

2^a

APLICAÇÃO DA TEORIA DE MUITOS CORPOS AO
FERROMAGNETISMO LOCALIZADO

ANTONIO CARLOS SALES ALGARTE

ORIENTADOR

PROF. DR. JOSÉ GALVÃO DE PISAPIA RAMOS

TESE APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAOHIN" PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM CIÊNCIAS

Agosto - 1974

Ao Prof. José Galvão P. Ramos, pela orientação.

Ao Prof. Roberto Luzzi,

Ao Prof. Mário Alberto Tenan,

os meus agradecimentos.

Este trabalho foi realizado com o suporte financeiro da FAPESP.

ÍNDICE

CAPÍTULO I

Introdução	1
----------------------	---

CAPÍTULO II

Definição do Modelo e Principais Resultados pelo formalismo de ondas spin	5
--	---

CAPÍTULO III

Aplicação dos métodos da teoria de muitos corpos ao ferromagnetismo localizado	12
---	----

CAPÍTULO IV

Sistema de dois spins com anisotropias através do método das funções de Green	44
--	----

CONCLUSÕES	71
----------------------	----

REFERÊNCIAS	72
-----------------------	----

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

As propriedades magnéticas fortes dos sólidos (ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo) são devidas aos momentos magnéticos associados aos spins eletrônicos. Dois casos podem ser considerados: 1) elétrons que ocupam estados ligados e localizados dentro das células atômicas formando uma camada incompleta, 2) elétrons que ocupam estados formando bandas largas, portanto, de caráter itinerante.

Nesse trabalho levamos em conta somente o primeiro caso. Ainda mais, suporemos que a localização dos estados seja tal que se possa associar a cada ponto do retículo cristalino um spin efetivo de magnitude igual a S . Como exemplos de materiais que possuem essa propriedade podemos citar o EuO e EuS .

Tal sistema pode ser descrito por um Hamiltoniano efetivo, o "Hamiltoniano de Heisenberg";⁽¹⁾

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{ij}' J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

onde $\sum_{ij}'$ indica que a soma é feita para $i \neq j$ e J_{ij} é a "Integral de intercâmbio".

A "Integral de intercâmbio" reflete a interação, de origem elétrica, entre o spin do ponto i com o spin do ponto j do retículo cristalino, dando a medida da interação entre os elétrons. Temos ainda que J_{ij} é simétrica com respeito aos dois índices.

Consideraremos um sistema descrito pelo Hamiltoniano de Heisenberg mais um termo de Zeeman:

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{ij}' J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \mu \hbar \sum_j S_j^z \quad ; \quad J_{ij} > 0$$

J_{ij} positivo caracteriza o caso ferromagnético, $\mathcal{H}_0$ é dado em unidades de $\hbar = 1$. $\mu = g\mu_B$ ($g \equiv$ fator espectroscópico, $\mu_B \equiv$ magneton de Bohr) $\hbar$ é o campo magnético externo, que define a direção Z.

Se o Hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ não contivesse o termo de Zeeman o spin total do sistema poderia ocupar qualquer direção. Isso significa que o estado fundamental seria degenerado. Para que haja estabilidade torna-se necessário a presença de um termo anisotrópico a fim de quebrar essa degenerescência. Assim, para removermos a degenerescência e querendo obter resultados gerais simula-se a anisotropia através de um campo externo, o - que servirá também para se estudar a resposta do sistema.

O estudo da influência de várias anisotropias nas propriedades de um cristal ferromagnético de Heisenberg é importante por várias razões. A anisotropia exerce um papel fundamental na estabilidade do estado ferromagnético. Ela pode modificar a dependência com a temperatura da lei de dispersão - de magnons, bem como influenciar nas propriedades termodinâmicas dos ferromagnéticos, especialmente na temperatura de transição. As anisotropias mais estudadas tem sido, a anisotropia de intercâmbio,⁽²⁾ a interação dipolar magnética^(3,4) e a anisotropia do campo cristalino.^(5,6)

Um dos métodos empregados nesse estudo é o método das funções de Green. O problema que surge quando se aplica esse método é que se obtém uma cadeia infinita de equações acopladas. Para quebrarmos essa cadeia é necessário a introdução de aproximações ("decouplings"). O teste para o decoupling escolhido consiste em se comparar os resultados obtidos por meio dele com os obtidos por outros métodos, na região de baixas

temperaturas, isto é, $T \ll T_c$, onde T_c é a temperatura de Curie, os resultados obtidos por Dyson⁽⁸⁾, que é uma generalização do trabalho de Bloch, servem de guia, enquanto que, para $T \sim T_c$, a comparação é feita com a teoria do campo molecular. Outra maneira de se fazer esse teste seria estudar sistemas para os quais fosse possível obter resultados exatos. Seguindo essa linha, vários trabalhos tem sido apresentados^(9,10). Nesse trabalho obtemos os resultados exatos para grandezas termodinâmicas de interesse, no caso de um sistema de dois spins ($S = 1/2$) com anisotropia. Em seguida resolvemos o problema pelo método das funções de Green, usando o "decoupling" de Tyablikov ou R.P.A. (Random Phase Approximation). A comparação dos resultados mostra que o "decoupling" R.P.A. não é adequado para o tratamento de sistemas anisotrópicos.

Outro método que permite o tratamento do ferromagnetismo de Heisenberg é o método da perturbação estatística, introduzido por Wallace⁽¹¹⁾. Esse método e o das funções de Green, com vários "decoupling", tem se mostrado equivalentes^(11,12). Essa equivalência, entretanto, ainda não foi mostrada no caso do "decoupling" de Dembinski⁽¹³⁾. Utilizando o método da perturbação estatística com base nas idéias do "decoupling" de Dembinski reobtivemos os resultados de Callen.

Uma possibilidade de se melhorar os resultados de Wallace é tentar efetuar os cálculos em ordem superior. Essa possibilidade também é considerada.

No capítulo seguinte apresentaremos os principais resultados obtidos pelo formalismo de ondas de spins. No capítulo III introduzimos o método das funções de Green, o método da perturbação estatística e analisamos a equivalência entre ambos. Finalmente, no capítulo IV, estudamos um sistema de

dois spins, com anisotropia, através do método das funções de Green.

CAPÍTULO II

DEFINIÇÃO DO MODELO E PRINCIPAIS RESULTADOS PELO FORMALISMO DE ONDAS DE SPIN

Nesse capítulo, definiremos o modelo a ser estudado, bem como apresentaremos os resultados que são obtidos pelo formalismo de ondas de spin que, como vimos, são importantes para a escolha do "decoupling" a ser empregado no método das funções de Green⁽¹⁴⁾.

A partir dos operadores de spin, que são definidos pelos comutadores:

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad (\text{II,1a})$$

$$[S_i^z, S_j^+] = \pm S_i^+ \delta_{ij} \quad (\text{II,1b})$$

$$[S_i^+, S_j^+] = [S_i^-, S_j^-] = 0 \quad (\text{II,1c})$$

e, das condições subsidiárias:

$$(S_j^+)^{2S+1} = (S_j^-)^{2S+1} = 0 \quad (\text{II,2})$$

que refletem o fato de que o valor máximo da componente S_j^z é S . Onde $S_j^+ = S_j^x + iS_j^y$. E, devido à simetria da "integral de Intercâmbio", o Hamiltoniano de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \mu h \sum_j S_j^z ; J_{ij} > 0 \quad (\text{II,3})$$

pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = - J \sum_j (S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z) - \mu h \sum_j S_j^z \quad (\text{II},4)$$

Por outro lado, a simetria do cristal sugere o emprego das transformadas de Fourier dos operadores S_j^+ e S_j^z . Essas transformadas são definidas como:

$$A_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} S_j^- \quad (\text{II},5a)$$

$$A_k = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} S_j^+ \quad (\text{II},5b)$$

$$B_k = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} S_j^z \quad (\text{II},5c)$$

Definimos ainda:

$$J_k = J \sum_j' e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \quad (\text{II},6)$$

onde $\sum_j'$ é a soma sobre os vizinhos próximos (a origem sendo $\vec{r}_j = 0$)

Com essas transformações a Hamiltoniana (II,4) fica:

$$\mathcal{H} = - \sum_k J_k (NB_k B_k + 2 SA_k^+ A_k) - \mu h NB_0 \quad (\text{II},7)$$

Calculemos ainda:

$$[A_k^+, \mathcal{H}] = - \mu h A_k^+ - 2 \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) A_{k'}^+ B_{k'-k} \quad (\text{II},8)$$

Se introduzirmos um desvio de spin no ponto i, devido

ao acoplamento de intercâmbio do spin i com seus vizinhos, esse desvio se propaga no retículo sob forma de uma onda. Temos, então, o que se chama de "onda de spin". A criação do desvio no ponto i corresponde a se aplicar o operador S_i^- ao estado fundamental $|0\rangle$. Assim, os operadores S^- e S^+ são operadores de "criação" e "destruição" de desvios de spin.

Em termos dos operadores transformados, estados a mais de uma onda de spin são definidos por:

$$|a\rangle = \prod_k \left[(a_k!)^{-1/2} (A_k^+)^{a_k} \right] |0\rangle \quad (II,9)$$

onde a_k é o número de ondas de spin com o mesmo vetor de onda $\vec{k}$. Os estados (II,9) não são ortogonais porque a relação de comutação entre A_k e A_k^+ não é uma relação de comutação de bosons. Essa não ortogonalidade tem como resultado uma interação entre as ondas de spin que é chamada interação cinemática. Existe, ainda, outro tipo de interação, chamada interação dinâmica, associada ao espalhamento das ondas de spin de Bloch.

A baixas temperaturas ($T \ll T_c$) os estados preponderantes são aqueles para os quais a $\sum_k a_k$ é pequena comparada com N . Nesse caso os estados $|a\rangle$ podem ser considerados aproximadamente ortogonais, e podemos introduzir a idéia de ondas de spin de Bloch.

Determinemos a magnetização espontânea no caso das ondas de spin de Bloch livres.

A função de partição é dada por:

$$Z = T_r e^{-\beta E_n} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (II,10)$$

Considerando os estados $|a\rangle$ como aproximadamente diagonais obtemos:

$$\mathcal{H}|a\rangle = \left[E_0 + \sum_k a_k \omega_k \right] |a\rangle \quad (II,11)$$

onde $E_0 = J_0 S^2 N$; $\omega_k = 2S (J_0 - J_k) + \mu h$

Portanto:

$$\text{Tr} e^{-\beta(E_0 + \sum_k a_k \omega_k)} = \sum_a \langle a | e^{-\beta(E_0 + \sum_k a_k \omega_k)} | a \rangle = e^{-\beta E_0} \prod_k (1 - e^{-\beta \omega_k})^{-1}$$

$$Z = e^{-\beta E_0} \prod_k (1 - e^{-\beta \omega_k})^{-1} \quad (II,12)$$

E, a magnetização espontânea, por átomo, para uma estrutura cúbica, é dada por:

$$M(T) = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} \approx \mu \left[S - \zeta(3/2) \theta^{3/2} \right] \quad (II,13)$$

onde: $\theta \equiv \frac{3K_B T}{4\pi J_0 S \mu}$; $\nu = 1$ (sc); $\frac{3}{4} 2^{2/3}$ (bcc); $2^{1/3}$ (fcc)

$\zeta(x) \equiv$ função Zeta de Riemann

A expressão (II,13), válida para baixas temperaturas, foi obtida pela primeira vez por Bloch⁽¹⁵⁾. Essa expressão foi também verificada experimentalmente.

A fim de obtermos um conjunto de estados ortogonais e normalizados de várias ondas de spin devemos escrever o Hamiltoniano de Heisenberg em segunda quantização. Isso pode ser feito por meio das transformações de Holstein-Primakoff -

(16) e de Maleev (17). Elas transformam os operadores de spin em operadores de criação e destruição de bosons. São, entre - tanto, limitadas pois são válidas somente para o número de - ocupação de bosons menor que $2S$. Isso acontece porque essas transformações não levam em devida consideração que o espaço dos spins tem dimensão $(2S+1)^N$ enquanto que o espaço de bosons tem dimensão infinita.

Nesse trabalho estamos interessados na transformação de Maleev, que nos permitirá obter as ondas de spin ideais de Dyson.

A contribuição das interações entre as ondas de spin, no cálculo das grandezas termodinâmicas, foi obtida por Dyson (8).

Transformemos os operadores de spin em operadores de bosons pela transformação de Maleev

$$S_j^+ = (2S)^{1/2} \left(b_j - \frac{b_j^+ b_j b_j}{2S} \right)$$

$$S_j^- = (2S)^{1/2} b_j^+$$

$$S_j^z = S - b_j^+ b_j$$

onde b_j^+ e b_j são operadores de criação e destruição de bosons

Os operadores de criação e destruição das ondas de spin de Dyson são definidas pelas transformadas de Fourier dos operadores b_j^+ e b_j :

$$b_j^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_{\vec{k}}^+$$

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_k$$

Com essas transformações o Hamiltoniano (II,4) fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_D = & - \mu h N S - \epsilon_0 + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \\ & + N^{-1} \sum_{kk'k''} (J_k - J_{k-k''}) a_k^+ a_{k'}^+ a_{k''} a_{k+k'-k''} \end{aligned} \quad (II,14)$$

$\mathcal{H}_D$, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg em termos dos operadores a_k^+ e a_k é o Hamiltoniano, não hermiteano, das ondas de spin de Dyson.

O termo $N^{-1} \sum_{kk'k''} (J_k - J_{k-k''}) a_k^+ a_{k'}^+ a_{k''} a_{k+k'-k''}$ é responsável

vel pela interação dinâmica das ondas de spin. Desprezando esse termo, a magnetização espontânea pode ser calculada como no caso das ondas de spin de Bloch, e obtemos:

$$M(T) = S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} + O(\theta^{9/2}) \quad (II,15)$$

onde:

$$a_0 = \zeta(3/2); \quad a_1 = \frac{3}{4} \pi^2 \zeta(5/2); \quad a_2 = \pi^2 \omega^2 \zeta(7/2)$$

e

$$\omega = \frac{33}{32} \text{ (sc)}; \quad \frac{281}{288} \text{ (bcc)}; \quad \frac{15}{16} \text{ (fcc)}$$

E o resultado é o mesmo que o obtido no caso das ondas de spin de Bloch.

Usando teoria de perturbação, Dyson calculou a contribuição devida à interação dinâmica obtendo:

$$M_{ID} = - \frac{2}{S} a_0 a_1 Q \theta^4 \quad (II,16)$$

onde:

$$Q = 1 + \frac{4}{3(GS - 1)} + \frac{\alpha}{3S}$$

$$G = 10 \text{ (sc)}; 16 \text{ (bcc)}; 24 \text{ (fcc)}$$

$$e \quad \alpha = 0.52 \text{ (sc)}; 0.39 \text{ (bcc)}; 0.34 \text{ (fcc)}$$

Portanto, a baixas temperaturas, a magnetização é dada por (II,15) mais a correção de Dyson (II,16)

CAPÍTULO III

APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DA TEORIA DE MUITOS CORPOS AO FERRO-MAGNETISMO LOCALIZADO.

Apresentamos, nesse capítulo, o método das funções de Green e sua aplicação ao problema definido anteriormente através dos vários "decouplings". Apresentamos também o método da perturbação estatística e os resultados que obtivemos para o cálculo de ordem superior. Finalmente analisamos a equivalência entre os dois métodos.

Método das funções de Green (7, 14)

O método das funções de Green retardada e avançada e sua aplicação ao ferromagnetismo de Heisenberg, tem sido objeto de vários trabalhos (9, 10, 14). Aqui, nos limitaremos a um breve resumo.

A partir de dois operadores quaisquer, na representação de Heisenberg, $A(t)$ e $B(t')$ definimos as funções de correlação associadas a esses operadores como:

$$F_{AB}(t, t') \equiv \langle A(t) B(t') \rangle \quad (\text{III, 1a})$$

$$F_{BA}(t, t') \equiv \langle B(t') A(t) \rangle \quad (\text{III, 1b})$$

onde $\langle \rangle$ representa a média sobre um "ensemble" estatístico.

As representações espectrais dessas funções de correlação são dadas por:

$$F_{AB}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{III, 2a})$$

$$F_{BA}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{III, 2b})$$

onde a densidade espectral $J(\omega)$ é dada por:

$$J(\omega) \equiv Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n|A(0)|m\rangle \langle m|B(0)|n\rangle e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m - \omega)$$

Z é a função de partição. $|n\rangle$ é um autovetor de $\mathcal{H}$ (Hamiltoniano do sistema) e E_n o autovalor correspondente.

Definiremos agora as funções de correlação em termos das funções de Green.

As funções de Green, retardada e avançada são definidas como:

$$G_{AB}^{(r)}(t, t') \equiv \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle^{(r)} \equiv -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{III, 3a})$$

$$G_{AB}^{(a)}(t, t') \equiv \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle^{(a)} \equiv i\theta(t'-t) \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{III, 3b})$$

onde $\eta = \pm 1$ indica o comutador ou o anticomutador e $\theta(x)$ é a função de Heaviside.

As equações de movimento das funções de Green são obtidas derivando-se (III, 3a e 3b) com relação ao tempo. As funções de Green retardada e avançada obedecem à mesma equação de movimento, portanto os índices (a) e (r) podem ser suprimidos.

$$i \frac{dG}{dt} = (t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \langle\langle [A(t), \mathcal{H}]_{-} | B(t') \rangle\rangle \quad (\text{III.4})$$

A transformada de Fourier de (III.4) é:

$$E \langle\langle A | B \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_{-} | B \rangle\rangle \quad (\text{III,5})$$

Essa equação é que será posteriormente utilizada nos cálculos.

Portanto, a equação de movimento da função de Green a dois operadores envolve uma função de Green a tres operadores. Por outro lado, a equação de movimento a tres operadores conterá uma função de Green a quatro operadores, e assim, sucessivamente. Obtemos então uma cadeia infinita de equações acopladas. O procedimento adotado para quebrar essa cadeia consiste em se escrever a função de Green de ordem superior em termos de função de Green de ordem mais baixa. Essa aproximação é conhecida como "decoupling". A escolha do "decoupling" depende das características do problema a ser resolvido.

As representações espectrais das funções de Green retardada e avançada são dadas por:

$$G^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega - \eta}) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon} \quad (\text{III, 6a})$$

$$G^{(a)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega - \eta}) \frac{d\omega}{E - \omega - i\epsilon} \quad (\text{III, 6b})$$

A partir das quais podemos escrever:

$$J(\omega) = \frac{i}{e^{\beta\omega - \eta}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)] \quad (\text{III, 7})$$

Substituindo (III, 7) em (III, 2a e 2b), obtemos:

$$F_{AB}(t, t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega - \eta}} e^{\beta\omega} e^{-\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{III, 8a})$$

$$F_{AB}(t, t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega - \eta}} e^{-\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{III, 8b})$$

Portanto, o cálculo do salto das funções de Green no eixo real fornece as funções de correlação dependentes do tempo.

Entretanto, a teoria da representação espectral não é, em geral, suficiente para determinar completamente as funções de correlação. Quando a função de Green é definida através do comutador deve-se acrescentar às equações (III, 8a e 8b) uma constante independente do tempo. Isso deve-se ao fato de que os cálculos anteriores foram feitos considerando-se A e B como operadores de campo, para os quais os elementos de matriz diagonais são nulos.

Essa constante pode ser determinada univocamente por:

$$C = Z^{-1} \sum_{\substack{n, m \\ E_n = E_m}} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle e^{-\beta E_n} \quad (\text{III, 9})$$

Vejamos agora como se aplica esse método do Hamiltoniano de Heisenberg.

Consideremos o Hamiltonian (II, 3) e as relações (II, 1a,b,c) e (II,2). Tomando o operador A de (III, 5) como sendo S_g^+ e supondo que o operador B se refira ao ponto ℓ do retículo, obtemos (tomando $n = 1$)

$$E \langle \langle S_g^+ | B_\ell \rangle \rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [S_g^+, B_\ell]_- \rangle + \langle \langle [S_g^+, H]_- | B_\ell \rangle \rangle \quad (\text{III, 10})$$

O comutador, que aparece nessa equação, é dado por:

$$[S_g^+, H]_- = \mu h S_g^+ - 2 \sum_j J_{gj} (S_g^z S_j^+ - S_j^z S_g^+) \quad (\text{III, 11})$$

E, a equação (III, 10) pode ser escrita como

$$(E - \mu h) \langle \langle S_g^+ | B_\ell \rangle \rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [S_g^+, B_\ell]_- \rangle - 2 \sum_j J_{gj} \langle \langle S_g^z S_j^+ - S_j^z S_g^+ | B_\ell \rangle \rangle_E \quad (\text{III, 12})$$

Vemos que esta equação envolve funções de Green de ordem superior: $\langle\langle S_g^Z S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle_E$ e $\langle\langle S_j^Z S_g^+ | B_\ell \rangle\rangle_E$. Podemos es-
crever essas funções, de forma aproximada, em termos de outras,
de ordem mais baixa. Veremos como isso pode ser feito anali-
zando os vários "decouplings" propostos.

a) "Decoupling" R.P.A. ou de Tyablikov (18)

O "decoupling" R.P.A. consiste em se desprezar as flu
tuações do valor médio do operador S^Z , em outras palavras, to-
mar $S_g^Z - \langle S^Z \rangle \approx 0$. Assim, substituímos as funções de Green
de ordem superior por

$$\langle\langle S_g^Z S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle_E \rightarrow \langle S^Z \rangle \langle\langle S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle_E \quad (\text{III}, 13)$$

Com essa aproximação são obtidos os seguintes resulta-
dos para a magnetização espontânea, a campo nulo:

Quando $S = 1/2$

$$M(T) = \frac{1}{2} - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - a_0^2 \theta^3 - 4a_0 a_1 \theta^4 + \dots \quad (\text{III}, 14)$$

a_n e θ foram definidos anteriormente. Equações (I, 13) e
(I, 15).

Comparando com o resultado de Dyson, equação (I, 15)
mais o termo devido a interação dinâmica (I, 16) vemos que
(III,14) apresenta um termo espúrio proporcional a θ^3 e ain-
da $Q = 1$, portanto independente da estrutura cristalina.

Quando $S > 1$

$$M(T) = S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - \frac{3}{25} a_0^2 \theta^3 - \frac{4}{5} a_0 a_1 \theta^4 + \dots \quad (\text{III}, 15)$$

Novamente aparecendo um termo em θ^3 e Q não dependendo da estrutura cristalina.

Podemos concluir, portanto, que o "decoupling" R.P.A. além de introduzir o termo espúrio em θ^3 trata mal a interação dinâmica (responsável pelo termo em θ^4).

b) "Decoupling" de Callen ou Simétrico (19)

Na tentativa de melhorar os resultados da R.P.A., Callen introduziu o seguinte "decoupling":

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle_E \xrightarrow{g \neq j} \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle_E - \frac{1}{2S} \frac{\langle S^z \rangle}{S} \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ | B_\ell \rangle\rangle_E \quad (\text{III}, 16)$$

que coincide com a R.P.A. em altas temperaturas, uma vez que nesse limite os pontos do cristal deixam de ficar correlacionados e $\langle S_g^- S_j^+ \rangle$ tende a zero. Como $\langle S^z \rangle$ também tende a zero, o segundo termo, no lado direito, de (III, 16) vai a zero mais rapidamente que o primeiro.

Com $B_\ell = e^{aS_\ell^z} S_\ell^-$, onde a é um parâmetro obtém-se, para a magnetização espontânea, na região de baixas temperaturas, o seguinte resultado:

$$M(T) = S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - \frac{2}{S} a_0 a_1 \theta^4 + \dots \\ + (2S+1) \left[\zeta(3/2) \right]^{2S+1} \theta^{3S+3/2} + (2S+1)^2 \frac{3\pi\nu}{4} \left[\zeta(3/2) \right]^{2S} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \theta^{3S+5/2} + \dots \quad (\text{III}, 17)$$

Os termos em $\theta^{3S+3/2}$ e $\theta^{3S+5/2}$ são termos espúrios, porém, para $S > 1$ contribuem com potência igual ou superior a $9/2$. Mas, para $S = 1/2$ aparece, devido a $\theta^{3S+3/2}$, o termo em θ^3 . E, ainda mais, o termo em $\theta^{3S+5/2}$ cancela com o termo em

θ^4 , fazendo desaparecer a interação dinâmica. Assim, para o caso $S = 1/2$, o resultado de Callen desvia-se bastante da magnetização obtida por Dyson.

c) "Decoupling" de Dembinski

A fim de evitar os resultados discrepantes do "decoupling" de Callen para o caso $S = 1/2$, Dembinski propôs a seguinte aproximação (válida somente para $B_\ell = S_\ell^-$) :

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^Z S_j^+ | S_\ell^- \rangle\rangle_E \rightarrow \langle S^Z \rangle \langle\langle S_j^+ | S_\ell^- \rangle\rangle - 2 \langle S^Z \rangle \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ | S_\ell^- \rangle\rangle_E \\ + 2 \delta_{g\ell} \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle S^Z \rangle \langle\langle S_j^+ S_\ell^- \rangle\rangle_E \end{aligned} \quad (\text{III, 18})$$

Com esse "decoupling" obtemos para a magnetização, a baixas temperaturas.

$$M(T) = \frac{1}{2} - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - 4a_0 a_1 Q' \theta^4 \quad (\text{III, 19})$$

Portanto, o "decoupling" de Dembinski elimina o termo espúrio em θ^3 e obtêm, para Q' , valores em boa concordância com Q como podemos ver na tabela abaixo:

	Dyson	Dembinski
s.c.	1.673	1.68
b.c.c.	1.443	1.52
f.c.c.	1.330	1.45

Tabela (III, 1) Ref. (14)

Finalmente, a altas temperaturas, os resultados obtidos por meio dos "decouplings" devem ser comparados com a teoria do Campo Molecular. Nas tabelas abaixo comparamos os resultados obtidos para a temperatura de Curie ($K_B T_C / J$), nos diversos casos.

S=1/2	Campo Molecular	R.P.A. e Dembinski
s.c.	1.93	1.978
b.c.c.	2.39	2.871
f.c.c.	4.24	4.46

Tabela (III 2) Ref. (14)

ESTRUTURA CÚBICA SIMPLES - S. C.			
S	Callen	R.P.A. e Dembinski	Campo Molecular
1/2	2.7	1.978	1.93
1	6.7	5.276	5.36
3/2	11.7	9.892	10.63
2	18.5	15.83	17.46

Tabela (II,3) Ref. (14)

Método da Perturbação Estatística (11)

Os objetivos desse método são:

- definir operadores de criação para o Hamiltoniano do problema em termos dos comutadores desses operadores com $\hat{H}_0$;

b) deduzir expressões que relacionem médias estatísticas desses operadores;

c) a partir dessas expressões, calcular médias estatísticas para quaisquer operadores hermitianos que representem um observável do sistema.

Suponhamos que seja possível determinar um ou mais operadores de criação, aproximados, θ_i^+ (θ_i^+ e θ_i não precisam ser, necessariamente, "bons" operadores de fermions ou de bosons, isto é, não faremos restrições aos comutadores e anti comutadores entre eles) tais que satisfaçam a seguinte equação:

$$[\mathcal{H}, \theta_i^+] = \omega_i \theta_i^+ + R_i^+ \quad (\text{III, 20})$$

onde $\mathcal{H}$ é o Hamiltoniano do sistema considerado, os ω_i são números reais, positivos e, R_i^+ é um operador pequeno, entendendo-se por esse termo que qualquer média estatística envolvendo R_i^+ deverá ser pequena. Em outras palavras

$$\langle R_i^+ \Omega \rangle \equiv \text{"pequeno"} \quad (\text{III, 21})$$

onde Ω é um operador qualquer. (Na prática o procedimento é tratar os efeitos de R_i^+ como uma perturbação e posteriormente verificar se a contribuição de R_i^+ , poderá, efetivamente, ser considerada como uma perturbação).

Consideremos, em primeiro lugar, a aproximação de ordem zero. Nesse caso R_i^+ pode ser desprezado, e a equação (III, 20) fica:

$$[\mathcal{H}, \theta_i^+] = \omega_i \theta_i^+ \quad (\text{III, 22})$$

Com o auxílio dessa equação calcularemos $[\theta_i^+, e^\alpha]$, onde α é um número. Pode-se mostrar, por indução, que,

$$\mathcal{H}^\eta \theta_i^+ = \theta_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i)^\eta, \quad \eta = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{III}, 23)$$

Expandindo e^α em série de potências e usando (III, 23) encontramos que:

$$e^{\alpha \mathcal{H}} \theta_i^+ = e^{\alpha \omega_i} \theta_i^+ e^{\alpha \mathcal{H}} \quad (\text{III}, 24)$$

Sendo a função de partição dada por:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{K_B T} \quad (\text{III}, 25)$$

Calculemos a média estatística $\langle \theta_i^+ \Omega \rangle$ para um operador Ω qualquer.

$$\langle \theta_i^+ \Omega \rangle = Z^{-1} \text{Tr} \theta_i^+ \Omega e^{-\beta \mathcal{H}}$$

Usando a propriedade de permutação cíclica dos traços obtemos:

$$\langle \theta_i^+ \Omega \rangle = e^{-\beta \omega_i} Z^{-1} \text{Tr} \Omega \theta_i^+ e^{-\beta \mathcal{H}}$$

ou

$$\langle \theta_i^+ \Omega \rangle = e^{-\beta \omega_i} \langle \Omega \theta_i^+ \rangle \quad (\text{III}, 26a)$$

E, de forma análoga para θ_i (com ω_i substituído por $-\omega_i$ em (III, 22))

$$\langle \Omega \theta_i \rangle = e^{-\beta \omega_i} \langle \theta_i \Omega \rangle \quad (\text{III}, 26b)$$

As equações (III, 26a e 26b) podem ser escritas em termos dos comutadores e anticomutadores da seguinte maneira:

Reescrevemos a equação (III, 26a), multiplicando-a por $e^{\beta \omega_i}$,

$$[e^{\beta \omega_i} \pm 1] \langle \theta_i^+ \Omega \rangle = \langle \Omega \theta_i^+ \pm \theta_i^+ \Omega \rangle$$

Introduzindo a notação:

$$\phi_i(\pm) = [e^{\beta\omega_i} \pm 1]^{-1} \quad (\text{III}, 27)$$

obtemos:

$$\langle \theta_i^+ \Omega \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\Omega, \theta_i^+]_{\pm} \rangle \quad (\text{III}, 28a)$$

Analogamente,

$$\langle \Omega \theta_i \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\theta_i, \Omega]_{\pm} \rangle \quad (\text{III}, 28b)$$

As equações (III, 28a e 28b) são as equações básicas em ordem zero.

Consideremos agora o termo R_i^+ . A eq. (III, 20) pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{H} \theta_i^+ = \theta_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i) + R_i^+ \quad (\text{III}, 29)$$

Mostra-se, por indução, que:

$$\mathcal{H}^n \theta_i^+ = \theta_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i)^n + \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{H}^p R_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i)^{n-p-1}, \quad n=1, 2, \dots \quad (\text{III}, 30)$$

Com o emprego da expansão em série de potências de $e^{-\beta \mathcal{H}}$ eq. (III, 30) dá:

$$e^{-\beta \mathcal{H}} \theta_i^+ = e^{-\beta \omega_i} \theta_i^+ e^{-\beta \mathcal{H}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta)^n \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{H}^p R_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i)^{n-p-1} \quad (\text{III}, 31)$$

Calculemos agora a média estatística $\langle \theta_i^+ \Omega \rangle$, para um operador Ω qualquer. Com um procedimento análogo ao empregado no cálculo de (III, 26), obtemos:

$$\langle \theta_i^+ \Omega \rangle = e^{-\beta \omega_i} \langle \Omega \theta_i^+ \rangle + Z^{-1} \text{Tr} \Omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta)^n \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{H}^p R_i^+ (\mathcal{H} + \omega_i)^{n-p-1} \quad (\text{III}, 32)$$

Embora essa equação seja exata, o segundo termo, no lado direito, $\bar{e}$, em geral, difícil de ser calculado. Faremos uma aproximação em (III,32) para o caso $\Omega=0_i$. Um cálculo - aproximado do segundo termo, chamado termo de perturbação, - pode ser feito empregando-se o hermiteano conjugado de (III, 30)

$$\theta_i^{\dagger} \bar{e}^n = (\bar{e} + \omega_i)^n \theta_i^{\dagger} + \mathcal{O}(R_i) \quad (\text{III, 33})$$

Usando (III,33) e a propriedade cíclica dos traços o termo de perturbação pode ser escrito em ordem zero como:

$$\begin{aligned} Z^{-1} \text{Tr} \theta_i^{\dagger} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta)^n \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{L} P_{R_i^{\dagger}} (\bar{e} + \omega_i)^{n-p-1} &= \\ &= -\beta Z^{-1} \text{Tr} R_i^{\dagger} \theta_i^{\dagger} e^{-\beta \bar{e}} + \mathcal{O}(R_i^{\dagger} R_i) \end{aligned} \quad (\text{III, 34})$$

E, a equação (III, 32) fica:

$$\langle \theta_i^{\dagger} \theta_i \rangle = e^{-\beta \omega_i} \langle \theta_i^{\dagger} \theta_i^{\dagger} \rangle - \beta \langle R_i^{\dagger} \theta_i^{\dagger} \rangle + \mathcal{O}(R_i^{\dagger} R_i) \quad (\text{III, 35})$$

Se considerarmos $R_i^{\dagger}$ como sendo de ordem ϵ , onde ϵ é um número pequeno em comparação com 1, então, a perturbação será de ordem ϵ e, o erro, de ordem ϵ^2 . O termo que dá a perturbação, $\langle R_i^{\dagger} \theta_i^{\dagger} \rangle$, pode ser calculado usando-se as equações básicas de ordem zero, (III, 28), com a substituição $\Omega = R_i^{\dagger}$. Esse procedimento dá o valor correto de (III, 35) até ordem ϵ .

Da mesma forma que para (III, 26) podemos escrever (III,35) em termos de comutadores ou anticomutadores.

$$\langle \theta_i^{\dagger} \theta_i \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\theta_i, \theta_i^{\dagger}]_{\pm} \rangle \pm \beta [\phi_i(\pm) \mp 1] \langle R_i^{\dagger} \theta_i^{\dagger} \rangle + \mathcal{O}(R_i^{\dagger} R_i) \quad (\text{III, 36})$$

As funções de correlação, dependentes do tempo, podem ser facilmente determinadas. Sabemos que:

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \langle A(t-t') B \rangle$$

Então, precisamos calcular somente as funções $\langle \theta_i^+(t) \Omega \rangle$ e $\langle \Omega \theta_i(t) \rangle$. Usando as eqs. (III, 28a e 28b) e lembrando que, na representação de Heisenberg (com $\hbar = 1$ e independente do tempo)

$$\theta_i^+(t) = e^{i\omega_i t} \theta_i^+ e^{-i\omega_i t}$$

que pode ser escrita empregando-se (III, 24) com $\alpha = it$

$$\theta_i^+(t) = e^{i\omega_i t} \theta_i^+$$

obtemos:

$$\langle \theta_i^+(t) \Omega \rangle = e^{i\omega_i t} \phi(\pm) \langle [\Omega, \theta_i^+]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 37a})$$

$$\langle \Omega \theta_i(t) \rangle = e^{-i\omega_i t} \phi(\pm) \langle [\theta_i, \Omega]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 37b})$$

Finalmente, a renormalização da energia pode ser calculada da seguinte maneira:

Seja ω_{1i} a correção, em primeira ordem, na energia. A equação (III, 20) pode ser escrita como:

$$[\mathcal{H}, \theta_i^+]_{\pm} = (\omega_i + \omega_{1i}) \theta_i^+ + (R_i^+ - \omega_{1i} \theta_i^+) ; \quad \omega_i + \omega_{1i} > 0 \quad (\text{III, 38})$$

e, os resultados obtidos anteriormente serão válidos se fizermos as substituições $\omega_i \rightarrow \omega_i + \omega_{1i}$ e $R_i^+ \rightarrow R_i^+ - \omega_{1i} \theta_i^+$. Desprezando os termos de ordem $R_i^+ R_i$ em (III, 36) obtemos:

$$\langle \theta_i^+ \theta_i \rangle = \phi_{1i}(\pm) \langle [\theta_i, \theta_i^+]_{\pm} \rangle \pm \beta [\phi_{1i}(\pm) + 1] \langle (R_i^+ - \omega_{1i} \theta_i^+) \theta_i \rangle \quad (\text{III, 39})$$

onde

$$\phi_{1i}(\pm) = \left\{ e^{[\beta(\omega_i \pm 1)] \pm 1} \right\}^{-1} \quad (\text{III, 40})$$

ω_{1i} é determinado impondo a condição de que o termo de perturbação em (III, 39) seja igual a zero, isto é:

$$\langle (R_i^+ - \omega_{1i} \theta_i^+) \theta_i \rangle = 0 \quad (\text{III, 41})$$

ou

$$\omega_{1i} = \frac{\langle R_i^+ \theta_i \rangle}{\langle \theta_i^+ \theta_i \rangle} \quad (\text{III, 42})$$

Com ω_{1i} dado por (III, 42) a equação (III, 39) fica reduzida a uma equação de ordem zero, com energia renormalizada.

$$\langle \theta_i^+ \theta_i \rangle = \phi_{1i}(\pm) \langle [\theta_i, \theta_i^+]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 43})$$

As equações (III, 42) e (III, 43) podem, em princípio, serem resolvidas autoconsistentemente. O resultado para $\langle \theta_i^+ \theta_i \rangle$, entretanto, deve ser considerado de primeira ordem desde que, os termos de ordem mais alta em R_i^+ , R_i foram desprezados em (III, 36). Entretanto, se $\omega_{1i} \ll \omega_i$, o cálculo de $\langle \theta_i^+ \theta_i \rangle$ por (III, 43), com ω_{1i} dado por (III, 42), é razoável.

As equações básicas que deduzimos são válidas para qualquer número de operadores θ_i^+ que satisfaçam a equação do comutador com $\mathcal{H}_0$. Entretanto, o método será de maior utilidade se forem encontrados um número suficiente de operadores θ_i^+ que expandam o espaço de $\mathcal{H}$, de modo que qualquer operador possa ser representado como uma combinação linear de θ_i^+ e θ_i ; e, as médias estatísticas desses operadores possam ser calculadas utilizando-se as equações básicas (III, 28) ou (III, 39).

Vejamos agora quais são os resultados que se obtêm

quando se aplica o Método da Perturbação Estatística ao Hamiltoniano de Heisenberg.

Consideremos, em primeiro lugar, o caso das ondas de spin de Bloch. A equação (II, 8) nos permite escrever que:

$$[\mathcal{H}, A_k^+] = \mu h A_k^+ - 2 \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) A_{k'}^+ B_{k'-k} \quad (\text{III, 44})$$

Uma série de potências para o operador S_n^Z , para um S arbitrário $\bar{e}$: (22)

$$S_n^Z = S - S_n^- S_n^+ - \dots \quad (\text{III, 45})$$

Com o auxílio das equações (II, 5a,b,c) obtemos a transformada de (III, 45), que $\bar{e}$:

$$B_k = S \delta(\vec{k}) - N^{-1} \sum_{k'} A_{k'-k}^+ A_{k'} - \dots \quad (\text{III, 46})$$

$\sim \dots$ significa a contribuição dos operadores de ordem mais alta (que contribuiriam em ordens mais altas em ϕ_k para as médias estatísticas).

A equação (III, 46) é uma expansão para baixas temperaturas, o termo dominante é precisamente o valor do estado fundamental ($S_n^Z = S$). Usando-se (III, 46) a equação (III, 44) pode ser transformada numa expansão a baixas temperaturas

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, A_k^+] &= \omega_k A_k^+ + 2N^{-1} \sum_{k''} (J_{k'} - J_{k'-k}) \\ &\times A_{k'}^+ A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} + \dots \end{aligned} \quad (\text{III, 47})$$

onde

$$\omega_k = \mu h + 2S(J_0 - J_k) \quad (\text{III, 48})$$

Tendo em vista os resultados (III, 47) e (III, 48) podemos aplicar as equações básicas do método da perturbação estatística.

Na aproximação de ordem zero, (III, 20), (III, 27) e (II, 28a), teremos:

$$[\mathcal{H}, A_k^+]_- = \omega_k A_k^+ \quad (\text{III, 49})$$

$$\langle A_k^+ A_k \rangle = \phi_k \langle [A_k, A_k^+] \rangle \quad (\text{III, 50})$$

$$\phi_k = [e^{B\omega_k} - 1]^{-1} \quad (\text{III, 51})$$

Pelas definições (II, 5a,b,c) e (II, 1a,b,c) temos que:

$$[A_k, A_{k'}^+]_- = S^{-1} B_{k-k'}, \quad (\text{III, 51a})$$

$$[A_k, B_{k'}]_- = -N^{-1} A_{k+k'}, \quad ; \quad [A_k^+, B_{k'}]_- = N^{-1} A_{k-k'}, \quad (\text{III, 51b})$$

$$[A_k, A_{k'}]_- = [B_k, B_{k'}]_- = 0 \quad (\text{III, 51c})$$

Por (III, 51a) e (III, 46) $[A_k, A_k^+] = 1 - \dots$ e assim, em ordem zero, (III, 47) fica:

$$\langle A_k^+ A_k \rangle = \phi_k \quad (\text{III, 52})$$

Multiplicando (III, 52) por $N^{-1} \sum_k$ ficamos com:

$$N^{-1} \sum_k \langle A_k^+ A_k \rangle = N^{-1} \sum_k \phi_k \quad (\text{III, 53})$$

O termo dominante é obtido a partir de (III, 46)

$$B_0 = S - N^{-1} \sum_k A_k^+ A_k$$

ou

$$S - \langle B_0 \rangle = N^{-1} \sum_k \langle A_k^+ A_k \rangle \quad (\text{III, 54})$$

Comparando (III, 53) e (III, 54) obtemos:

$$S - \langle B_0 \rangle = N^{-1} \sum_k \phi_k \quad (\text{III, 55})$$

Uma vez que $\langle B_0 \rangle = \langle S^Z \rangle$ a equação (III, 55) pode ser escrita como:

$$\langle S^Z \rangle = S - \phi \quad (\text{III, 56})$$

onde

$$\phi = N^{-1} \sum_k \phi_k \quad (\text{III, 57})$$

Para o cálculo de (III, 57) ver refs. (14 e 21). O resultado obtido é:

$$\phi = a_0 \theta^{3/2} + a_1 \theta^{5/2} + a_2 \theta^{7/2} + \dots \quad (\text{III, 58})$$

A magnetização espontânea que se obtém pelo método de perturbação estatística, em aproximação de ordem zero, é, portanto, igual à obtida por Bloch. Vejamos agora que resultado é obtido quando se considera o termo de perturbação em (III, 47). Esse termo é dado por:

$$R_k^+ = 2N^{-1} \sum_{k''} (J_{k'} - J_{k'-k}) A_{k'}^+ A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} \quad (\text{III, 59})$$

Usando a equação (II, 36), onde desprezamos os termos de ordem $\mathcal{O}(R_i^+ R_i)$, que contribuem para a magnetização com termos superiores a quarta potência da temperatura, obtemos, depois de multiplicar por $N^{-1} \sum_k$,

$$N^{-1} \sum_k \langle A_k^+ A_k \rangle = N^{-1} \sum_k \phi_k \langle [A_k, A_k^+] \rangle = -BN^{-1} \sum_k (\phi_k + 1) \langle R_k^+ A_k \rangle \quad (\text{III, 60})$$

O termo

$$\langle R_k^+ A_k \rangle = 2N^{-1} \sum_{k''} \langle A_k^+ A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} A_k \rangle$$

pode ser calculado fazendo-se a aproximação da média estatística a quatro operadores por meio de um dos "decouplings" introduzidos no Capítulo II. Entretanto, o cálculo de $\langle R_k^+ A_k \rangle$ por intermédio das equações básicas de primeira ordem é uma aproximação razoável. Nesse caso, pela equação (III, 28), teremos:

$$\langle R_k^+ A_k \rangle = \phi_k \langle [A_k R_k^+]_- \rangle \quad (\text{III, 61})$$

Calculando esse comutador e desprezando os termos de ordem superior a quadrática, (III, 61) fica:

$$\begin{aligned} \langle R_k^+ A_k \rangle &= 2\phi_k N^{-1} \sum_{k''} (J_{k'} - J_{k' - k}) \langle A_{k''}^+ A_{k''} \rangle \\ &\times [\delta(\vec{k}' - \vec{k}) + \delta(\vec{k}' - \vec{k}'') - N^{-1} S^{-1}] \end{aligned} \quad (\text{III, 62})$$

Mas, de (III, 52) sabemos que $\langle A_{k''}^+ A_{k''} \rangle = \phi_{k''}$ e assim, o termo de perturbação em (III, 62) fica:

$$\begin{aligned} &- \phi N^{-1} \sum_k (\phi_{k+1}) \langle R_k^+ A_k \rangle = \\ &= -2\phi N^{-2} \sum_{kk'} (\phi_k^2 + \phi_k) \phi_{k'} (J_k + J_{k'} - J_{k' - k} - J_0) = \frac{2}{S} a_0 a_1 \theta^4 \end{aligned} \quad (\text{III, 63})$$

Por outro lado, por (III, 51a) e (III, 54)

$$\begin{aligned} \langle [A_k, A_k^+]_- \rangle &= S^{-1} \langle B_0 \rangle = 1 - S^{-1} N^{-1} \sum_{k'} \langle A_{k'}^+ A_{k'} \rangle - \dots \\ &= 1 - S^{-1} \phi \end{aligned} \quad (\text{III, 64})$$

Assim,

$$N^{-1} \sum_k \phi_k \langle [A_k, A_k^+]_- \rangle = \phi - S^{-1} \phi^2 - \dots \quad (\text{III, 65})$$

Consideremos, a fim de simplificar os cálculos, $S^{-1/2}$. Nesse caso a equação (III, 46) nos dá:

$$S - B_0 = N^{-1} \sum_k A_k^+ A_k,$$

o que nos permite escrever o lado esquerdo de (III, 18) como:

$$N^{-1} \sum_k \langle A_k^+ A_k \rangle = S - \langle S^Z \rangle \quad (\text{III}, 66)$$

Combinando os resultados (III, 66), (III, 65) e (III, 63) obtemos:

$$\langle S^Z \rangle = S - \Phi + S^{-1} \Phi^2 - \frac{2}{5} a_0 a_1 \theta^4 ; \quad S = \frac{1}{2} \quad (\text{III}, 67)$$

Com o valor de Φ dado por (III, 58) a magnetização fica:

$$\begin{aligned} \langle S^Z \rangle = S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} + \dots + S^{-1} a_0^2 \theta^3 + 2S^{-1} a_0 a_1 \theta^4 + \dots \\ - \frac{2}{5} a_0 a_1 \theta^4 \end{aligned} \quad (\text{III}, 68)$$

Se compararmos esse resultado com o obtido por Dyson, (II, 15) (II, 16) vemos que surge um termo espúrio em θ^3 e, ainda mais, o termo devido à interação dinâmica desaparece.

O termo em θ^3 bem como o em θ^4 que cancela devido à interação dinâmica, tem sua origem no fator $S^{-1} \Phi^2$, que aparece devido ao fato de que os operadores A_k^+ e A_k não obedecem as regras de comutação de bosons, equação (III, 64), ou seja, o termo em θ^3 tem sua origem na interação cinemática. É de se esperar, portanto, que se aplicamos o método da perturbação estatística ao Hamiltoniano de Heisenberg dado em termos de operadores de bosons, o termo em θ^3 desapareça. O Hamiltoniano de Heisenberg em termos de operadores de bosons é exatamente o Hamiltoniano de Dyson, equação (II, 14). Entretanto, a aplicação do método não é imediata, uma vez que, conforme vimos -

no Capítulo II, o Hamiltoniano de Dyson é não hermiteano. Devemos, portanto, estender o método da perturbação estatística a um Hamiltoniano não hermiteano para aplicá-lo ao Hamiltoniano de Dyson (12).

Para esse fim consideremos um Hamiltoniano não hermiteano $\mathcal{H}_{nh}$ e suponhamos que seja possível definir um operador de criação Γ_i^+ tal que a equação

$$[\mathcal{H}_{nh}, \Gamma_i^+] = \omega_i \Gamma_i^+ + \bar{R}_i^+ \quad (\text{III}, 69)$$

com ω_i um número real, positivo, seja satisfeita.

Seja τ um operador não unitário, tal que possamos definir τ^{-1} , ($\tau^{-1} \tau = 1$). Transformemos $\mathcal{H}_{nh}$ num operador hermiteano $\mathcal{H}_h$ por meio da seguinte operação:

$$\mathcal{H}_h = \tau^{-1} \mathcal{H}_{nh} \tau \quad (\text{III}, 70)$$

Da mesma forma

$$\theta_i^+ = \tau^{-1} \Gamma_i^+ \tau \quad (\text{III}, 71a)$$

$$R_i^+ = \tau^{-1} \bar{R}_i^+ \tau \quad (\text{III}, 71b)$$

Desse modo, (III, 69) fica:

$$[\mathcal{H}_h, \theta_i^+] = \omega_i \theta_i^+ + R_i^+ \quad (\text{III}, 72)$$

Estamos agora em condições de aplicar o formalismo desenvolvido no capítulo II. As equações (II, 48a, b) podem ser escritas como:

$$\langle \tau^{-1} \Gamma_i^+ \tau \tau^{-1} \psi \tau \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\tau^{-1} \psi \tau, \tau^{-1} \Gamma_i^+ \tau]_{\pm} \rangle \quad (\text{III}, 73a)$$

$$\langle \tau^{-1} \psi \tau \tau^{-1} \Gamma_i \tau \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\tau^{-1} \Gamma_i \tau, \tau^{-1} \psi \tau]_{\pm} \rangle \quad (\text{III}, 73b)$$

onde $\Omega = \tau^{-1} \psi \tau$

O comutador ou anticomutador que aparece em (III, 31a) pode ser escrito como

$$[\tau^{-1} \psi \tau, \tau^{-1} \Gamma_i^+ \tau]_{\pm} = \tau^{-1} [\psi, \Gamma_i^+]_{\pm} \tau \quad (\text{III, 74})$$

Substituindo em (III, 73)

$$\langle \tau^{-1} \Gamma_i^+ \tau \tau^{-1} \psi \tau \rangle = \phi_i(\pm) \langle \tau^{-1} [\psi, \Gamma_i^+]_{\pm} \tau \rangle \quad (\text{III, 75})$$

Como a matriz de densidade $\bar{\epsilon} : \rho = e^{-\beta \mathcal{H}_{nh}}$ podemos calcular os valores médios:

$$Z^{-1} \text{Tr} \tau^{-1} \Gamma_i^+ \psi \tau \rho = \phi_i(\pm) Z^{-1} \text{Tr} \tau^{-1} [\psi, \Gamma_i^+]_{\pm} \tau \rho$$

Usando a propriedade cíclica dos traços obtemos

$$\langle \Gamma_i^+ \psi \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\psi, \Gamma_i^+]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 76})$$

Analogamente

$$\langle \psi \Gamma_i \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\Gamma_i, \psi]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 76})$$

Essas equações dão os valores médios na aproximação - de ordem zero. Da mesma forma podemos obter a equação básica da aproximação em primeira ordem, equivalente a (III, 36)

$$\langle \Gamma_i^+ \Gamma_i \rangle = \phi_i(\pm) \langle [\Gamma_i, \Gamma_i^+]_{\pm} \rangle \pm \beta [\phi_i(\pm) \bar{\Gamma}] \langle \bar{R}_i^+ \Gamma_i \rangle + \mathcal{O}(\bar{R}_i^+ \bar{R}_i) \quad (\text{III, 77})$$

Para determinarmos a energia renormalizada seguimos o mesmo caminho desenvolvido no Capítulo II, obtendo:

$$\langle \Gamma_i^+ \Gamma_i \rangle = \phi_{1i}(\pm) \langle [\Gamma_i, \Gamma_i^+]_{\pm} \rangle \quad (\text{III, 78})$$

onde

$$\omega_{ji} = \frac{\langle \bar{R}_i^+ \Gamma_i \rangle}{\langle \Gamma_i^+ \Gamma_i \rangle} \quad (\text{III, } 79)$$

Usando as equações (III, 76a, b), (III, 78) e (III, 79) podemos aplicar o método da perturbação estatística ao Hamiltoniano de Dyson (II, 14).

Reescrevendo (II, 14):

$$\mathcal{H}_D = -\mu h N S - J_0 S^2 N + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k \quad (\text{III}$$

$$+ N^{-1} \sum_{kk'} (J_k - J_{k-k'}) a_k^+ a_{k'}^+ a_{k''} a_{k+k'-k''} \quad (\text{III, } 80)$$

Sendo a_k^+ o operador de criação das ondas de spin de Dyson conhecendo-se a relação $[a_k, a_{k'}^+]_- = \delta_{kk'}$, calculemos o comutador:

$$[\mathcal{H}_D, a_k^+] = \omega_k a_k^+ + \frac{2}{N} \sum_{k'k''} (J_{k'} - J_{k'-k}) a_{k'}^+ a_{k''}^+ a_{k'+k''-k} \quad (\text{III, } 81)$$

Onde, tendo em vista o método da perturbação estatística,

$$\bar{R}_i^+ = \frac{2}{N} \sum_{k'k''} (J_{k'} - J_{k'-k}) a_{k'}^+ a_{k''}^+ a_{k'+k''-k} \quad (\text{III, } 82)$$

Na aproximação de ordem zero desprezamos o termo $\bar{R}_i^+$. Por (III, 76a) ficamos com

$$\langle a_k^+ a_k \rangle = \phi_k \quad (\text{III, } 83)$$

ϕ_k definido como em (III, 51).

Empregando a equação (III, 53) e seguintes, reobtemos a magnetização para o caso da onda de spin de Bloch independentes.

Consideremos agora o efeito do termo de perturbação $\bar{R}_1^+$. Pela equação (III, 79) (multiplicada por $N^{-1} \sum_k$)

$$N^{-1} \sum_k \langle a_k^+ a_k \rangle = N^{-1} \sum_k \phi_k - \frac{\beta}{N} \sum_k (\phi_k + 1) \langle \bar{R}_k^+ a_k \rangle \quad (\text{III, 84})$$

Calculemos $\langle \bar{R}_k^+ a_k \rangle$ usando a equação de ordem zero (III, 76)

$$\langle \bar{R}_k^+ a_k \rangle = \phi_k \langle [a_k, \bar{R}_k^+]_- \rangle \quad (\text{III, 85})$$

Mas

$$[a_k, \bar{R}_k^+]_- = \frac{2}{N} \sum_{k'} (J_{k,k'} + J_{k,-k'} - J_0) a_{k'}^+ a_{k'} \quad (\text{III, 86})$$

Substituindo (III, 86) e (III, 85) em (III, 84), obtemos:

$$N^{-1} \sum_k \langle a_k^+ a_k \rangle = \phi + \frac{2}{S} a_0 a_1 \theta^4 \quad (\text{III, 87})$$

E, a magnetização, com aproximação de primeira ordem, é dada por:

$$\langle S^Z \rangle = S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - \frac{2}{S} a_0 a_1 \theta^4 + \mathcal{O}(\theta^{9/2}) \quad (\text{III, 88})$$

Assim, levando-se em conta o termo $\bar{R}_1^+$, obtivemos um resultado que concorda com o de Dyson (a menos do fator Q). Concluimos portanto, que, a baixas temperaturas, o método da perturbação estatística aplicado às ondas de spin de Dyson não viola nem a cinemática local do spin, nem o comportamento de quase-partícula.

Duas tentativas para melhorar as aproximações em ordem zero e em primeira ordem são possíveis. Essas possibilidades são: 1) desenvolver o termo perturbativo (III, 32), - que é exato, numa série de potência nos operadores R_i^+ , R_i pela comutação repetida desses operadores com $\mathcal{H}$ e 2) renormalizar os operadores θ_i^+ de modo a fazer R_i^+ ainda menor, especialmente para aqueles R_i^+ que contribuem mais para a mecânica estatística.

Vejamos como a correção em segunda ordem afeta a energia e a magnetização. Para esse fim definamos o operador de perturbação:

$$R_{1k}^+ \equiv R_k^+ - \omega_{1k} a_k^+ \quad (\text{III, 89})$$

Usando as equações básicas de primeira ordem teremos:

$$\omega_{2k} = \frac{\langle R_{1k}^+ a_k \rangle}{\phi_{1k}} = \frac{\phi_{1k} \langle [a_k, R_{1k}^+]_- \rangle}{\phi_{1k}} = \langle [a_k, R_{1k}^+]_- \rangle \quad (\text{III, 90})$$

Com o resultado (III, 86) o comutador em (III, 90) é dado por:

$$[a_k, R_{1k}^+]_- = \frac{2}{N} \sum_{k'} (J_{k'} + J_k - J_{k'-k} - J_0) a_{k'}^+ a_k - \omega_{1k}$$

E, assim (III, 90) fica:

$$\omega_{2k} = \frac{2}{N} \sum_{k'} (J_{k'} + J_k - J_{k'-k} - J_0) \langle a_{k'}^+ a_k \rangle - \omega_{1k} \quad (\text{III, 91})$$

$$\text{Mas, } \sum_{k'} (J_{k'} + J_k - J_{k'-k} - J_0) \langle a_{k'}^+ a_k \rangle =$$

$$= \sum_{k'} (J_{k'} + J_k - J_{k'-k} - J_0) \phi_{1k'} \quad (\text{III, 92})$$

onde

$$\phi_{1k'} = \frac{1}{e^{\beta(\omega_{k'} - \omega_{1k})} - 1}$$

E, a correção em segunda ordem, na energia, é:

$$\omega_{2k} = -2 \left(1 - \frac{J_k}{J_0}\right) \frac{1}{N} \sum_{k'} (J_0 - J_{k'}) \phi_{1k'} - \omega_{1k}$$

$$\omega_{2k} = -2(J_0 - J_k) \left[\pi v \theta^{5/2} \left(1 + \frac{5}{2} (\pi v/S) \zeta(5/2) \theta^{5/2}\right) \right] - \omega_{1k}$$

Lembrando que: $\omega_k = 2S(J_0 - J_k)$ e $\omega_{1k} = -\omega_k \frac{\pi \theta}{S} \zeta(5/2) \theta^{5/2}$

$$\omega_{2k} = \omega_k (\pi v/S) \theta^5 \left\{ \left[\zeta(5/2) - 1 \right] \theta^{-5/2} - \frac{5}{2} \pi v/S \zeta(5/2) \right\} \quad (\text{III, 93})$$

Obtemos assim, para a correção em segunda ordem na energia renormalizada, um termo em θ^5 o que mostra a pouca importância desse termo no cálculo da magnetização.

Concluimos, portanto, que um refinamento nos resultados da magnetização não pode ser obtido em ordem superior a primeira, pela renormalização da energia, utilizando-se as equações básicas de ordem zero. Uma maneira de superar essa dificuldade seria partirmos diretamente da equação (III, 36) isso leva, entretanto, a grandes dificuldades nos cálculos.

Equivalência entre os dois métodos

Retornemos agora ao Hamiltoniano de Heisenberg dado em termos das transformadas de Fourier dos operadores de spin. Veremos como diferentes aproximações para o termo de perturbação leva a resultados diferentes na energia renormalizada. As aproximações que estudaremos correspondem aos vários "decouplings".

a) "Decoupling" R.P.A.

Em termos da aproximação de Tyablikov ($S_n^Z - \langle S^Z \rangle \approx 0$) teremos

$$S_n^Z = \langle S^Z \rangle + (S_n^Z - \langle S^Z \rangle) \quad (\text{III, 94})$$

Empregando-se (I, 5a) a transformada de (III, 94) é:

$$B_k = \langle S^Z \rangle \delta(\vec{k}) + [B_k - \langle S^Z \rangle] \quad (\text{III, 95})$$

Com o Hamiltoniano dado por (I, 7) calculemos o comutador:

$$[H, A_k^+]_- = \epsilon_k A_k^+ + P_k^+ \quad (\text{III, 96})$$

onde

$$\epsilon_k = \mu h + 2 \langle S^Z \rangle (J_0 - J_k) \quad (\text{III, 97})$$

$$P_k^+ = 2 \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) A_{k'}^+ [B_{k'-k} - \langle S^Z \rangle \delta(\vec{k}' - \vec{k})] \quad (\text{III, 98})$$

Na aproximação em ordem zero

$$\langle A_k^+ A_k \rangle = \psi_k \langle [A_k, A_k^+]_- \rangle \quad (\text{III, 99})$$

$$\psi_k = [e^{\beta \epsilon_k} - 1]^{-1} \quad (\text{III, 100})$$

Por (III, 51a) $[A_k, A_k^+]_- = S^{-1} B_0$, portanto:

$$\langle A_k^+ A_k \rangle = S^{-1} \langle S^Z \rangle \psi_k \quad (\text{III, 101})$$

Consideremos $S = 1/2$. B_0 é dado por (III, 46). Multiplicando-se (III, 101) por $S^{-1} \sum_k$ obtemos:

$$\langle S^Z \rangle (1 + S^{-1} \psi) = S; \quad S = 1/2 \quad (\text{III, 102})$$

$$\Psi = N^{-1} \sum_k \psi_k \quad (\text{III}, 103)$$

As equações (III, 103), (III, 102), (III, 100) e (III, 97) reproduzem os resultados de Tyablikov.

Pelas equações (II, 60), (II, 62) e (II, 63) teremos, para as energias renormalizadas:

$$\langle A_k^+ A_k \rangle = \psi_{1k} \langle [A_k, A_k^+] \rangle \quad (\text{III}, 104)$$

$$\psi_{1k} = \left[e^{\beta(\epsilon_k + \epsilon_{1k})} - 1 \right]^{-1} \quad (\text{III}, 105)$$

$$\epsilon_{1k} = \frac{\langle P_k^+ A_k \rangle}{\langle A_k^+ A_k \rangle} \quad (\text{III}, 106)$$

Quando $S = 1/2$ obtemos, como (III, 102) e (III, 103)

$$\langle S^Z \rangle (1 - S^{-1} \psi_1) = S \quad (\text{III}, 107)$$

$$\psi_1 = N^{-1} \sum_k \psi_{1k} \quad (\text{III}, 108)$$

b) "Decoupling" simétrico

Calculemos as energias renormalizadas, no caso do "decoupling" simétrico. Com a representação de S_n^Z dada por:

$$S_n^Z = \langle S^Z \rangle + \frac{1}{2} (1-\alpha) S_n^+ S_n^- - \frac{1}{2} (1+\alpha) S_n^- S_n^+ \quad (\text{III}, 109)$$

onde $\alpha = S^{-1} \langle S^Z \rangle$; ($S=1/2$). A transformada de Fourier de (III, 109) é obtida por meio de (II, 5a,b,c)

$$\begin{aligned} B_k = \langle S^Z \rangle \delta(\vec{k}) + \frac{1}{2N} (1-\alpha) \sum_{k'} A_{k'} A_{k'-k}^+ \\ - \frac{1}{2N} (1+\alpha) \sum_{k'} A_{k'-k}^+ A_{k'} \end{aligned} \quad (\text{III}, 110)$$

Substituindo (III, 109) em (III, 98) obtemos:

$$P_k^+ = N^{-1} \sum_{k''} (J_{k',-k} - J_{k'}) \left\{ (1-\alpha) A_k^+ A_{k''} A_{k''-k'+k} - (1+\alpha) A_k^+ A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} \right\} \quad (\text{III, 111})$$

Portanto:

$$\langle P_k^+ A_k \rangle = N^{-1} \sum_{k''} (J_{k',-k} - J_{k'}) \times \left\{ (1-\alpha) \langle A_k^+ A_{k''} A_{k''-k'+k} A_k \rangle - (1+\alpha) \langle A_k^+ A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} A_k \rangle \right\} \quad (\text{III, 112})$$

O problema, agora, consiste em se obter aproximações para os valores médios a quatro operadores. No "decoupling" simétrico essa aproximação é feita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \langle S_m^- S_g^+ S_g^- S_f^+ \rangle_{g \neq f} &= \langle S_g^+ S_g^- \rangle \langle S_m^- S_f^+ \rangle \\ &+ \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle S_m^- S_g^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 113a})$$

$$\begin{aligned} \langle S_m^- S_g^- S_g^+ S_f^+ \rangle_{g \neq f} &= \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle S_m^- S_f^+ \rangle \\ &+ \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle S_m^- S_g^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 113b})$$

Com o auxílio das relações:

$$\delta_{lj} = N^{-1} \sum_k e^{-ikl} e^{ikj} \quad (\text{III, 114})$$

$$\delta_{kk'} = N^{-1} \sum_j e^{-ikj} e^{ik'j} \quad (\text{III, 114})$$

e

$$S_l^- = \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_k e^{-ikl} A_k^+ \quad (\text{III, 115})$$

$$S_{\ell}^{+} = \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_k e^{ik\ell} A_k \quad (\text{III, 115b})$$

que são as transformadas inversas de (I, 5a,b), as equações (III, 65a,b) ficam:

$$\begin{aligned} \langle A_k^{+}, A_{k''} A_{k''-k'+k}^{+} A_k \rangle &\approx \langle A_k^{+}, A_{k''} \rangle \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_k \rangle \\ &+ \langle A_k^{+}, A_k \rangle \langle A_{k''} A_{k''-k'+k}^{+} \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 116a})$$

$$\begin{aligned} \langle A_k^{+}, A_{k''-k'+k}^{+} A_{k''} A_k \rangle &\approx \langle A_k^{+}, A_k \rangle \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_{k''} \rangle \\ &+ \langle A_k^{+}, A_{k''} \rangle \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_k \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 116b})$$

Usando (III, 116a,b) (III, 112) fica:

$$\begin{aligned} \langle P_k^{+} A_k \rangle &= - \frac{2\alpha}{N} \sum_{k'k''} (J_{k'-k} - J_{k'}) \langle A_k^{+}, A_{k''} \rangle \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_k \rangle \\ &- N^{-1} \sum_{k'k''} (J_{k'-k} - J_{k'}) \langle A_k^{+}, A_k \rangle \left[(1-\alpha) \langle A_{k''} A_{k''-k'+k}^{+} \rangle - \right. \\ &\left. - (1+\alpha) \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_{k''} \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{III, 117})$$

Tomando o valor médio de (III, 109) verificamos que o segundo termo de (III, 117) é igual a zero. Portanto

$$\langle P_k^{+} A_k \rangle = \frac{-2\langle S^Z \rangle}{NS} \sum_{k'k''} (J_{k'-k} - J_{k'}) \langle A_k^{+}, A_{k''} \rangle \langle A_{k''-k'+k}^{+} A_k \rangle \quad (\text{III, 118})$$

Por (III, 109) e (III, 51a) podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \langle A_k^{+}, A_{k''} \rangle &= \langle [A_{k''}, A_k^{+}] \rangle = \psi_{1k'} \langle \frac{B_{k''-k'}}{S} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \langle S^Z \rangle \delta_{k'k''} \end{aligned} \quad (\text{III, 119})$$

Portanto:

$$\langle P_k^+ A_k \rangle = \frac{-2\langle S^z \rangle^2}{S^2 N} \langle A_k^+ A_k \rangle \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) \psi_{1k'} \quad (\text{III, 120})$$

Pela equação (III, 100)

$$\epsilon_{1k} = \frac{-2\langle S^z \rangle^2}{S^2 N} \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) \psi_{1k'} \quad (\text{III, 121})$$

E, a energia renormalizada na aproximação simétrica fica:

$$\epsilon_k + \epsilon_{1k} = \mu h + 2\langle S^z \rangle (J_0 - J_k) + \frac{2\langle S^z \rangle^2}{NS^2} \sum_{k'} (J_{k'} - J_{k'-k}) \psi_{1k'} \quad (\text{III, 122})$$

Esse resultado, bem como (III, 107) e (III, 108) - coincide com o obtido pelo método das funções de Green, quando se emprega o "decoupling" simétrico. Portanto, a equivalência entre os dois métodos fica demonstrada também nesse caso.

Como vimos, esse "decoupling" quando aplicado ao caso $S = 1/2$ apresenta resultado bastante discrepante no limite de baixas temperaturas, quando comparado com os obtidos por Dyson. A saber, aparece um termo espúrio em θ^3 e o termo em θ^4 , responsável pela interação dinâmica, é cancelado. Vimos também que, no método das funções de Green esse problema foi superado pela introdução de "decoupling" de Dembinski. Investiguemos a possibilidade de se aplicar esse "decoupling" no caso do método da perturbação estatística.

c) "decoupling" de Dembinski

As equações de "decoupling" de Dembinski são: ⁽²⁰⁾

$$\begin{aligned} \langle S_m^- S_g^+ S_g^- S_f^+ \rangle_{g \neq f} &= \langle S_g^+ S_g^- \rangle \langle S_m^- S_f^+ \rangle + \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle S_m^- S_g^+ \rangle \\ &+ \delta_{gm} A \langle S_m^- S_f^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 123})$$

$$\begin{aligned} \langle S_m^- S_g^- S_g^+ S_f^+ \rangle_{g \neq f} &= \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle S_m^- S_f^+ \rangle + \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle S_m^- S_g^+ \rangle \\ &+ \delta_{gm} B \langle S_m^- S_f^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 123})$$

onde

$A = B = - \langle S_g^- S_g^+ \rangle$ nos limites de baixas e altas temperaturas.
Mas de (III, 109) para $S = \frac{1}{2}$ temos que

$$\langle S_g^- S_g^+ \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^Z \rangle \quad (\text{III, 124})$$

ou

$$A = B = \langle S^Z \rangle - 1/2$$

Usando as equações (III, 148a,b) e (III, 165a,b) obtemos:

$$\begin{aligned} \langle A_k^+, A_{k''-k'+k}^+ A_k \rangle &\approx \langle A_{k''-k'+k}^+ A_k \rangle \langle A_k^+, A_k \rangle + \\ &+ \langle A_{k''-k'+k}^+ A_k \rangle \langle A_k^+, A_{k''} \rangle + C \langle A_k^+ A_k \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 125a})$$

$$\begin{aligned} \langle A_k^+, A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} A_k \rangle &\approx \langle A_{k''-k'+k}^+ A_{k''} \rangle \langle A_k^+, A_k \rangle \\ &+ \langle A_{k''-k'+k}^+ A_k \rangle \langle A_k^+, A_{k''} \rangle + C \langle A_k^+ A_k \rangle \end{aligned} \quad (\text{III, 125b})$$

onde $C = \frac{1}{2S} (\langle S^Z \rangle - 1/2)$.

Com essas aproximações a equação (III, 64) fica:

$$\langle P_k^+ A_k \rangle = \frac{-2\alpha}{N} \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) \left(\frac{\langle S^Z \rangle}{S} \psi_{1k'} + C \right) \langle A_k^+ A_k \rangle$$

(III, 126)

E, de (III, 59) obtemos a energia renormalizada:

$$\epsilon_{1k} = \frac{-2\alpha}{N} \left\{ \frac{\langle S^Z \rangle}{S} \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) \psi_{1k'} + \left[\langle S^Z \rangle - \frac{1}{2} \right] \frac{1}{2S} \sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) \right\}$$

(III, 127)

O segundo termo, no lado direito, é zero, uma vez que:

$$\sum_{k'} (J_{k'-k} - J_{k'}) = 0.$$

E assim, (III, 127) se reduz a (III, 121), a energia renormalizada obtida pelo uso de "decoupling" simétrico.

Portanto, o método da perturbação estatística, quando aplicado na sua forma original, não é equivalente ao método das funções de Green, para o "decoupling" de Dembinski. A causa desse resultado é que a aplicação do método de Wallace ao Hamiltoniano de Heisenberg é feita em termos das transformadas de Fourier dos operadores de spin, o que dá ênfase ao aspecto coletivo do problema.

Para se verificar a equivalência, nesse caso, seria necessário adaptar o método da perturbação estatística ao Hamiltoniano de Heisenberg escritos em termo dos operadores S^+ e S^- .

CAPÍTULO IV

SISTEMA DE DOIS SPINS COM ANISOTROPIAS ATRAVÉS DO MÉTODO - DAS FUNÇÕES DE GREEN

Vimos nos capítulos anteriores, que um teste para a aproximação usada no desacoplamento da cadeia de equações - que aparecem quando empregamos o método das funções de Green consiste em se comparar os resultados obtidos através desse método com os resultados de Dyson, em baixas temperaturas, e com a teoria do campo molecular, em altas temperaturas. Uma outra maneira de se fazer esse teste é comparar os resultados aproximados com resultados exatos, obtidos por meio da diagonalização do Hamiltoniano do problema.

Nesse capítulo apresentaremos a solução exata para um sistema constituído de "clusters" independentes, compostos - de dois spins $1/2$.

Desde que os "clusters" são considerados independentes, as grandezas termodinâmicas do sistema podem ser obtidas considerando-se o Hamiltoniano de um "cluster" e efetuando-se a estatística.

O Hamiltoniano desse sistema sendo definido de tal forma que diversos casos de anisotropia possam ser estudados, - dependendo da escolha de parâmetros adequados.

Em seguida, resolveremos o mesmo problema pelo método das funções de Green, empregando o "decoupling" R.P.A. Consideraremos, em detalhe, casos anisotrópicos.

Consideraremos o Hamiltoniano de cada "cluster" como dado por:

$$\mathcal{H} = - \mu h (S_1^Z + S_2^Z) + \alpha S_1^X S_2^X + \beta S_1^Y S_2^Y + \gamma S_1^Z S_2^Z$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \mu h (S_1^Z + S_2^Z) + \frac{\alpha - \beta}{4} (S_1^+ S_2^+ + S_1^- S_2^-) \\ & + \frac{\alpha + \beta}{4} (S_1^- S_2^+ + S_1^+ S_2^-) + \gamma S_1^Z S_2^Z \end{aligned} \quad (IV,1)$$

(IV,1) foi obtida de (I,1). $S_j^\pm = S_j^X \pm i S_j^Y$. As constantes α , β e γ são tais que, quando:

$\alpha = \beta = \gamma = -2J$; Hamiltoniano isotrópico.

$\alpha = \beta = 0$; $\gamma = -2J$; Modelo de "Ising", campo II

$\alpha = \gamma = 0$; $\beta = -2J$; modelo de "Ising", campo I

$\alpha = (1+\Gamma)(-2J)$; $\beta = 0$; $\gamma = (1-\Gamma)(-2J)$; ($0 < \Gamma < 1$);

Modelo XY ($\Gamma=0$, modelo plano), campo II

$\alpha = (1+\Gamma)(-2J)$; $\beta = (1-\Gamma)(-2J)$; $\gamma = 0$; ($0 < \Gamma < 1$)

Modelo XY ($\Gamma=0$, modelo plano), campo I

Solução exata

A partir do Hamiltoniano (IV,1) determinamos os autovalores do sistema, dados por:

$$E_1 = \frac{-Y}{4} + E \quad (IV,2a)$$

$$\epsilon_2 = -\frac{\gamma}{4} - \epsilon \quad (\text{IV}, 2b)$$

$$\epsilon_3 = -\frac{\gamma}{4} + \frac{\alpha + \beta}{4} \quad (\text{IV}, 2c)$$

$$\epsilon_4 = -\frac{\gamma}{4} - \frac{\alpha + \beta}{4} \quad (\text{IV}, 2d)$$

$$\text{onde } \epsilon = \left[\mu^2 h^2 + \frac{(\alpha + \beta)^2}{16} \right]^{1/2} \quad (\text{IV}, 3)$$

e os autoestados:

$$|X_1\rangle = a_1 |1, 1\rangle + b_1 |1, -1\rangle \quad (\text{IV}, 4a)$$

$$|X_2\rangle = -a_2 |1, 1\rangle + b_2 |1, -1\rangle \quad (\text{IV}, 4b)$$

$$|X_3\rangle = |1, 0\rangle \quad (\text{IV}, 4c)$$

$$|X_4\rangle = |0, 0\rangle \quad (\text{IV}, 4d)$$

onde:

$$a_1 = \frac{(\alpha - \beta)}{\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 16(\epsilon + \mu h)^2}} \quad (\text{IV}, 5a)$$

$$b_1 = \frac{4(\epsilon + \mu h)}{\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 16(\epsilon + \mu h)^2}} \quad (\text{IV}, 5b)$$

$$a_2 = \frac{(\alpha - \beta)}{\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 16(\epsilon - \mu h)^2}} \quad (\text{IV}, 5c)$$

$$b_2 = \frac{4(e - \mu h)}{\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 16(e - \mu h)^2}} \quad (\text{IV}, 5d)$$

e, os estados $|i, j\rangle$ correspondem:

$$\left. \begin{array}{l} |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{array} \right\} \rightarrow \text{triplete}$$

$$|0, 0\rangle \rightarrow \text{singlete}$$

Com esses resultados podemos determinar a função de partição (Z) e efetuar a termodinâmica do sistema:

$$Z = \sum_n e^{-\beta^1 \epsilon_n} = e^{-\beta^1 \left(\frac{\gamma}{4} + \epsilon\right)} + e^{-\beta^1 \left(\frac{\gamma}{4} - \epsilon\right)} + e^{-\beta^1 \left(\frac{\alpha + \beta - \gamma}{4}\right)} + e^{\beta^1 \left(\frac{\alpha + \beta + \gamma}{4}\right)} \quad (\text{IV}, 6)$$

$$\text{onde } \beta^1 = \frac{1}{k_B T}$$

E assim temos:

A magnetização

$$\begin{aligned} \langle S_1^Z \rangle &= \frac{1}{2} \frac{\sum_n e^{-\beta^1 \epsilon_n} \langle n | S_1^Z | n \rangle}{Z} \\ &= \frac{1}{2} \frac{(a_1^2 - b_1^2) e^{-\beta^1 \left(\frac{\gamma}{4} + \epsilon\right)} + (a_2^2 - b_2^2) e^{-\beta^1 \left(\frac{\gamma}{4} - \epsilon\right)}}{Z} \quad (\text{IV}, 7) \end{aligned}$$

(o fator 1/2 aparece devido a equivalência dos dois spins)

A Função de correlação transversal:

$$\begin{aligned} \langle S_1^+ S_2^- \rangle &= \frac{\sum_n e^{-\beta' \epsilon_n} \langle n | S_1^+ S_2^- | n \rangle}{Z} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta' (\frac{\alpha+\beta-\gamma}{4})} - e^{\beta' (\frac{\alpha+\beta+\gamma}{4})}}{Z} \quad (\text{IV}, 8) \end{aligned}$$

A Função de correlação longitudinal

$$\begin{aligned} \langle S_1^Z S_2^Z \rangle &= \frac{\sum_n e^{-\beta \epsilon_n} \langle n | S_1^Z S_2^Z | n \rangle}{Z} = \\ &= \frac{1}{4} \frac{e^{-\beta' (\frac{\gamma}{4} + \epsilon)} + e^{-\beta' (\frac{\gamma}{4} - \epsilon)} - e^{-\beta' (\frac{\alpha+\beta-\gamma}{4})} - e^{\beta' (\frac{\alpha+\beta+\gamma}{4})}}{Z} \quad (\text{IV}, 9) \end{aligned}$$

A suscetibilidade magnética

$$\chi = \frac{\partial \langle S_1^Z \rangle}{\partial h} \quad (\text{IV}, 10)$$

E, finalmente, o calor específico:

$$C = - \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T} = - \left[\frac{\partial \langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle}{\partial T} \right]_{h=0} \quad (\text{IV}, 11)$$

onde

$$\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = \langle S_1^+ S_2^- \rangle + \langle S_1^Z S_2^Z \rangle \quad (\text{IV}, 12)$$

Solução aproximada, método das funções de Green ("decoupling" R.P.A.)

Em primeiro lugar, calculemos a equação de movimento da função de Green

$$\langle\langle S_1^+ | S_2^- \rangle\rangle_E.$$

Da equação (II,30), com $B_\ell = S_\ell^z$ obtemos:

$$E \langle S_g^+ | S_\ell^- \rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle S^Z \rangle \delta_{g\ell} + \langle [S_g^+, \mathcal{H}] S_\ell^- \rangle_E \quad (\text{IV}, 13)$$

O comutador em (IV,13) é dado por:

$$\begin{aligned} [S_g^+, \mathcal{H}] &= \mu h S_g^+ + \frac{\alpha - \beta}{2} (S_g^Z S_2^- \delta_{g1} + S_1^- S_g^Z \delta_{g2}) \\ &+ \frac{\alpha + \beta}{2} (S_g^Z S_2^+ \delta_{g1} + S_1^+ S_g^Z \delta_{g2}) - \gamma (S_1^+ S_2^Z \delta_{g1} + S_1^Z S_2^+ \delta_{g2}) \end{aligned} \quad (\text{IV}, 14)$$

Substituindo em (IV,13) teremos:

$$\begin{aligned} (E - \mu h) \langle S_g^+ | S_\ell^- \rangle &= \frac{1}{\hbar} \langle S^Z \rangle \delta_{g\ell} + \frac{\alpha - \beta}{2} (\langle S_g^Z S_2^- | S_\ell^- \rangle \delta_{g1} \\ &+ \langle S_1^- S_g^Z | S_\ell^- \rangle \delta_{g2}) + \frac{\alpha + \beta}{2} (\langle S_g^Z S_2^+ | S_\ell^- \rangle \delta_{g1} + \langle S_1^+ S_g^Z | S_\ell^- \rangle \delta_{g2}) \\ &- \gamma (\langle S_1^+ S_2^Z | S_\ell^- \rangle \delta_{g1} + \langle S_1^Z S_2^+ | S_\ell^- \rangle \delta_{g2}) \end{aligned} \quad (\text{IV}, 15)$$

Fazendo $g = 1, 2$ e $\ell = 2$ obtemos o sistema de equações:

$$\begin{aligned} (E - \mu h) \langle S_1^+ | S_2^- \rangle &= \frac{\alpha - \beta}{2} \langle S_1^Z S_2^- | S_2^- \rangle + \\ &+ \frac{\alpha + \beta}{2} \langle S_1^Z S_2^+ | S_2^- \rangle - \gamma \langle S_1^+ S_2^Z | S_2^- \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV}, 16a)$$

$$\begin{aligned} (E - \mu h) \langle S_2^+ | S_2^- \rangle &= \frac{1}{\hbar} \langle S^Z \rangle + \frac{\alpha - \beta}{2} \langle S_1^- S_2^Z | S_2^- \rangle \\ &+ \frac{\alpha + \beta}{2} \langle S_1^+ S_2^Z | S_2^- \rangle - \gamma \langle S_1^Z S_2^+ | S_2^- \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV}, 16b)$$

Aplicando a esse sistema o "decoupling" R.P.A. Relação (II, 33)

$$(E - \mu h + \gamma \langle S^Z \rangle) \langle S_1^+ | S_2^- \rangle = -\frac{\alpha - \beta}{2} \langle S^Z \rangle \langle S_2^- | S_2^- \rangle$$

$$+ \frac{\alpha + \beta}{2} \langle S^Z \rangle \langle S_2^+ | S_2^- \rangle \quad (IV, 17a)$$

$$(E - \mu h + \gamma \langle S^Z \rangle) \langle S_2^+ | S_2^- \rangle = \frac{\langle S^Z \rangle}{\Pi} + \frac{\alpha - \beta}{2} \langle S^Z \rangle \langle S_1^- | S_2^- \rangle +$$

$$+ \frac{\alpha + \beta}{2} \langle S^Z \rangle \langle S_1^+ | S_2^- \rangle \quad (IV, 17b)$$

Para resolvermos esse sistema de equação é necessário determinarmos as equações de movimento para $\langle S_2^- | S_2^- \rangle$ e $\langle S_1^- | S_2^- \rangle$,

o que é feito de maneira análoga à obtenção de (IV, 17a e b).

Feito isso ficamos com um sistema de quatro equações a quatro incógnitas, o que nos permite obter, depois de fazermos as seguintes definições:

$$A \equiv (E + \mu h - \gamma \langle S^Z \rangle) \quad (IV, 18a)$$

$$B \equiv \frac{\beta - \alpha}{2} \langle S^Z \rangle \quad (IV, 18b)$$

$$C \equiv \frac{\alpha + \beta}{2} \langle S^Z \rangle \quad (IV, 18c)$$

$$F \equiv \mu h - \gamma \langle S^Z \rangle \quad (IV, 18d)$$

$$X \equiv (C^2 - A^2) (E - F) - B^2 \quad (IV, 18e)$$

$$Y \equiv C (C^2 - A^2) - B^2 C \quad (IV, 18f)$$

$$\langle S_2^+ | S_2^- \rangle = \frac{X}{[(C-A)[(E-F)+C] - B^2} \frac{\langle S^Z \rangle}{\Pi}$$

$$(IV, 19a)$$

$$\langle\langle S_1^+ | S_2^- \rangle\rangle = \frac{\gamma}{[(C-A)[(E-F)+C] - B^2} \frac{[(C+A)[(E-F)-C] + B^2}{\Pi} \frac{\langle S^Z \rangle}{\Pi}$$

(IV,19b)

Calculando os saltos dessas funções de Green, da maneira indicada no capítulo III, obtemos as funções de correlação:

$$\langle S_2^- S_2^+ \rangle = \frac{\langle S^Z \rangle}{2} \left\{ \frac{F - C + P}{p(e^{\beta'P} - 1)} - \frac{F - C - P}{p(e^{-\beta'P} - 1)} + \frac{F + C + q}{q(e^{\beta'q} - 1)} - \frac{F + C - q}{q(e^{-\beta'q} - 1)} \right\}$$

(IV,20a)

$$\langle S_2^- S_1^+ \rangle = - \frac{\langle S^Z \rangle}{2} \left\{ \frac{F - C + P}{p(e^{\beta'P} - 1)} - \frac{F - C - P}{p(e^{-\beta'P} - 1)} - \frac{F + C + q}{q(e^{\beta'q} - 1)} + \frac{F + C - q}{q(e^{-\beta'q} - 1)} \right\}$$

(IV,20b)

onde p e q são os polos das funções de Green, dados por:

$$p = \left\{ (F-C)^2 - B^2 \right\}^{1/2}$$

(IV,21a)

$$q = \left\{ (F+C)^2 - B^2 \right\}^{1/2}$$

(IV,22b)

Neste ponto estamos em condição de calcular a magnetização uma vez que, como vimos no capítulo III, para spin $\frac{1}{2}$

$$\langle S^Z \rangle = -\frac{1}{2} - \langle S_2^- S_2^+ \rangle$$

(IV,23)

Entretanto, para o cálculo da suscetibilidade e do calor espe-

cífico, necessitamos da função de correlação $\langle S_1^Z S_2^Z \rangle$. Essas -
funções de correlação não podem ser obtidas por meio das equa-
ções de movimento das funções de Green $\langle\langle S_g^Z | S_\ell^Z \rangle\rangle$ uma vez que
essas equações envolvem funções de Green da forma -
 $\langle\langle S_g^- S_\ell^+ | S_\ell^Z \rangle\rangle$ que não podem ser desacopladas pela aproximação
R.P.A. Por outro lado, a relação $S_j^Z = \frac{1}{2} - S_j^- S_j^+$ nos permite
escrever:

$$\langle S_2^Z S_1^- S_1^+ \rangle = -\frac{1}{2} \langle S^Z \rangle - \langle S_1^Z S_2^Z \rangle \quad (\text{IV},24)$$

onde a função de correlação $\langle S_2^Z S_1^- S_1^+ \rangle$ pode ser obtida a par-
tir das equações de movimento das funções de Green aproxima-
das em R.P.A.

$$\langle\langle S_j^+ S_g^Z | B_\ell \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq j} \langle S^Z \rangle \langle\langle S_j^+ | B_\ell \rangle\rangle$$

Para esse fim partimos de funções de Green do tipo -

$\langle\langle S_g^+ | S_2^Z S_1^- \rangle\rangle$ e, procedendo como anteriormente, obtemos uma -
equação para $\langle\langle S_1^+ | S_2^Z S_1^- \rangle\rangle$ cujo salto da a função de correla-
ção:

$$\langle S_2^Z S_1^- S_1^+ \rangle = \frac{\pi}{2} \left\{ \frac{(L - M)(F - C + P) - NB}{P(e^{\beta'P} - 1)} \right. \\ \left. - \frac{(L-M)(F-C-P) - NB}{P(e^{-\beta'P} - 1)} + \frac{(L+M)(F+C+q) - NB}{q(e^{\beta'q} - 1)} \right. \\ \left. - \frac{(L+M)(F+C-q) - NB}{q(e^{-\beta'q} - 1)} \right\} \quad (\text{IV},25)$$

$$\text{onde: } L \equiv \frac{\langle S_2^Z S_1^Z \rangle}{\Pi}$$

$$M \equiv \frac{-\langle S_1^+ S_2^- \rangle}{2\Pi}$$

$$N \equiv \frac{\langle S_2^- S_1^- \rangle}{2\Pi} =$$

$$= \frac{\langle S^Z \rangle}{2} \left\{ \frac{1}{P(e^{\beta'P} - 1)} - \frac{1}{P(e^{-\beta'P} - 1)} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{q(e^{\beta'q} - 1)} - \frac{1}{q(e^{-\beta'q} - 1)} \right\}$$

Assim, combinando as equações (IV,24) e (IV,25) obtemos

$$\langle S_1^Z S_2^Z \rangle$$

A partir de (IV,23) e (IV,20a), com as definições $e^{\beta'P} \equiv t$; $e^{\beta'q} \equiv \tau$, obtemos:

$$\frac{1}{2} = \frac{\langle S^Z \rangle}{2} \left\{ \frac{F-C}{P} \frac{t+1}{t-1} + \frac{F+C}{q} \frac{\tau+1}{\tau-1} \right\} \quad (\text{IV,26})$$

que é uma equação autoconsistente, para a magnetização.

A suscetibilidade e o calor específico são obtidos a partir de (IV,10 e 11) respectivamente.

Aplicaremos esses resultados para os casos do Modelo de "Ising", com campo externo perpendicular e Modelo XY, com campo externo paralelo.

No caso do Modelo de "Ising" (hI) temos que $\alpha = \gamma = 0$ e $\beta = -2J$. Substituindo-se esses resultados nas definições (IV,18) obtemos:

$F = \mu h$; $B = -J\langle S^Z \rangle$; $C = -J\langle S^Z \rangle$ e, as equações (IV,21 a e b) tornam-se:

$$p = \left[(\mu h + J\langle S^Z \rangle)^2 - J^2 \langle S^Z \rangle^2 \right]^{1/2} \quad (IV,29a)$$

$$q = \left[(\mu h - J\langle S^Z \rangle)^2 - J^2 \langle S^Z \rangle^2 \right]^{1/2} \quad (IV,29b)$$

De (IV,29b) vemos que o segundo polo será real se

$$\mu h > 2J\langle S^Z \rangle \quad (IV,30)$$

Isso significa que se $0 < \mu h < 2J\langle S^Z \rangle$, o "decoupling" R.P.A. da excitação do sistema que tem somente parte imaginária. Como o maior valor possível de $\langle S^Z \rangle$ é 1, tomaremos um valor para o campo magnético externo tal que:

$$\mu h > 2J \quad (IV,31)$$

Para o modelo XY(h11) temos:

$$\alpha = (1+\Gamma)(-2J) ; \beta = (1-\Gamma)(-2J) ; \gamma = 0 ; (0 \leq \Gamma < 1)$$

O caso $\Gamma = 0$ é chamado modelo planar.

Com essas condições as equações (IV,21 a e b) ficam:

$$p = \left[(\mu h + 3J\langle S^Z \rangle)^2 - J^2 \langle S^Z \rangle^2 \right]^{1/2} \quad (IV,32a)$$

$$q = \left[(\mu h + J\langle S^Z \rangle)^2 - J^2 \langle S^Z \rangle^2 \right]^{1/2} \quad (IV,32b)$$

E, para evitarmos o caso $q = 0$, devemos impor a condição $h \neq 0$

Quanto ao Modelo XY propriamente dito, consideramos o caso em que $\Gamma = \frac{1}{2}$. Nesse caso, os polos são dados por:

$$p = \left[\left(\mu h + \frac{5}{2} J \langle S^z \rangle \right)^2 - \left(\frac{3}{2} J \langle S^z \rangle \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV}, 33a)$$

$$q = \left[\left(\mu h - \frac{1}{2} J \langle S^z \rangle \right)^2 - \left(\frac{3}{2} J \langle S^z \rangle \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV}, 33b)$$

E, para que os polos sejam reais, devemos impor a condição

$$\left(\mu h - \frac{1}{2} J \langle S^z \rangle \right)^2 - \frac{9}{4} J^2 \langle S^z \rangle^2 > 0$$

o que obriga a escolha de um campo externo tal que:

$$\mu h > 2J \langle S^z \rangle \quad (\text{IV}, 34)$$

A comparação entre os resultados exatos e os obtidos através do "decoupling" R. P. A. é feita nas figuras - 1 a 15. O campo externo, $\frac{\mu h}{J} = 2,1$, torna a direção z uma direção privilegiada. A não concordância entre os resultados exatos e R.P.A., nas funções de correlação transversais, mostra que esse "decoupling" não é adequado no tratamento de sistemas anisotrópicos.

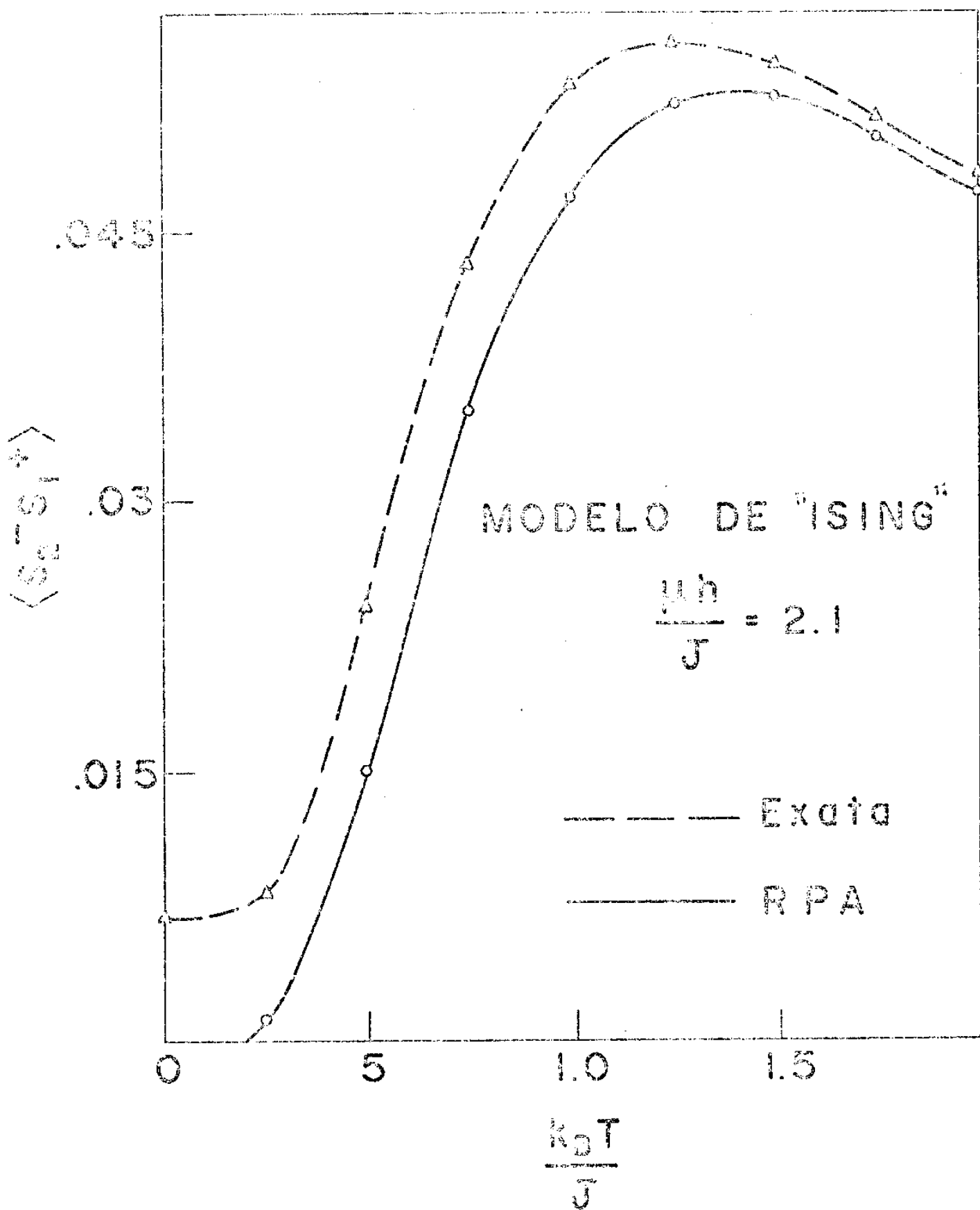


FIG. 1 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO TRANSVERSAL

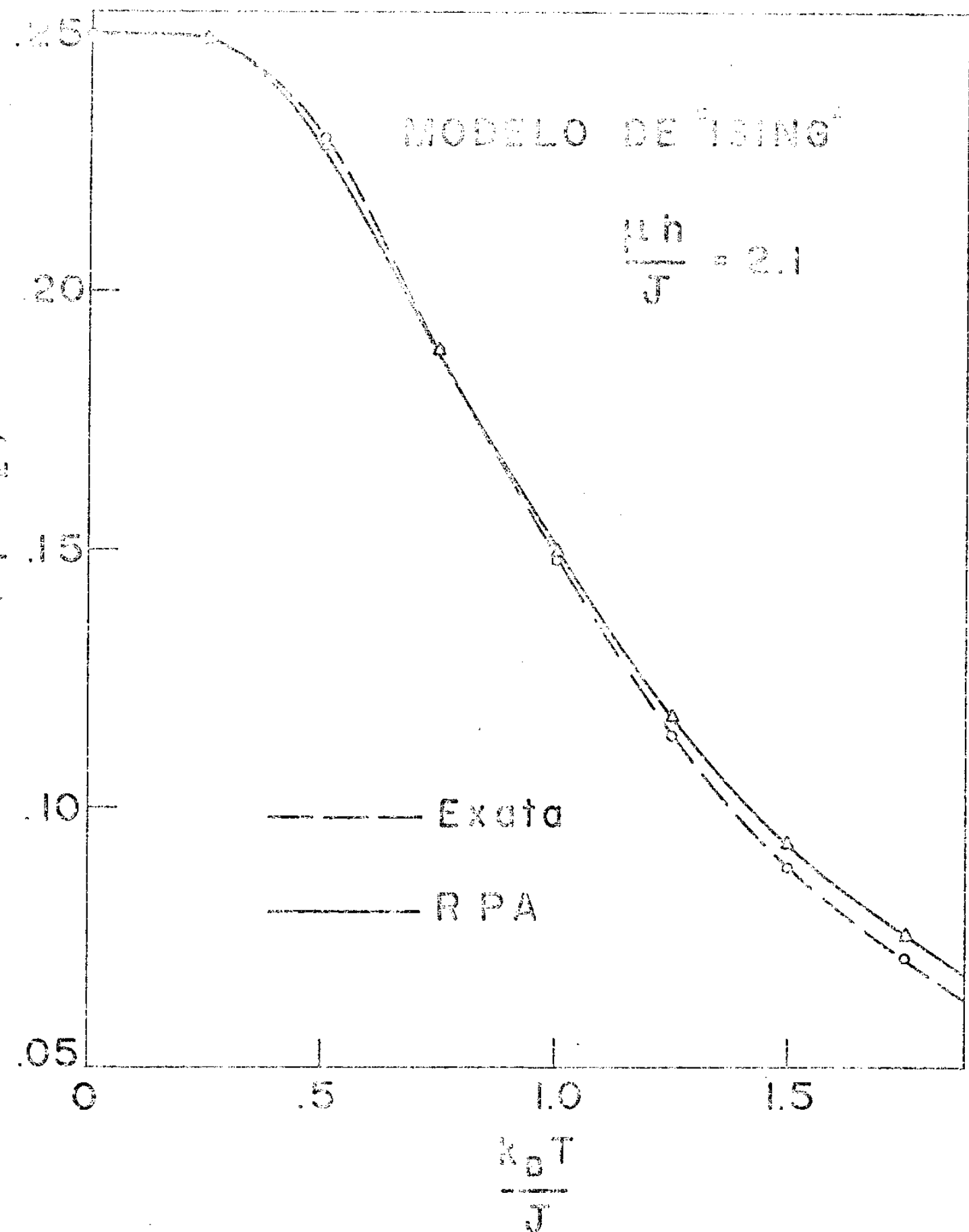


FIG. 2 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL

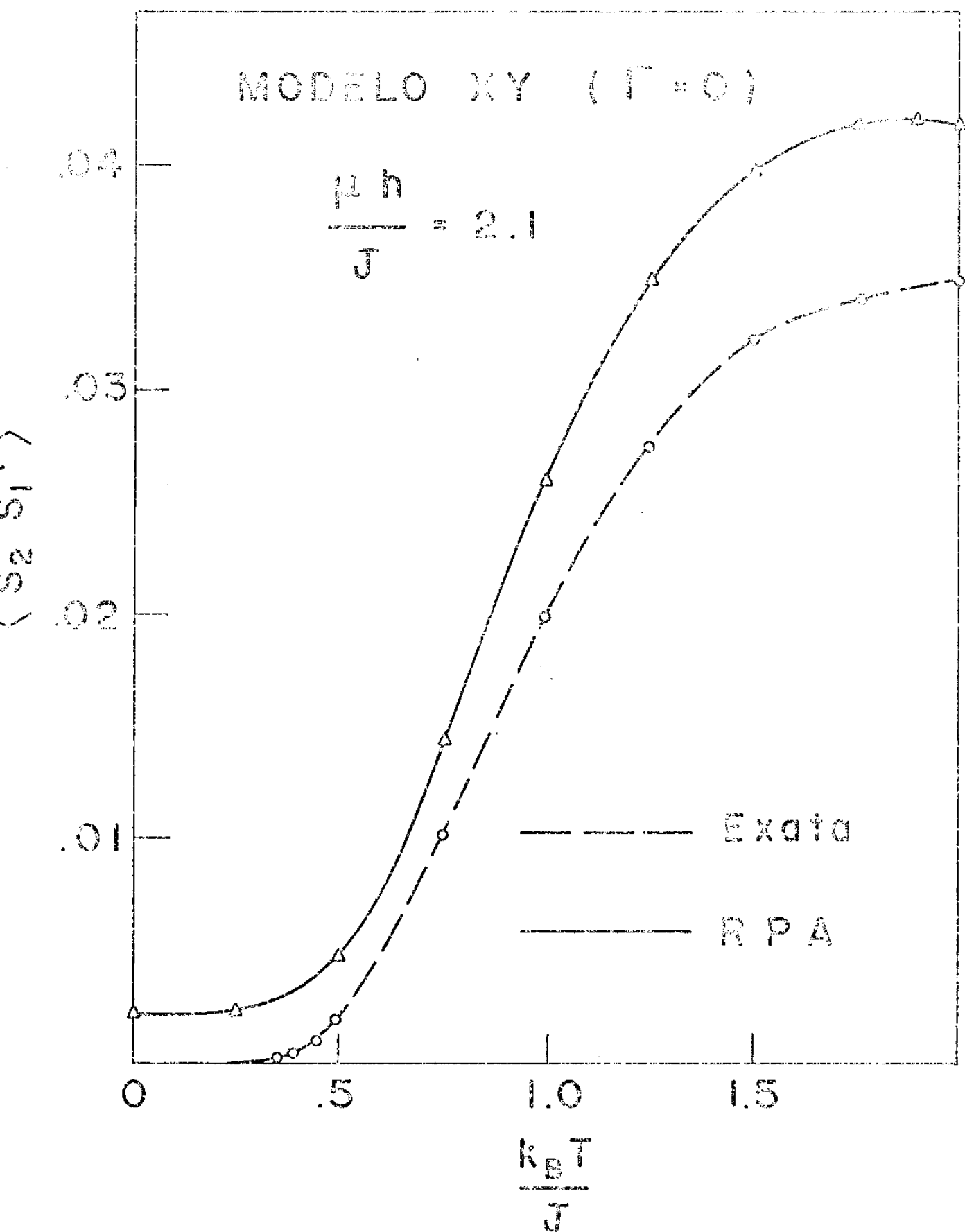


FIG. 3 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO TRANSVERSAL

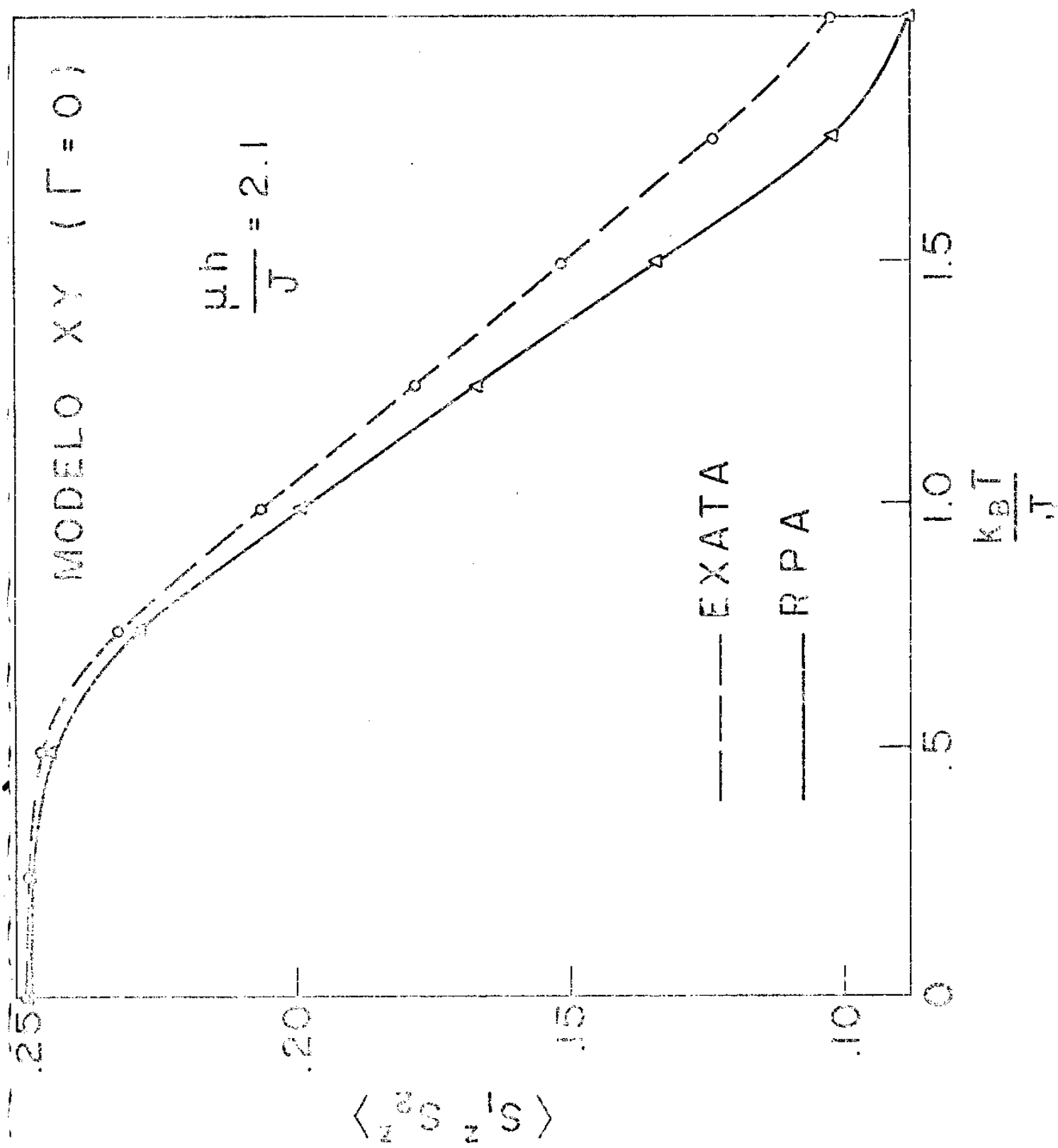


FIG. 4 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL

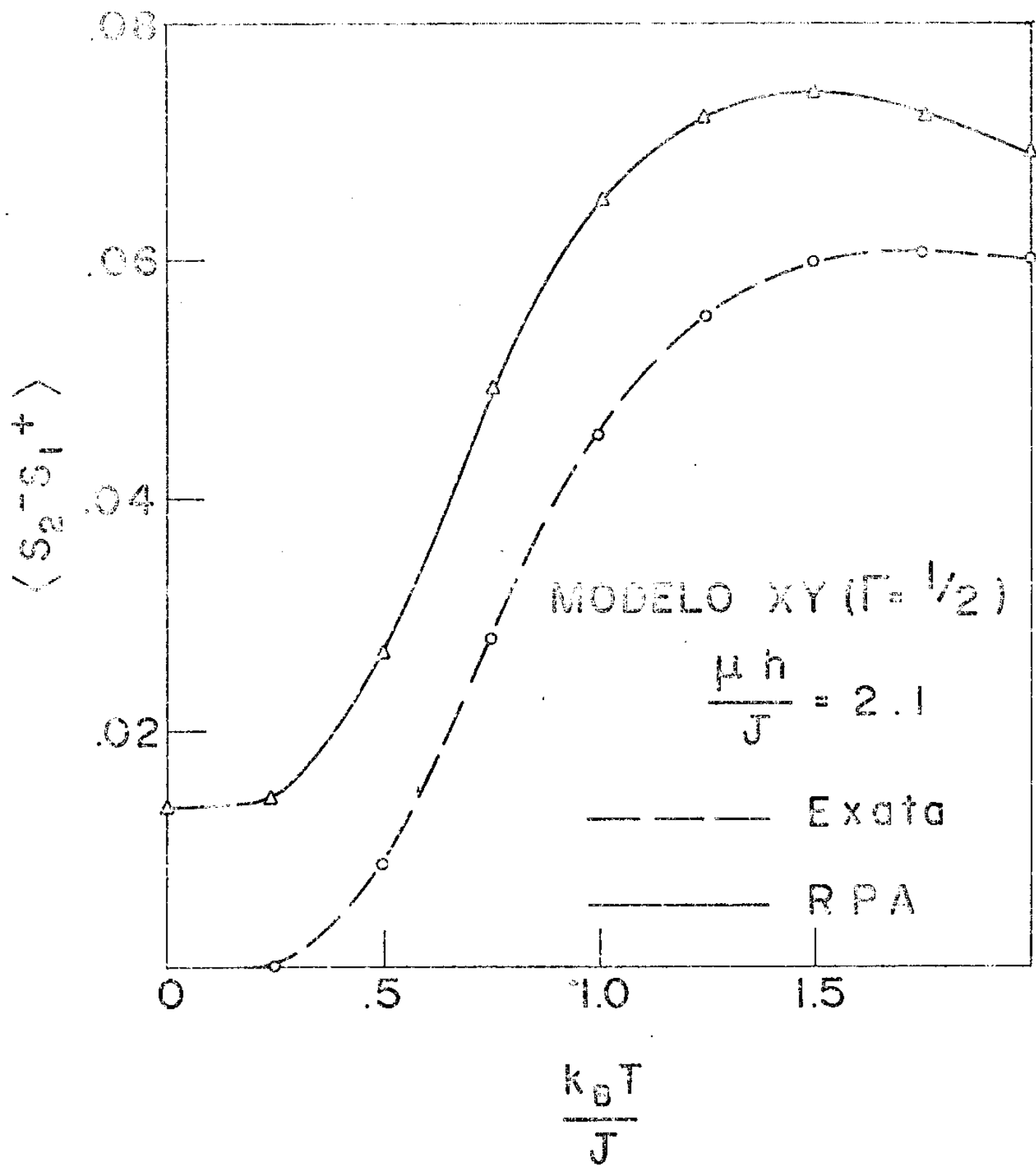


FIG. 5 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO TRANSVERSAL

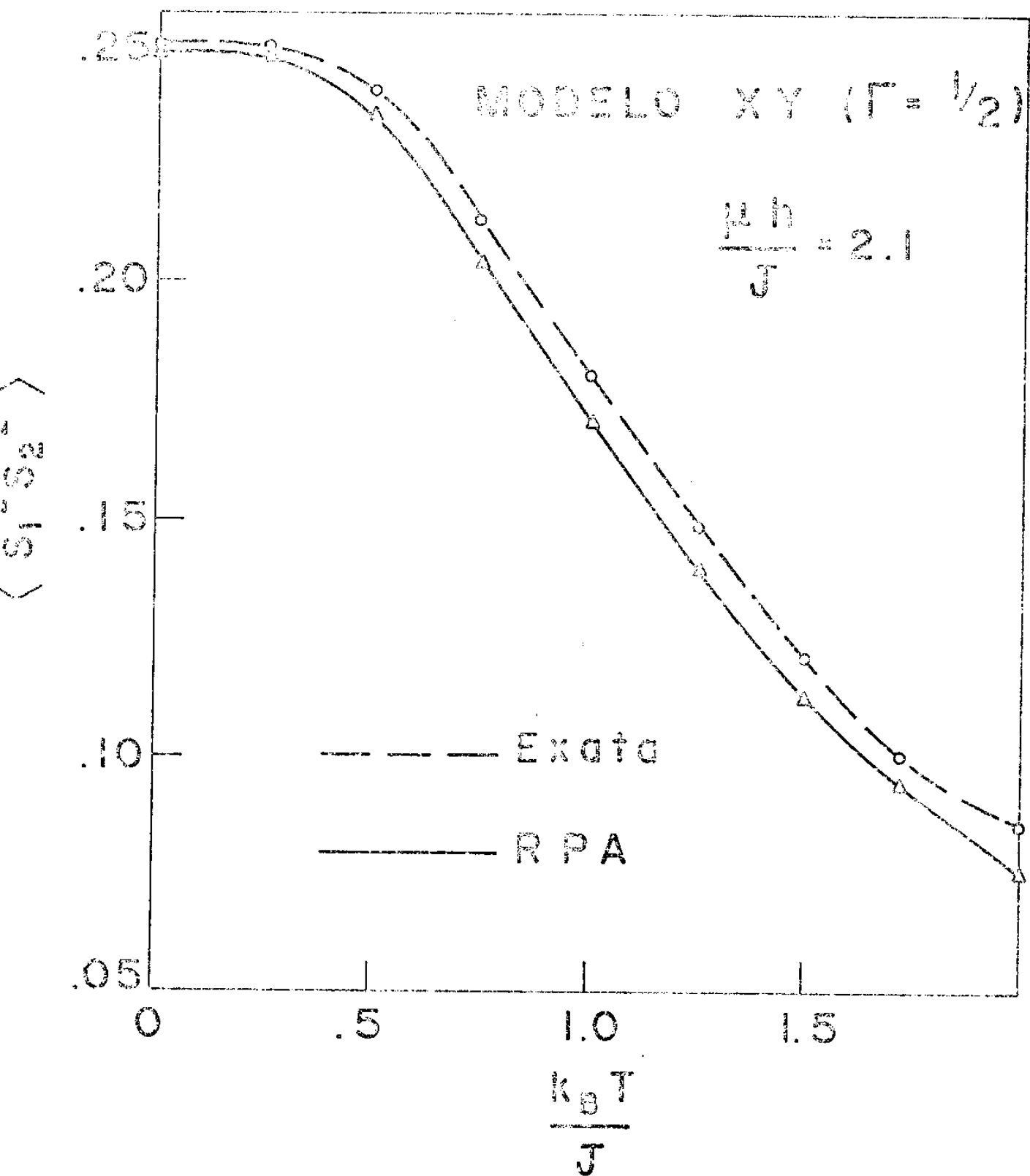


FIG. 6 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL

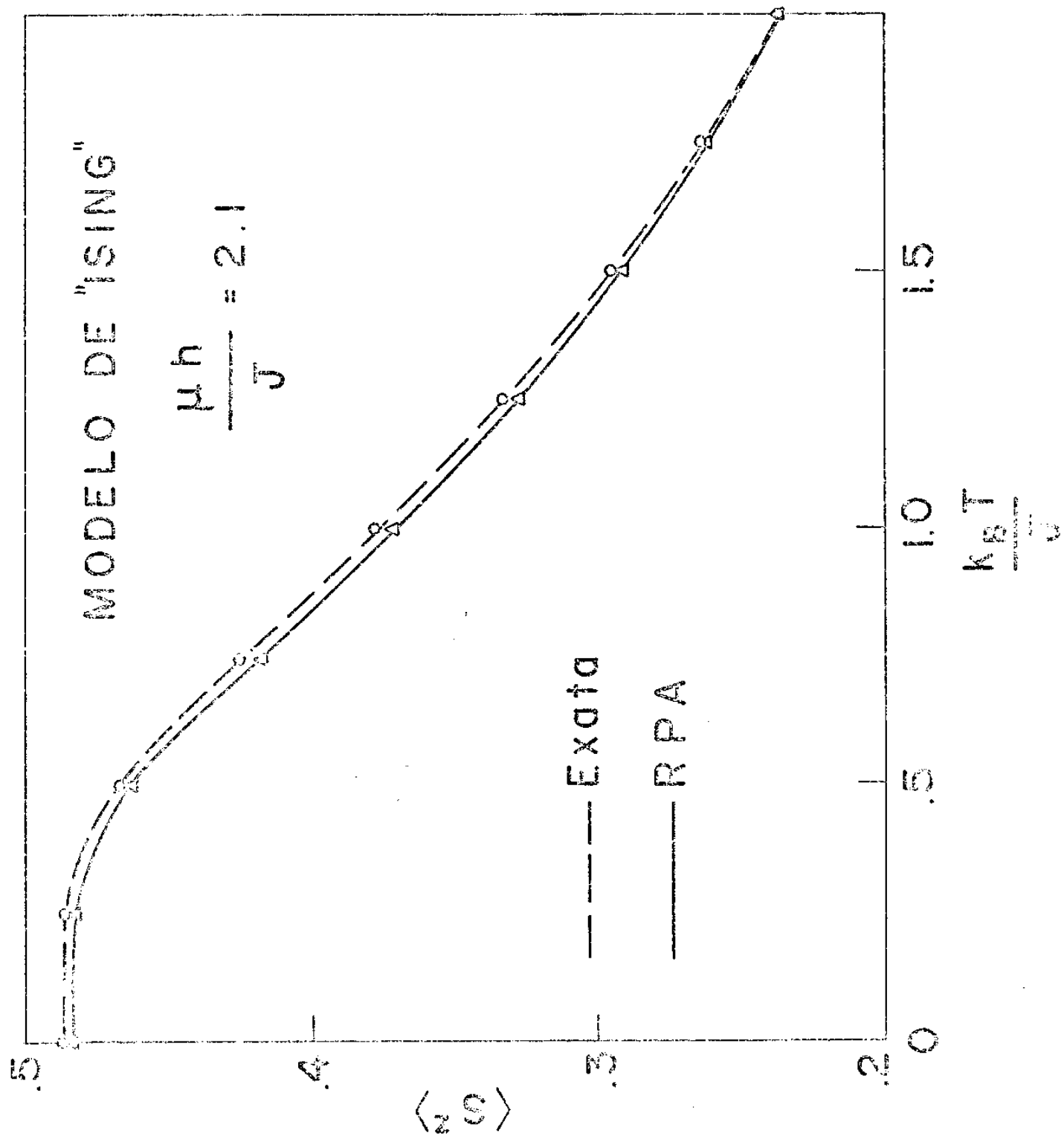


FIG. 7 - MAGNETIZAÇÃO

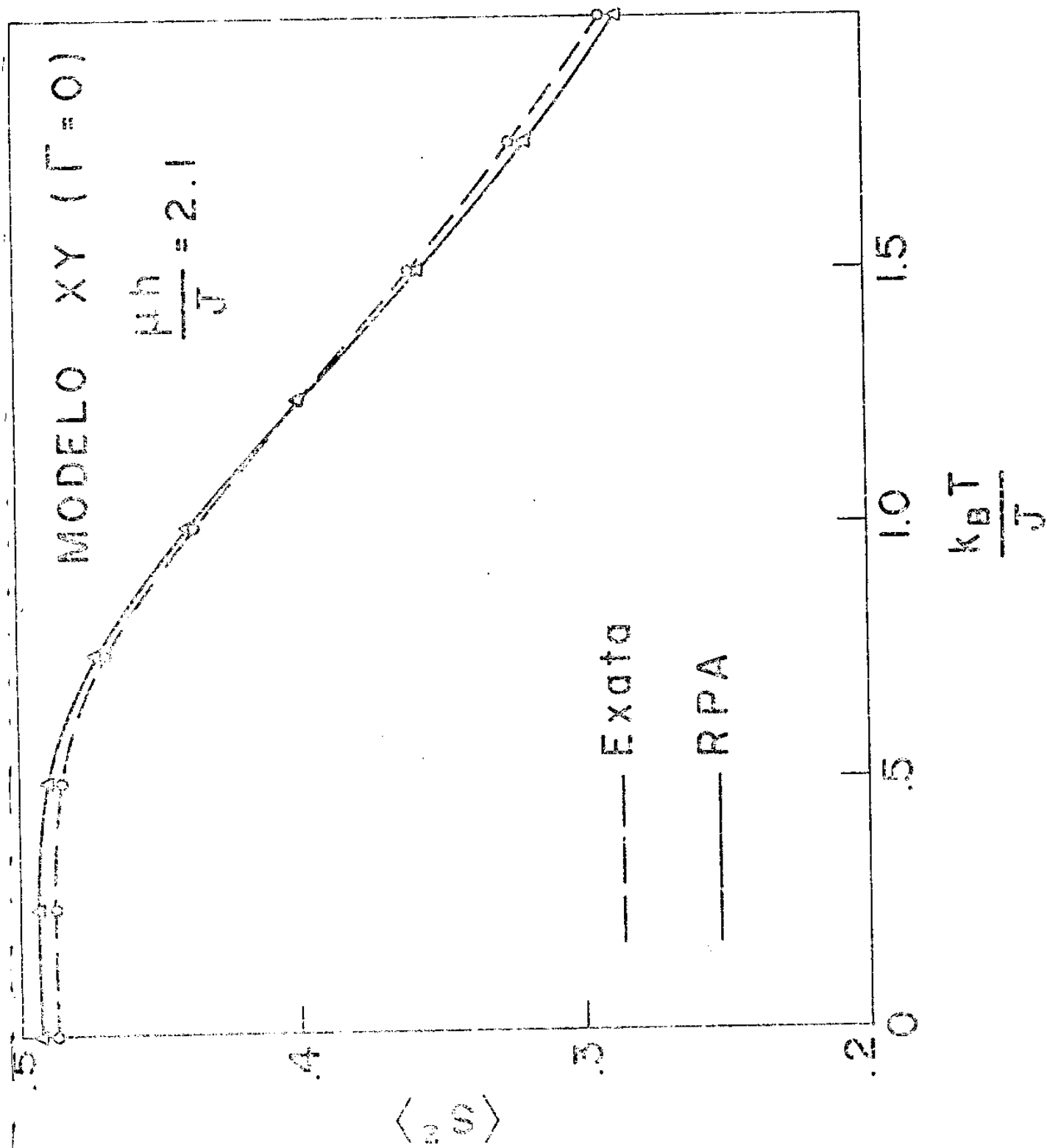


FIG. 8 - MAGNETIZAÇÃO

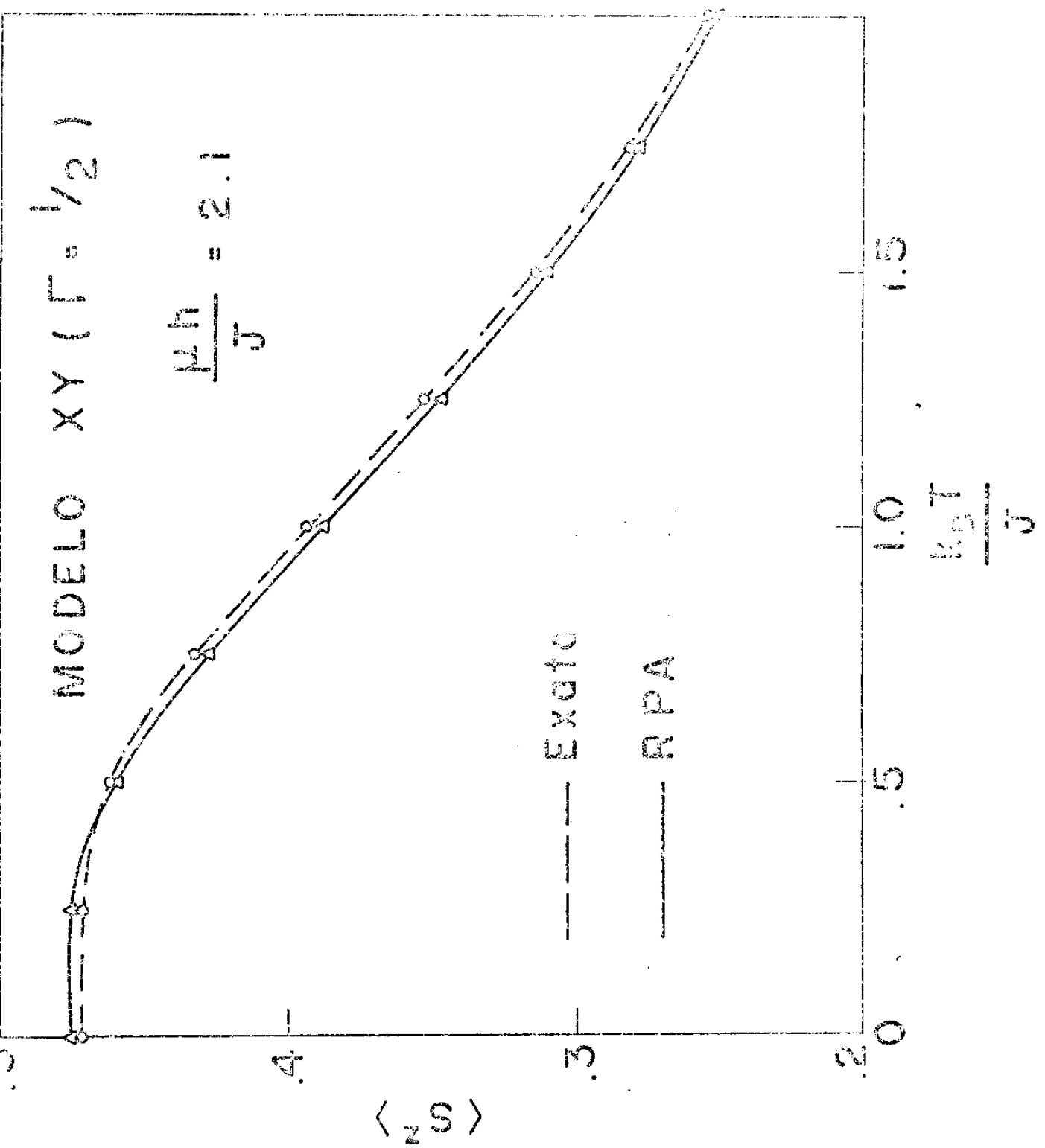


FIG. 9 - MAGNETIZAÇÃO

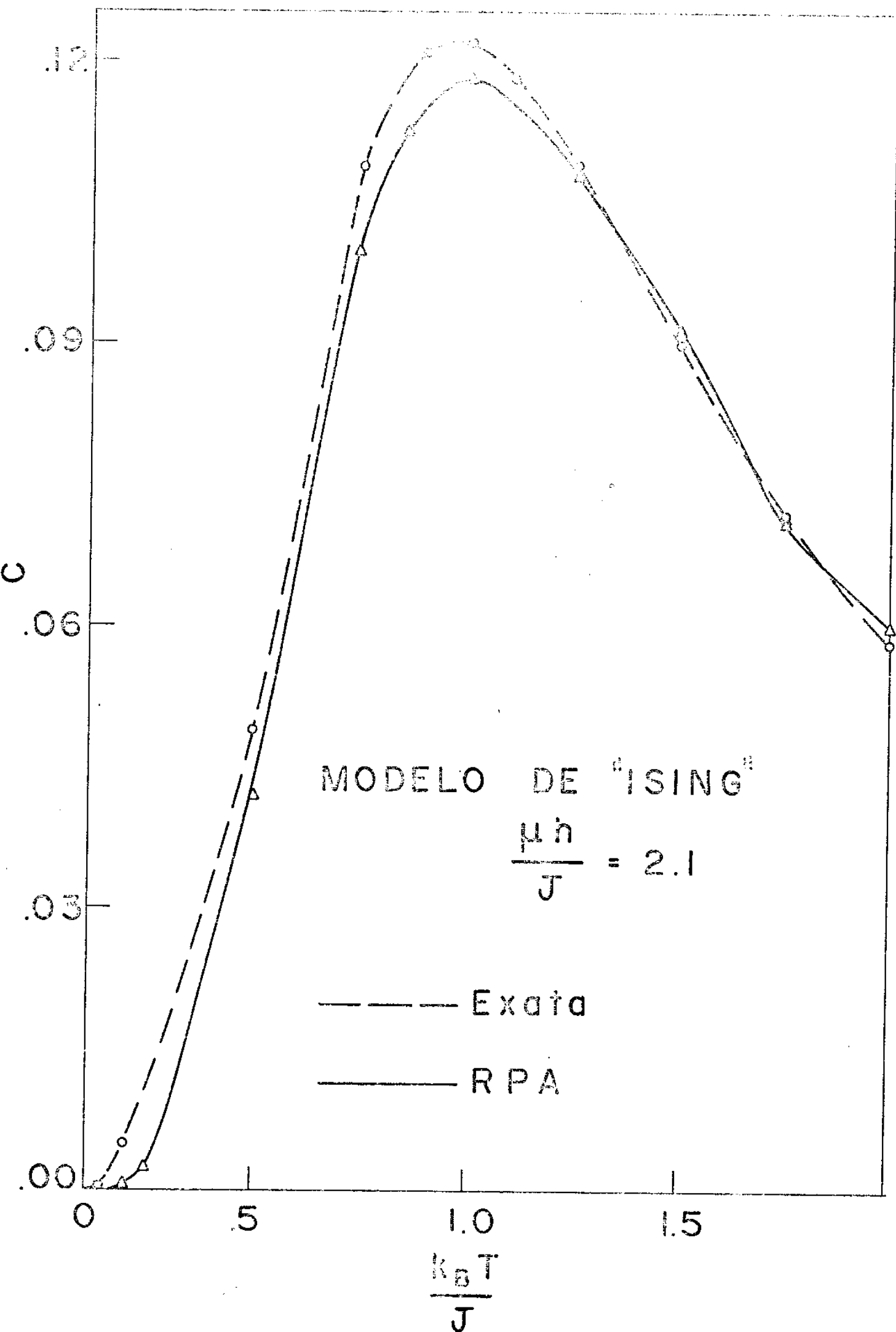


FIG. 10 - CALOR ESPECÍFICO

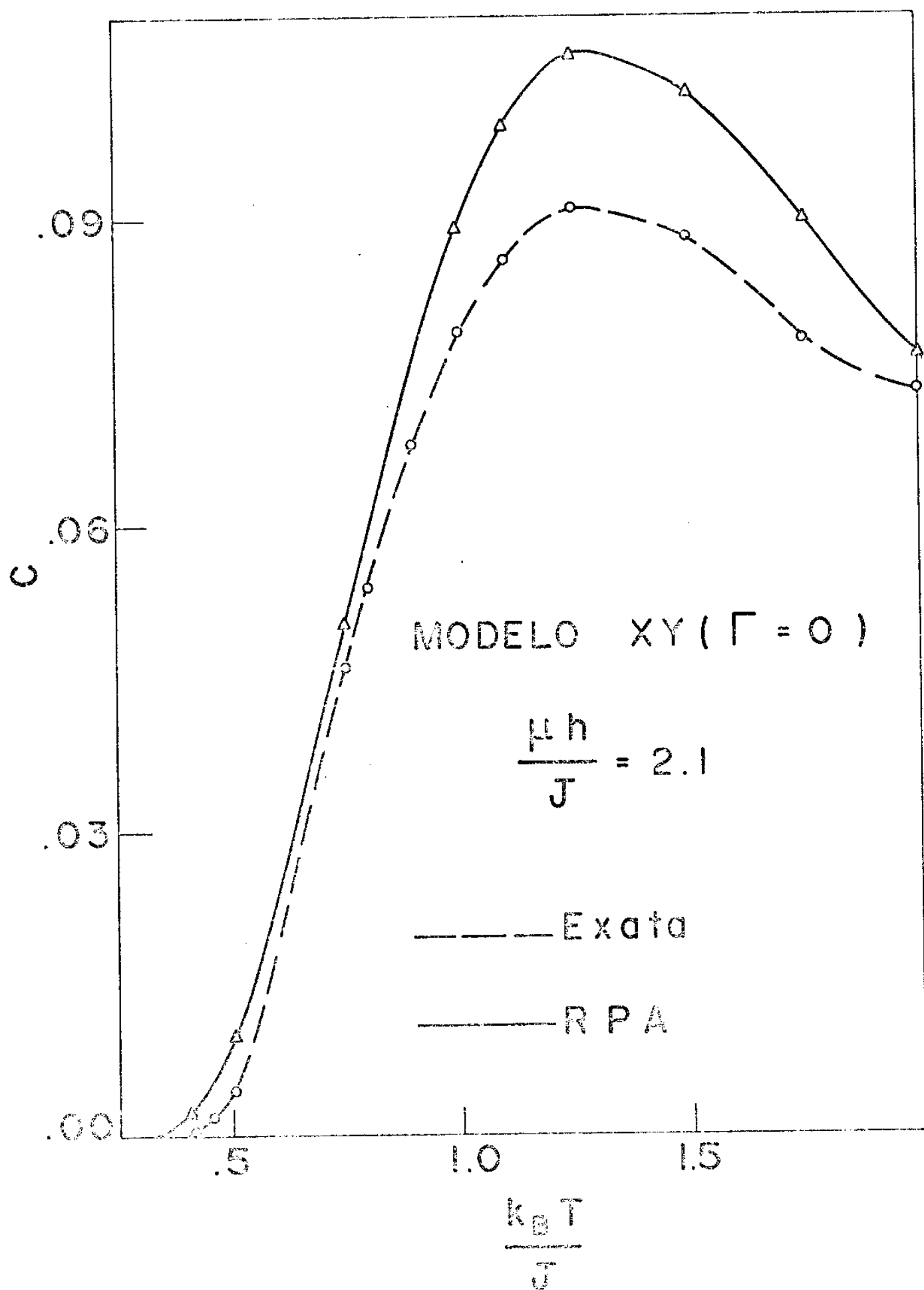


FIG. 11 - CALOR ESPECÍFICO

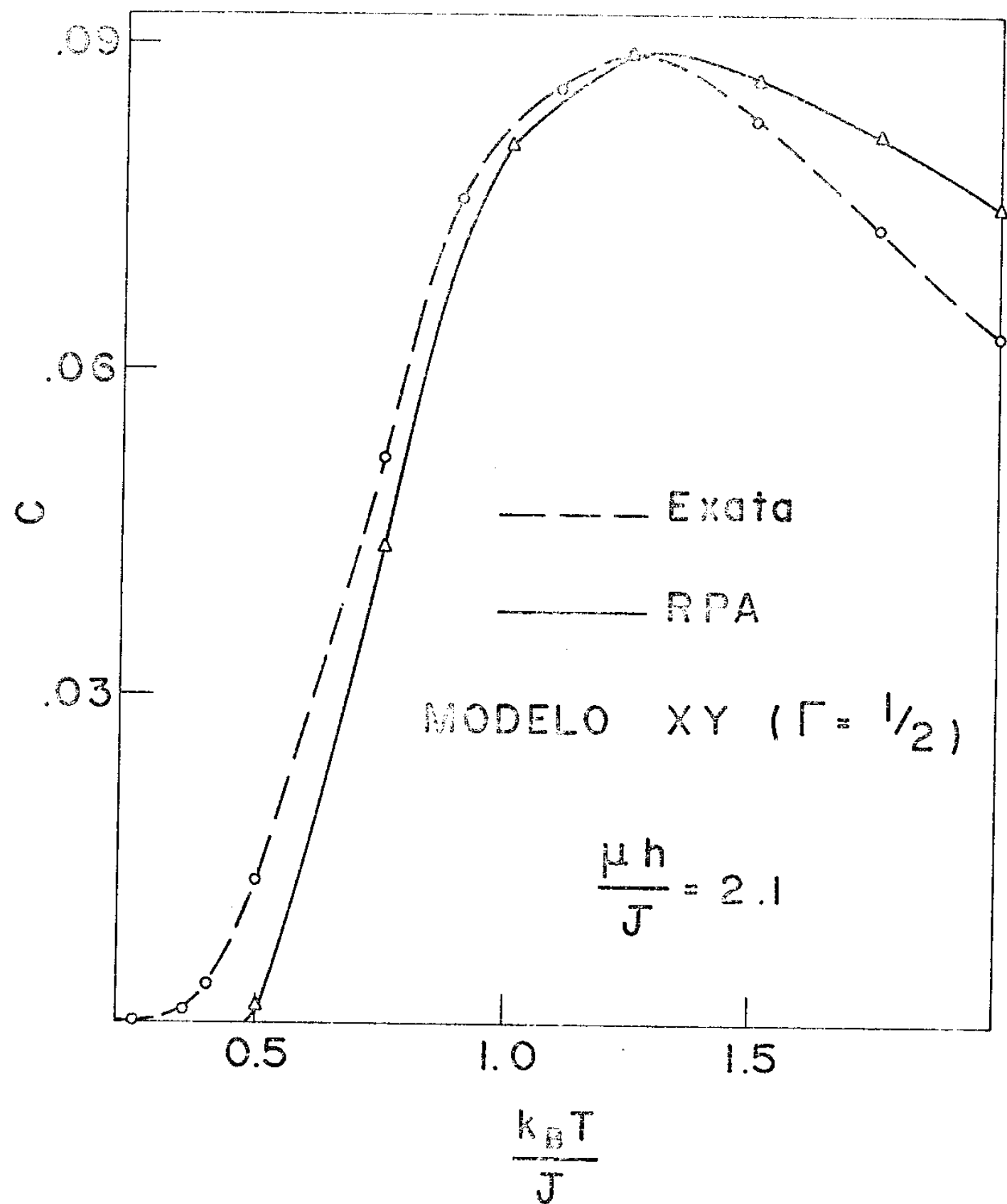


FIG. 12 - CALOR ESPECÍFICO

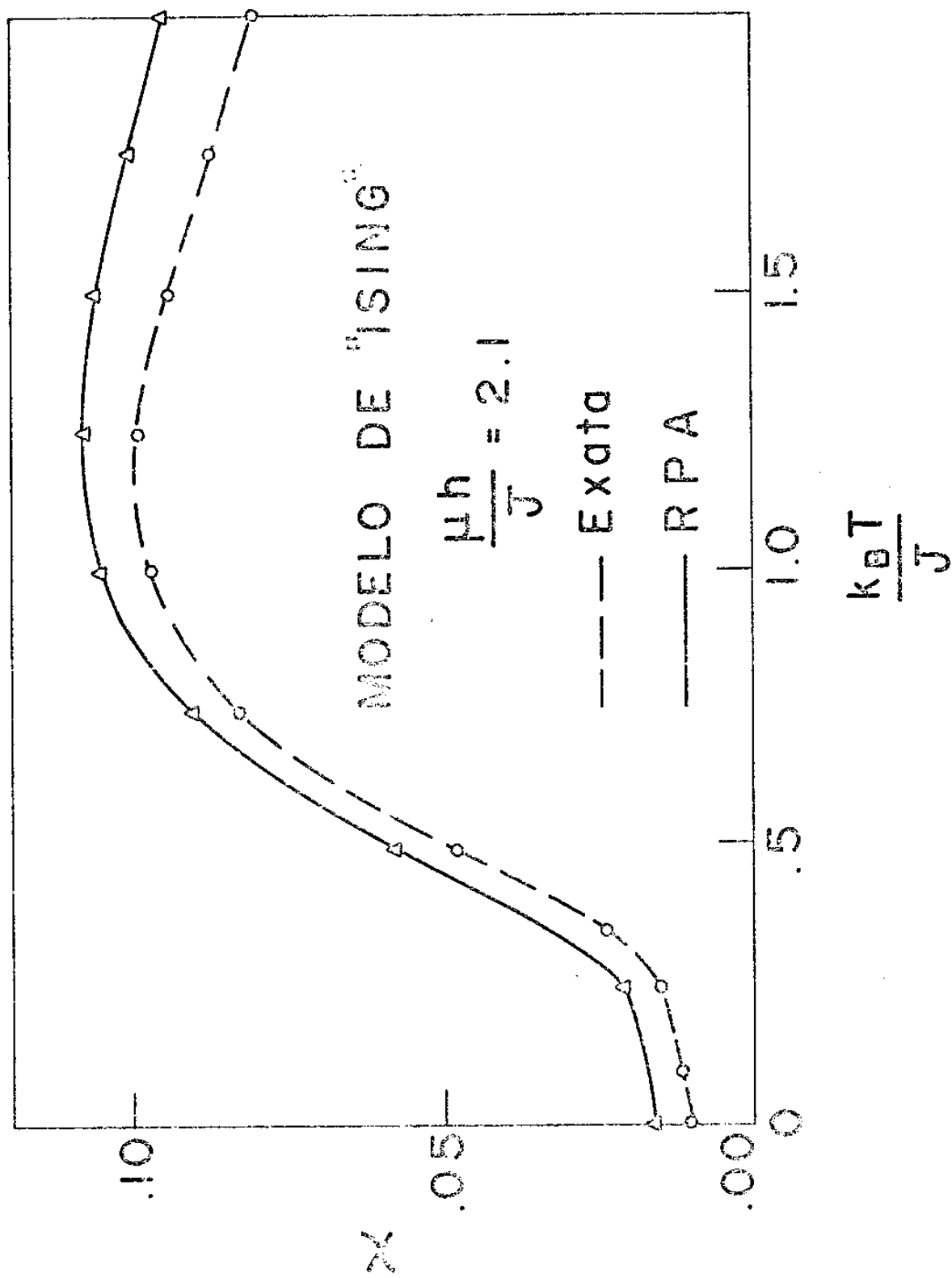


FIG. 13 - SUSCETIBILIDADE

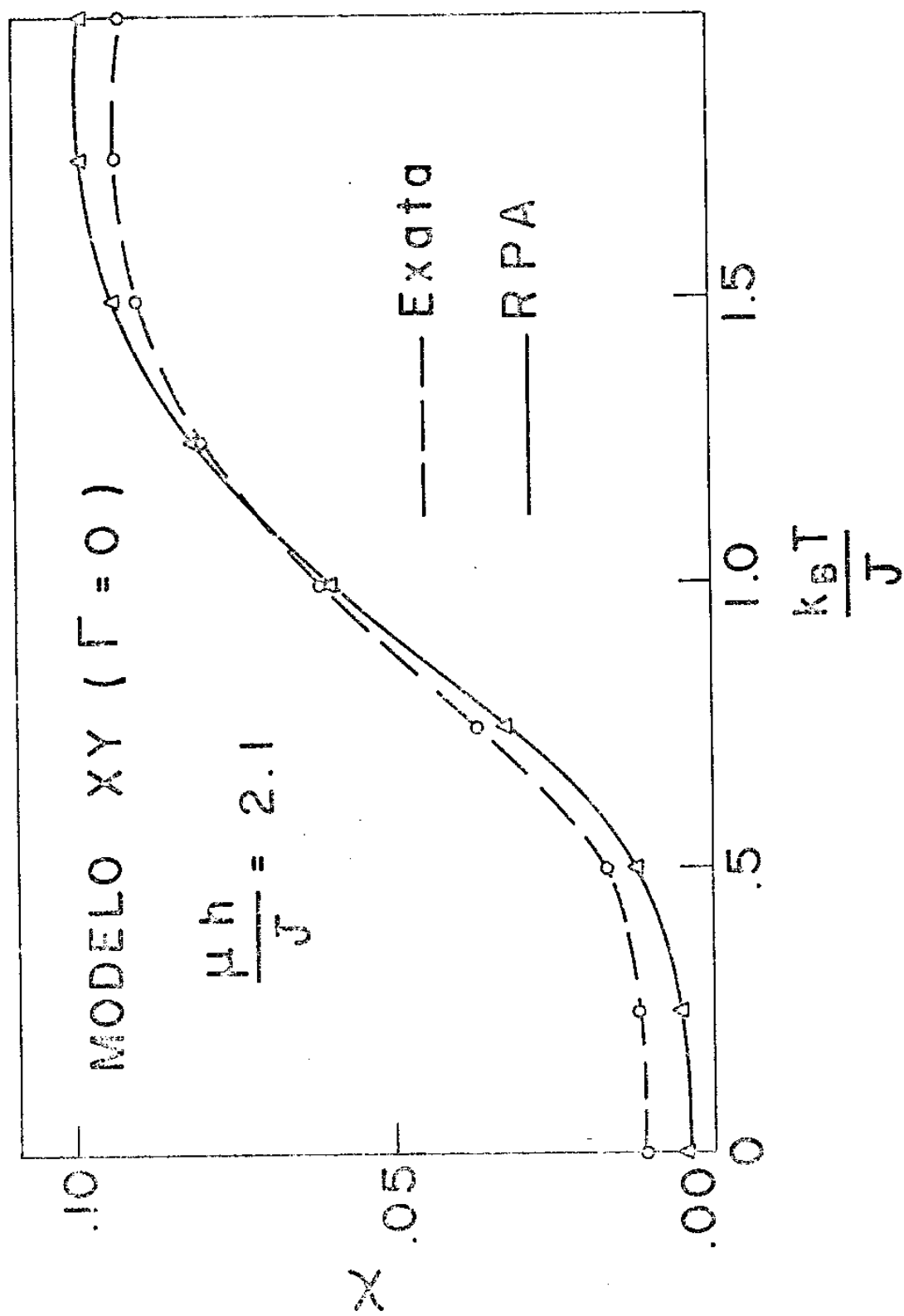


FIG. 14 - SUSCETIBILIDADE

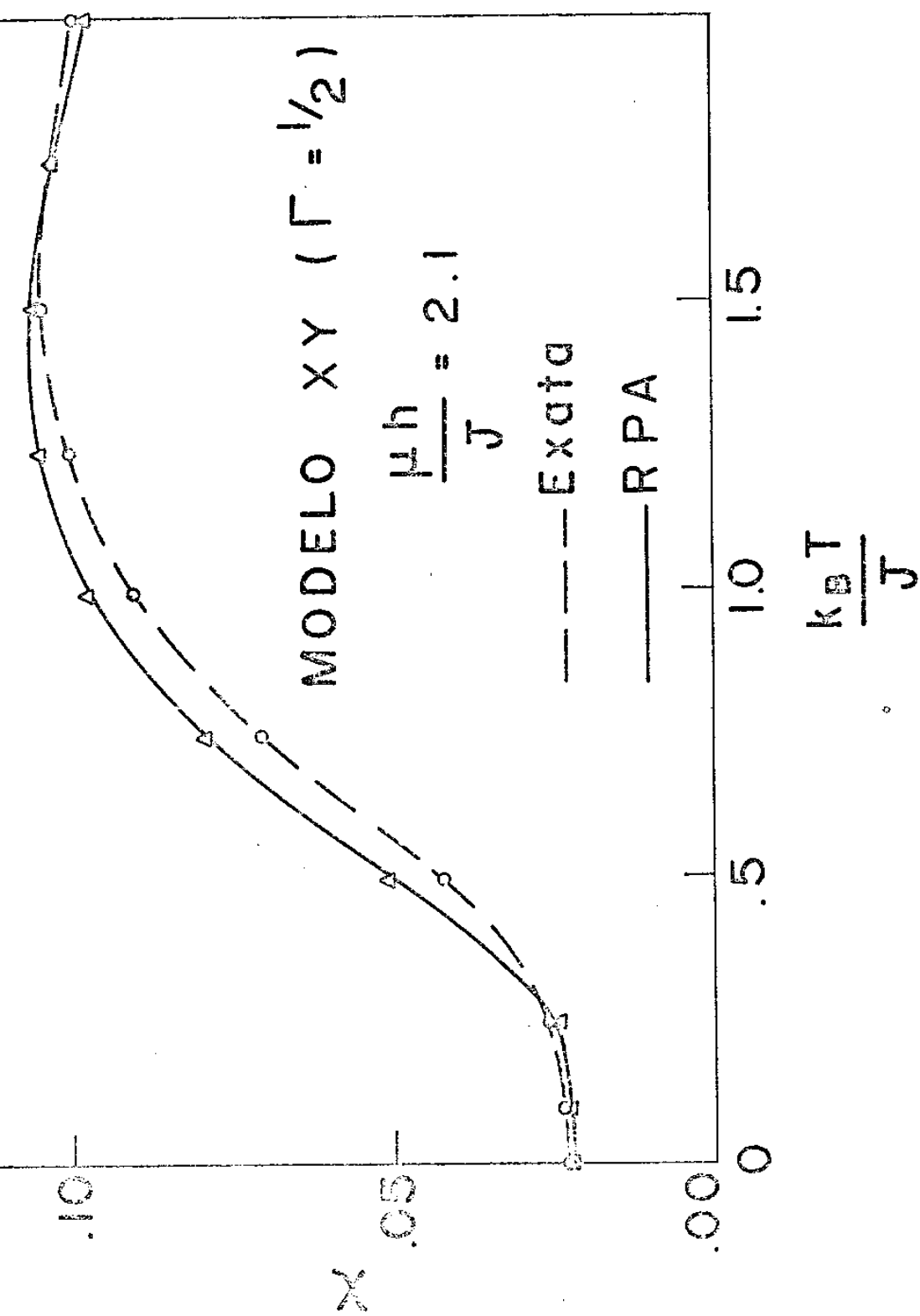


FIG. 15 - SUSCETIBILIDADE

CONCLUSÕES

Nesse trabalho aplicamos ao problema do ferromagnetismo de Heisenberg dois métodos da teoria de muitos corpos, o método das funções de Green e o da perturbação estatística.

Vimos que o segundo método é de aplicação muito mais direta que o das funções de Green. Sabíamos ainda que esses métodos mostravam-se equivalentes nos casos das ondas de spin de Bloch, e nas aproximações R.P.A. e simétrica. Considerando o caso da aproximação de Dembinski verificamos a não equivalência entre os dois métodos. Sendo que essa não equivalência deve-se ao fato de que a aplicação do método da perturbação estatística ao Hamiltoniano de Heisenberg é feita em termos das transformadas de Fourier dos operadores de spin. Ainda, no método da perturbação estatística, calculamos a correção em segunda ordem verificando a pouca importância desse termo no cálculo da magnetização.

Finalmente, o estudo do sistema de "clusters" de spins $1/2$ feito no capítulo IV mostra que o "decoupling" R.P.A. não é adequado para o tratamento de sistemas anisotrópicos.

REFERÊNCIAS

- 1 - W. Heisenberg, Z. Physik 49, 619 (1928)
- 2 - M. E. Lines, Phys. Rev. 174, 9 (1971)
- 3 - F. Leoni e C. Natoli, Phys. Rev. B4, 2243 (1971)
- 4 - E. Becker e M. Plischke, Phys. Rev. B1, 314 (1970)
- 5 - J. F. Devlin, Phys. Rev. B4, 136 (1971)
- 6 - M. Tanaka e Y. Kondo, J. Phys. Soc. Japan, 33, 269 (1972)
- 7 - S. V. Tyablikov, Methods in the Quantum Theory of Magnetism (Plenum Press, Inc. New York, 1967)
- 8 - F. J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217, (1956)
- 9 - J. D. Patterson e W. H. Southwell, Am. J. Phys. 36, 343 - (1968)
- 10 - M. A. Tenan e J. G. Ramos, Nuovo Cimento, 9, 266 (1974)
- 11 - D. C. Wallace, Phys. Rev. 152, 261 (1966)
- 12 - J. G. Ramos e A. A. Gomes, Rev. Bras. de Fis. 2, 3, (1972)
- 13 - S. T. Dombinski, Con. J. Phys. 46, 1021, (1968)
- 14 - J. G. Ramos, Tese de Doutorado - São Paulo (1970)
- 15 - F. Bloch, Z. Physik 61, 206 (1930); 74 295 (1932)
- 16 - T. Holstein e H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940)
- 17 - V. Mallev, Soviet Physics - JETP, 6, 776 (1958)
- 18 - S. V. Tyablikov, Ukv. Mat. Zh. 11, 287 (1959)
- 19 - H. Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963)
- 20 - J. G. Ramos e A. A. Gomes, Con. J. Phys. 49, 932 (1971)
- 21 - D. C. Wallace, Phys. Rev. 153, 547 (1967)
- 22 - T. Morita e T. Tanaka, Phys. Rev. 138, A1395 (1965)