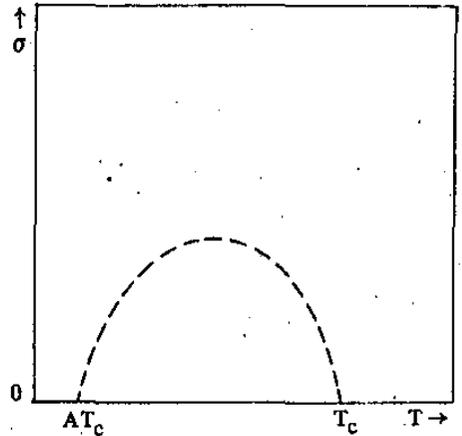


Fig. F.5. A magnetização espontânea prevista pela aproximação B.P.W.

A suscetibilidade,  $X$ , e o calor específico,  $C$ , apresentam o bom comportamento esboçado nas figs. F.3 e F.4.

### E. Comparação de Resultados

No quadro sinótico organizado abaixo fazemos uma comparação qualitativa dos resultados das diversas aproximações de campo efetivo abordadas neste apêndice. A comparação, quando possível, é feita mediante uma enumeração que se inicia, em cada coluna, com o resultado mais satisfatório.

O resumo comparativo foi ampliado de forma a conter também aproximações na teoria de funções de Green (as quatro primeiras aproximações são de primeira ordem, enquanto que a última é de segunda).

Para efeito de comparação, todos os resultados referem-se a  $S=1/2$  e rede cúbica simples.

Aproximações	$T_c^g$	$\sigma$		X	C
		$T=0^h$	$T \lesssim T_c$		
Campo Efetivo <sup>a</sup> : Weiss	7	5	1	3	4
Oguchi	6	5	1	2	3
Acoplamento Constante	1	6	1	1	1
B.P.W.	2	7	-	-	2
Funções de Green: RPA <sup>b</sup>	4	2	1	3 <sup>i</sup>	-
Callen <sup>c</sup>	5	4	1	4 <sup>i</sup>	-
Dembinski <sup>d</sup>	4	1	-	2 <sup>i</sup>	-
Dembinski Modificada <sup>e</sup>	2	3	-	1 <sup>i</sup>	-
Cooke e Gersch <sup>f</sup>	3	1	-	-	-

a-Ref. 1      b-Ref. 7      c-Ref. 8      d-Ref. 9      e-Ref. 10      f-Ref. 11

g-Resultados comparados com o do método de expansão a alta temperatura (ref. 12).

h-Resultados comparados com o da teoria de ondas de spin (ref.13).

i-Resultados comparados com o da ref. 12 (referentes apenas aos primeiros coeficientes da expansão a alta temperatura).

## REFERÊNCIAS

1. J.S. Smart, "Effective Field Theories of Magnetism", W.B.Saunders, Philadelphia, 1966.
2. P. Weiss, J. Phys. Radium 4, 661 (1907) [no texto referimo-nos à versão quântica da aproximação pioneira de Weiss].
3. G.S. Rushbrooke and P.J. Wood, Mol. Phys. 1, 257 (1958).
4. T. Oguchi, Prog. Theor. Phys. 13, 148 (1955).
5. P.W. Kasteleijn and J. Van Kranendonk, Physica 22, 317 (1956).
6. P.R. Weiss, Phys. Rev. 74, 1493 (1948).

7. N.N. Bogolyubov and S.V. Tyablikov, Doklady Akad. Nauk SSSR 126, 53 (1959) [ trad.: Soviet Phys.-Doklady 4, 589 (1959)].
8. H.B. Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963).
9. S.T. Dembinski, Can. J. Phys. 46, 1021 e 1502 (1968).
10. M.D. Coutinho Filho and I.P. Fittipaldi, Phys. Rev. B 7, 4941 (1973).
11. J.F. Cooke and H.A. Gersch, Phys. Rev. 153, 641 (1967).
12. G.A. Baker, Jr., H.E. Gilbert, J. Eve and G.S. Rushbrooke, Phys. Rev. 164, 800 (1967).
13. F.J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 e 1230 (1956).