

UFMT

Instituto de Ciências Exatas e da Terra
Departamento de Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO



— Fevereiro 2007 —

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Maria Jannaira Bueno

Interações Competitivas em Sistemas Magnéticos Bidimensionais

Dissertação apresentada ao Curso de
Pós-graduação em Física na Universi-
dade Federal de Mato Grosso como re-
quisitos necessários a obtenção do tí-
tulo de Mestre em Física

Orientador:

Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda

— Fevereiro 2007 —

Vida: fonte de todas nossas realizações

Imaginação é mais importante que inteligência

Albert Einstein

Agradecimentos

- Ao meu pai (em memória), pela educação exemplar e por sua visão do saber: "Nunca é demais aprender, pois todo o conhecimento adquirido, de alguma forma, algum dia será aproveitado";
- A minha mãe (em memória), pelo seu amor e dedicação, que me ensinou através da sua vida, nunca desejar a alguém o que eu não quero para mim;
- Aos meus filhos: Jorge Luis e Jacqueline Cristina pelo apoio incondicional;
- Aos meus amigos e companheiros do mestrado pela determinação;
- Aos meus os professores da Universidade Federal de Mato Grosso, pois participaram da minha formação acadêmica, contribuindo para este momento;
- Em especial aos professores: Dr. Alberto S. de Arruda e Dr. Jorge Luiz Brito de Faria, por esta oportunidade contribuindo para meu enriquecimento acadêmico, respectivamente, com sua orientação e co-orientação;
- a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior(CAPES), pelo apoio financeiro;

Conteúdo

Lista de Figuras	vi
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
Introdução	1
2 Filmes Finos Magnéticos	8
2.1 Filmes Finos	8
2.2 Técnicas mais usadas	10
2.2.1 Epitaxia de Feixe Molecular	11
2.2.2 Vaporização Catódica (Sputtering)	12
2.3 Aplicação Tecnológica	13
2.3.1 Memória Magneto-Óptica	13
2.3.2 Spintrônica ou Magneto-eletrônica	14
2.4 Modelos Teóricos	17
3 Funções de Green	19
3.1 Funções de Green Retardada, Avançada e Causal	19
3.1.1 Função de Correlação Temporal para as Funções de Green	20
3.1.2 Equação de Movimento para as funções de Green	22
3.1.3 Representação Espectral	25
3.2 Aplicação em Sistema Ferromagnético Simples	29

3.2.1	Analisando no limite $T \ll T_c$	35
3.2.2	Analisando no Limite $T \rightarrow T_c$	38
4	Interações Competitivas em Sistemas Magnéticos Bidimensionais	40
4.1	Introdução	40
4.2	Modelo e Método das Funções de Green-Zubarev	42
5	Resultados e Conclusões	51
5.1	Introdução	51
5.1.1	A relação de Dispersão	51
5.2	Conclusão	54
5.3	Perpectivas Futuras	55
	Bibliografia	56

Lista de Figuras

2.1	(Esquerda) Dimensões representativas de algumas espécies típicas, em suas várias escalas. (Direita) Região de microestrutura (dimensão dos Filmes Finos), comparada com uma faixa que compreende desde macroestrutura, passando pela região de domínio da nanotecnologia, até dimensões subatômicas (escala logarítmica). Figuras retiradas da referência [29]	10
2.2	Ilustração do processo de epitaxia de feixe molecular (MBE), Figura retirada da referência [30]	11
2.3	Ilustração dos componentes básicos de um sistema de vaporização catódica, ou pulverização (sputtering), Figura retirada da referência [30]	12
2.4	Ilustração de um sistema de gravação e leitura magneto-óptica. Figura retirada da referência [30]	14
2.5	Ilustração de esquemática do cabeçote de leitura e gravação magnética em discos rígidos utilizados em computadores. Figura retirada da referência [30]	15
2.6	Ilustração da estrutura básica de uma válvula de spin. Figura retirada da referência [30]	16
4.1	A ilustração representa N spins distribuídos em duas monocamadas magnéticas superpostas ($l = 1$ e $l = 2$), onde os spins em cada ponto da rede estão acoplados ferromagneticamente através da interação dipolar J_{dd} , em baixas temperaturas . . .	42

- 4.2 A ilustração representa a competição entre as interações de longo alcance J_{dd} e a interação de curto alcance J_{ex} , nas duas monocamadas magnéticas superpostas ($l = 1$ e $l = 2$). 43
- 5.1 Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. A curva corresponde aos seguintes parâmetros $J = J_{\parallel} = J_{\perp} = 0$ e $E_d = 0.02$ 52
- 5.2 Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. As curvas correspondem ao valor $E_d = 0,02$ e aos seguintes valores do parâmetro J: curva A ($J = 0,00087$), B($J = 0,000875$), C($J = 0,000876$) e D($J = 0,000880$). O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início à frustração do sistema. 53
- 5.3 Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. As curvas correspondem ao valor $E_d = 0.02$ e aos seguintes valores do parâmetro J: curva A ($J = 0,00087$), B($J = 0,000875$), C($J = 0,000876$) e D($J = 0,000880$). O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início a frustração do sistema. 54
- 5.4 Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. As curvas correspondem ao valor $E_d = 0,04$ e aos seguintes valores do parâmetro J: curva A ($J = 0,0017$), B($J = 0,00175$) e C($J = 0,0018$) . O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início a frustração do sistema. 54

Resumo

Neste trabalho, estudamos o modelo quântico bidimensional de Heisenberg de Spin $\frac{1}{2}$, interagindo através de uma interação de troca de curto alcance antiferromagnética entre os primeiros vizinhos (J) e pela interação dipolar ferromagnética de longo alcance (Ed) acoplando cada spin com todos os spins do sistema. Utilizando o método das funções de Green dependente do tempo e da temperatura e da aproximação das fases aleatórias (RPA) obtemos a dependência da relação de dispersão dos magnons como uma função do parâmetro de frustração δ , onde δ é a razão entre as magnitudes da interação de troca e a dipolar, $\delta = \frac{J_{ex}}{Ed}$. Analisamos os efeitos da competição entre a interação dipolar ferromagnética de longo alcance e a interação de troca antiferromagnética de curto alcance na estabilização da ordem de longo alcance em sistemas magnéticos bidimensionais, e verificamos que a ordem de longo alcance é estável, na região de k pequeno, até um certo valor crítico do parâmetro de frustração $\delta_c = 0.04375$. Para valores do parâmetro de frustração maiores do que o valor crítico ($\delta > \delta_c$), o sistema magnético é frustrado.

Abstract

In this work we study the quantum spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg model in two dimensions, interacting through a nearest-neighbor-neighbor short-range antiferromagnetic exchange (J) and a long-range ferromagnetic dipole-dipole interaction (Ed) coupling each spin with all the others. By using Double-Time Green's function, and decoupled within the random phase approximation we obtain the dependence of the magnons of dispersion relation as a function of frustration parameter δ , where δ is the ratio between the strengths of the exchange e dipolar interaction ($\delta = \frac{J_{ex}}{Ed}$). We analyzed the effects of the competition between long-range ferromagnetic dipole-dipole interaction and of the short-range antiferromagnet exchange in the stabilization of the long-range order in two-dimensional magnetic systems, and we verified that the ferromagnetic order is stable, in the region of small k , until a certain critical value of the frustration parameter $\delta_c = 0.04375$. For values of the bigger parameter of frustration that the critical value ($\delta > \delta_c$), the magnetic system is frustrated.

Capítulo 1

Introdução

O interesse no estudo das propriedades magnéticas dos materiais é crescente desde os tempos mais remotos. Apesar do grande interesse devotado ao fenômeno do magnetismo, o seu desenvolvimento se deu muito lentamente. O status científico só foi alcançado na segunda metade do século XIX com as investigações sistemáticas das propriedades magnéticas dos materiais feita por Pierre Curie.

No começo deste século definiram-se como ferromagnetos aqueles materiais magnéticos que exibiam magnetização espontânea (ordenamento dos dipólos magnéticos) abaixo de uma dada temperatura (conhecida por temperatura crítica) quando na ausência do campo magnético aplicado. Esta temperatura era diferente para diferentes materiais e foi denominada de temperatura de Curie (T_c).

A explicação microscópica do magnetismo começou com a teoria do campo molecular de Weiss. Ele assumiu que os materiais magnéticos eram compostos por átomos magnéticos (pequenos imãs) cada um com momento de dipolo magnético. A interação entre os dipolos magnéticos era de tal forma que cada um sofria a ação de um campo molecular devido aos dipolos vizinhos. Esta teoria descreveu a variação da magnetização espontânea com a temperatura em completa concordância com os experimentos da época.

Hoje sabemos que o magnetismo nos materiais é oriundo de efeitos essencialmente quânticos. Assim na década de 20, com o desenvolvimento da mecânica quântica, foi possível explicar a origem dos dipolos magnéticos

atômicos, os quais eram devidos ao desemparelhamento (causado pela interação eletrostática entre elétrons das camadas externas) dos spins eletrônicos nos íons magnéticos localizados nos sítios da rede. Heisenberg propôs um mecanismo para as interações dos spins eletrônicos nos materiais, hoje conhecido interação de Heisenberg. Os spins localizados nos sítios i interagem com os spins dos sítios j através de uma energia de troca $J_{ij} > 0$ favorece o alinhamento paralelo dos spins (ferromagnetismo) e para o caso $J_{ij} < 0$ o favorecimento passa a ser anti-paralelo (anti-ferromagnetismo). Atualmente, o interesse no estudo do magnetismo é ainda maior, não somente pelo fascínio de suas propriedades que tem levado muitos pesquisadores a se dedicarem integralmente ao estudo dessas propriedades, mas também devido ao grande valor agregado que gira em torno do comércio de materiais magnéticos. Vários são os fatores relevantes, destacando-se o desenvolvimento tecnológico nas áreas de sínteses desses materiais e sua caracterização por técnicas modernas de alta precisão. Por outro lado, a formulação de modelos teóricos simples, baseados na análise microscópica destes materiais, aliadas às técnicas modernas de simulação computacional tem conduzido a resultados satisfatórios na descrição de suas propriedades físicas. Os sistemas magnéticos apresentam como principal característica a existência de uma fase magneticamente ordenada na região de baixas temperaturas. A transição de fase entre os regimes ordenados e desordenados pode ocorrer de forma contínua. Neste caso, diz-se que a transição é de segunda ordem. Quando a transição é descontínua, diz-se que a mesma é de primeira ordem. Para a descrição teórica quantitativa de uma transição de fase faz-se necessário identificar uma quantidade, chamada de parâmetro de ordem, cuja média térmica anula-se em um lado da transição (quase invariavelmente no lado da alta temperatura). Não há, em geral, nenhum esquema para definir parâmetros de ordem. Entretanto, é comum considerar cada situação física particular. A magnetização é o parâmetro de ordem para sistemas magnéticos. Particularmente para uma transição de segunda ordem, a magnetização diminui continuamente à medida que a temperatura aumenta, anulando-se em uma temperatura crítica T_c . Próximo a esta temperatura a magnetização espontânea varia segundo uma lei de potência caracterizada pelo expoente β , da forma $M|T - T_c|^\beta$ para $T < T_c$: Outras grandezas termodinâmicas de um

sistema magnético possuem singularidades próximas ao ponto crítico. Essas, por sua vez, são representadas por leis de potências com expoentes críticos bem definidos. Além da magnetização, outras grandezas de interesse são: o calor específico, a susceptibilidade magnética e o comprimento de correlação. Todas apresentam comportamentos característicos nas proximidades do ponto crítico expressos por relações similares àquelas da magnetização.

Vários modelos são empregados para estudar os materiais que exibem propriedades magnéticas. Entre os modelos conhecidos na literatura, destacam-se aqueles que são capazes de capturar a essência do que acontece quando um sistema real sofre uma transição de fase. Neste contexto, os modelos de Ising e Heisenberg são os mais explorados na literatura.

Nas últimas décadas, dentro os sistemas magnéticos, tem aumentado o interesse nas propriedades magnéticas de filmes finos. Assim, os números de trabalhos experimentais[1, 2, 3, 4, 5, 6] e teóricos[7, 8, 9, 10, 11, 12] publicados na literatura, abordando esse tema, têm crescido enormemente nos últimos anos. Muitas questões interessantes relacionadas aos filmes, construídos com poucas camadas atômicas, tal como a drástica diferença entre as propriedades magnéticas de tais filmes e de cristais ferromagnéticos, constituídos do mesmo material. Por exemplo, um filme fino de ferro (Fe), pode apresentar uma forte anisotropia uniaxial, caracterizada por uma grande energia anisotrópica, maior do que a apresentada em um cristal ferromagnético constituído do mesmo material[13]. Isto é devido à baixa simetria dos pontos da rede localizados na superfície e na interface entre as poucas camadas atômicas do filme fino. Esta anisotropia uniaxial pode favorecer um alinhamento dos spins perpendicularmente ao plano do filme. Se o filme for muito fino, esta anisotropia pode superar a energia dipolar, sendo que a energia dipolar favorece o alinhamento dos spins paralelamente à superfície do filme, e conseqüentemente levar a magnetização a se orientar perpendicularmente à superfície. Estudos experimentais mostram que os spins podem se reorientar, partindo de uma direção normal à superfície para a uma direção paralela ao filme, com o aumento da temperatura[5].

A ordem de longo alcance em sistemas com baixa dimensionalidade tem atraído a atenção tanto dos teóricos quanto dos experimentais. O teorema de Mermin e Wagner (provado rigorosamente[14]) indica que ordem de longo

alcance não é possível para o modelo de Heisenberg isotrópico em sistemas bidimensionais, em temperaturas finitas. Porém, em sistemas magnéticos reais a interação dipolar está sempre presente em adição à interação de troca. Embora a interação dipolar seja usualmente duas a três ordens de grandezas menor que a interação de troca, é crucialmente importante estudar suas implicações na física das transições de fases. Devido ao seu caráter anisotrópico e de longo alcance a interação dipolar muda qualitativamente a física na região crítica e tem também uma drástica influência no estado fundamental e no espectro de excitação[15], especialmente em sistemas de baixas dimensões.

O interesse em sistemas magnéticos não convencionais também têm ressurgido nesses últimos dez anos[16]. Competições entre interações, frustrações geométricas devido a subjacência da rede, pode levar a estado fundamental não convencional, diagrama de fases únicos e novos fenômenos críticos[17]. O fato do estado fundamental nestes sistemas ser altamente degenerado, e devido à baixa dimensionalidade, as contribuições das flutuações para os observáveis físicos são aumentados. A interação dipolar altera profundamente as propriedades de sistemas com simetria de translação, sejam em duas ou três dimensões. Por exemplo, o espectro de excitações elementares de um ferromagneto tridimensional, com interação de troca isotrópica, tem um modo cuja relação de dispersão é quadrática ($\omega \approx k^2$), na região de k muito pequeno, porém a interação dipolar quando considerada muda a relação de dispersão para a forma linear ($\omega \approx k$)[18]. Sistemas bidimensionais com somente interação de troca de curto alcance isotrópica não apresentam ordem de longo alcance, devido a relação de dispersão de longos comprimentos de onda ser proporcional à raiz quadrada de ω , porém com a interação dipolar a relação de dispersão é aproximadamente: $\omega \approx k^{\frac{1}{2}}$ [10]. Uma questão interessante, do ponto de vista acadêmico, se refere a competição da anisotropia magnética com a interação de troca. Por exemplo, apesar das anisotropias magnéticas em filmes ferromagnéticos ultrafinos (metais de transição) serem muito menores que a interação de troca isotrópica, observações mostram que elas afetam de modo significativo as propriedades magnéticas, tanto na fase ferromagnética como na fase paramagnética. Essa extensão da influência das anisotropias magnéticas além da temperatura de Curie é uma característica que distingue os sistemas com baixa dimensionalidade (sistemas bidimension-

ais) dos sistemas volumosos.

A competição entre interações magnéticas de curto alcance e as de longo alcance tem tido um crescente interesse em seu entendimento[19, 20]. A interação dipolar dá origem a uma excitação de onda de spins em sistemas magnéticos, da mesma forma como faz a interação de troca. Quando nenhuma anisotropia está presente as ondas de spins dipolares podem levar a importantes efeitos quânticos. Ferromagnetos com interação puramente dipolar foi estudado na aproximação de onda de spin por Cohen e Keffer[?], e eles verificaram que nas redes bcc e fcc aparecem apreciáveis correções do ponto zero para a energia do estado fundamental.

Recentemente, Sousa e Branco[20] estudaram o modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 em duas dimensões com interação de troca antiferromagnética ($J < 0$) entre os primeiros vizinhos, e considerou também parte da interação dipolar de longo alcance, somente o termo dipolar ($J_{dd} = \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r^3}$), acoplando todos os possíveis pares de spin na rede quadrada. Utilizando o método das Funções de Green-Zubarev[33] e a aproximação das fases aleatórias, eles mostraram a dependência da temperatura crítica ferromagnética como uma função da frustração ($\delta = \frac{J_{ex}}{J_{dd}}$). A temperatura crítica entre as fases ferromagnética e paramagnética decresce com o parâmetro da frustração, como era esperado, porém vai a zero em um valor finito deste parâmetro.

No primeiro capítulo realizaremos uma rápida revisão sobre magnetismo enfatizando as técnicas de crescimento de filmes[30]. Filmes finos magnéticos apresentam um comportamento diferente daqueles observados em sistemas volumosos, principalmente em virtude da sua dimensionalidade reduzida, permitindo uma ampla aplicação na armazenagem de dados. Portanto, o interesse científico e tecnológico nesses materiais, tem aumentado consideravelmente nos últimos anos, devido a necessidade de se obter novos dispositivos com maior capacidade de memória, maior velocidade em gravação de dados e acesso em disco magnético a fim de obter novos dispositivos, como memória magneto-óptica e cabeça de leitura magneto-resistência[22].

No segundo capítulo apresentaremos a técnica das Funções de Green que utilizaremos para estudar a competição entre as duas interações, onde aplicamos a técnica para um ferromagneto puro de Heisenberg. É importante ressaltar que o método das funções de Green é proveniente da teoria de

campos, onde estas são definidas como médias quânticas de operadores de campo. A sua utilização na Mecânica Estatística é, de fato, uma extensão do método para temperaturas finitas, isto é, na Mecânica Estatística as médias são efetuadas não no estado fundamental, como em teoria de campos, porém no ensemble canônico[23]. Isto permite utilizá-las para calcular as propriedades termodinâmicas de sistemas em equilíbrio. Nos problemas de ferromagnetismo as funções são utilizadas para calcular funções de correlação. Sendo que com as representações espectrais das funções de correlação verifica-se que a intensidade espectral que pode ser calculada através das funções de Green correspondentes. As funções de Green são calculadas a partir de sua equação de movimento. As dificuldades do método surgem neste ponto, pois as equações de movimento se apresentam como um acoplamento entre funções de Green de ordens diferentes, sendo que a função de Green inicial está sempre associada a uma função de Green de ordem superior. Obtém-se então uma cadeia infinita de equações acopladas. A solução possível está em romper a cadeia.

Diversas propostas formais de desacoplamento, cujas justificativas, em última análise, recaem sempre na coincidência ou não com os resultados obtidos por Dyson[24] para a expansão da magnetização em baixa temperatura. O desacoplamento “Random Phase Approximation”, RPA, de Tyablikov[25] consiste em desprezar as correlações entre os movimentos transversais e longitudinais de spins localizados em pontos distintos da rede. Embora os resultados da RPA para baixa temperatura sejam insatisfatórios (surge um termo T^3 na magnetização espontânea), esse método despertou grande interesse devido ao fato de ser possível usá-lo para descrever as propriedades do ferromagneto de Heisenberg também na região próxima da temperatura crítica.

No capítulo 3 estudaremos a competição entre a interação de curto alcance ($J < 0$, anti-ferromagnética) e a interação dipolar ferromagnética de longo alcance na desestabilização da ordem de longo alcance de um filme ferromagnético. Tal como Sousa e Branco[20], o nosso modelo também consistirá do modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ em duas dimensões com interação de troca antiferromagnética ($J < 0$) entre os primeiros vizinhos e da interação dipolar acoplando todos os possíveis pares de spins na rede quadrada. Devemos ressaltar que, diferentemente de Sousa e Branco, estamos utilizando

a interação dipolar com todos os seus termos.

No capítulo 4 apresentaremos os resultados. Verificaremos onde ocorre a frustração existente para valores dos parâmetros de troca e dipolar, sendo que definimos $\delta = \frac{J_{ca}}{Ed}$. Observaremos que quando δ atingir um certo valor, o qual chamaremos de $\delta_c = 0.04375$, o sistema se torna frustrado. Portanto, quando δ atingir seu valor crítico (δ_c) os momentos magnéticos do sistema tornam-se frustrados, pois o sistema não pode estar num estado ferromagnético nem em um estado antiferromagnético. Apresentaremos, também, outras possibilidades para a continuidade deste trabalho.

Capítulo 2

Filmes Finos Magnéticos

2.1 Filmes Finos

Nas últimas décadas, o estudo das propriedades magnéticas de filmes finos tem despertado muito interesse, tornando um importante assunto para pesquisadores teóricos[6, 26] e experimentais[1, 5]. Uma questão interessante relacionada a filmes finos ferromagnéticos está na diferença do comportamento desses sistemas, com baixa dimensionalidade, em relação a sistemas volumosos, ambos constituídos do mesmo material. Por exemplo, um filme muito fino, constituído de Fe, pode apresentar uma forte anisotropia uniaxial caracterizada por uma grande energia anisotrópica, maior do que apresentada em um cristal ferromagnético constituído do mesmo material[4] favorecendo um alinhamento dos spins perpendicularmente ao plano da superfície do filme. Se o filme for muito fino esta anisotropia pode superar a energia dipolar (que favorece o alinhamento dos spins paralelamente à superfície) orientando a magnetização perpendicular à superfície do filme. Estudos experimentais revelam que com o aumento da temperatura os spins se reorientam paralelamente a superfície do filme[5].

Esta mudança no comportamento das propriedades magnética se deve ao fato de que em um filme fino existe uma baixa simetria dos pontos da rede localizados na superfície e na interface, sendo que, em um cristal ferromagnético de Fe, todos os átomos estão localizados em uma rede regular com simetria cúbica.

Uma outra questão interessante refere-se a ordem de longo-alcance em sistemas com baixa dimensionalidade. Observa-se que todo sistema real apresenta algum tipo de anisotropia, como a interação dipolar, que é de longo-alcance. Sua presença quebra a simetria rotacional do sistema e modifica drasticamente a relação de dispersão dos mágnons. Sendo que, relação de dispersão dos mágnons são as excitações elementares do sistema de spins, ou seja, é a quantização da existência de um movimento coletivo de spins, conhecido também como ondas de spins. Porém, o teorema de Mermin e Wagner[14] mostra, rigorosamente, que a ordem de longo alcance não é possível para modelo de Heisenberg isotrópico em duas dimensões, em temperaturas finitas. Por exemplo, para um sistema isotrópico a relação de dispersão é quadrática no vetor de onda, contudo na presença da interação dipolar a relação de dispersão deixa de ser quadrática variando linearmente com o vetor de onda[27], e em baixas temperaturas a anisotropia dipolar leva a uma magnetização.

Filmes finos, são materiais bidimensionais ou quase bidimensionais que podem ser classificados de acordo com a espessura da estrutura[28] formada em:

Filme Ultrafino	$< 5\mu m$
Filme Fino	$> 5\mu m$
Filme	$1 - 100\mu m$
Folha	$0,1 - 1mm$
Lâmina	$> 1mm$

Esses materiais têm sido amplamente empregados em dispositivos eletrônicos, que dependendo da aplicação desejada podem ser feitos com metais, isolantes, semicondutores ou supercondutores. Por exemplo, são aplicados em resistores, capacitores, contatos metálicos, em dispositivos semicondutores, camadas dielétricas em dispositivos óptico-eletrônicos, dispositivos de filmes ou supercondutores, etc.

O preparo de filmes finos é realizado através da deposição gradual de átomos ou moléculas do material desejado sobre um substrato, isto é, sobre a superfície de outro material que serve de apoio, mas isso só está sendo possível graças ao desenvolvimento e aperfeiçoamento de técnicas nas últimas décadas. Entre os diversos métodos utilizados para o preparo de filmes mais

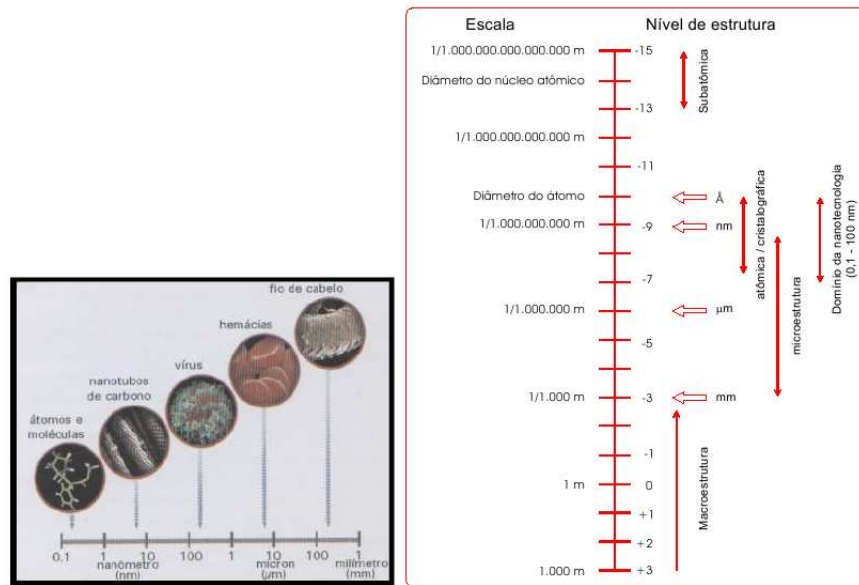


Figura 2.1: (Esquerda) Dimensões representativas de algumas espécies típicas, em suas várias escalas. (Direita) Região de microestrutura (dimensão dos Filmes Finos), comparada com uma faixa que compreende desde macroestrutura, passando pela região de domínio da nanotecnologia, até dimensões subatômicas (escala logarítmica). Figuras retiradas da referência [29]

finos temos a deposição em alto vácuo, e para filmes mais espessos a deposição eletroquímica, a deposição química de vapor e a epitaxia de fase líquida[30].

2.2 Técnicas mais usadas

Todas as técnicas de deposição de filmes é feita em uma câmara de alto vácuo. Atualmente a deposição de filmes muito finos é graças ao aperfeiçoamento nas técnicas de vácuo, atingindo pressões tão baixas quanto 10^{-9} a 10^{-11} Torr[30], podendo evacuar câmaras com volumes da ordem de $1m^3$, possibilitando a deposição de camadas de átomos ou moléculas uma sobre as outras. O processamento é feito em três etapas: primeiramente, os materiais que servem de matéria-prima são fragmentados (por meio da ação de fontes térmicas, ou de um plasma, ou um laser, ou bombadeiro por elétrons ou íons acelerados) em átomos neutros, íons ou moléculas. Na segunda etapa, o

vapor formado por esses fragmentos é transportado na direção do substrato. Finalizando, na terceira etapa, esses fragmentos depositados interagem física e quimicamente entre si, nucleando e formando porções maiores do material, assim é formado o filme idealizado.

2.2.1 Epitaxia de Feixe Molecular

A técnica Epitaxia de Feixe Molecular (MBE-Molecular Beam Epitaxy)[30], consiste de câmara em alto vácuo, onde a matéria-prima é aquecida separadamente em fontes individuais (candinho fechado), os quais contém um orifício na extremidade. A substância é aquecida até fundir gerando vapor sob pressão no interior do candinho, e assim é ejetado através do orifício no vácuo, produzindo um feixe atômico ou molecular incidindo no substrato, ilustrada na figura 2.2.1.

Esta técnica é uma das mais sofisticadas por permitir fabricar cristais com mudanças abruptas de composição formando multicamadas, ou super-redes, podendo ser utilizada na fabricação de multicamadas magnéticas, intercaladas por camadas não magnéticas, metálicas ou isolantes, empregada em dispositivos de gravação.

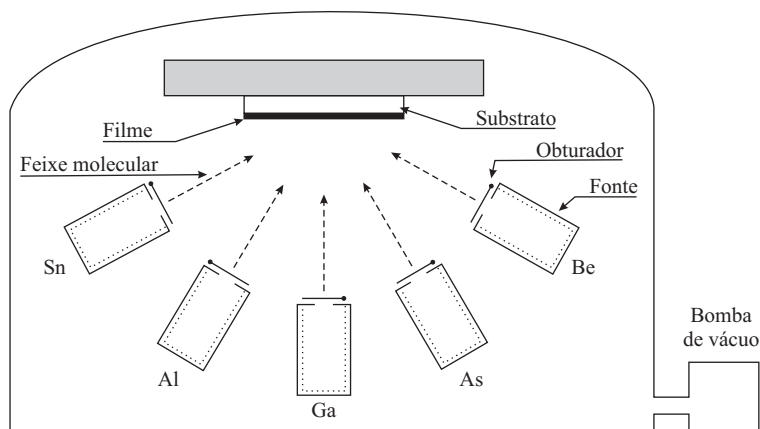


Figura 2.2: Ilustração do processo de epitaxia de feixe molecular (MBE), Figura retirada da referência [30]

2.2.2 Vaporização Catódica (Sputtering)

Na Vaporização Catódica, ou Pulverização (Sputtering)[30], ilustrada na Figura 2.3, a câmara é evacuada permanecendo por horas a uma pressão de (10^{-8} a 10^{-11} Torr) a fim de eliminar gases residuais. Logo após para formar uma atmosfera inerte, um gás nobre (Ar, Ne) é injetado na câmara sobre pressão de 10^{-3} Torr. Entre os suportes do substrato e do alvo é aplicada uma diferença de potencial. A matéria-prima a ser pulverizada, fica localizada no alvo. A diferença de potencial aplicada acelera os íons do plasma, os quais adquirem uma energia suficiente para fragmentar a substância no alvo, formando um vapor que é depositado no substrato. Podem ser empregados no processo vários alvos formando um filme sobre outro (multicamadas). Atualmente, para aumentar a eficiência desse processo, coloca-se um imã

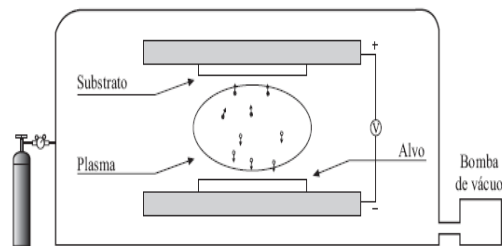


Figura 2.3: Ilustração dos componentes básicos de um sistema de vaporização catódica, ou pulverização (sputtering), Figura retirada da referência [30]

permanente (Magnetron Sputtering) para criar um campo magnético, confinando o plasma na região alvo, esse aperfeiçoamento permite o uso no processamento de dispositivos eletrônicos.

2.3 Aplicação Tecnológica

Filmes finos magnéticos apresentam um comportamento diferente daqueles observados em sistemas volumosos, principalmente em virtude da sua dimensionalidade reduzida, permitindo uma ampla aplicação na armazenagem de dados. Portanto, o interesse científico e tecnológico nesses materiais, tem aumentado consideravelmente nos últimos anos, devido a necessidade de se obter novos dispositivos com maior capacidade de memória, maior velocidade em gravação de dados e acesso em disco magnético a fim de obter novos dispositivos, como memória magneto-óptica e cabeça de leitura magneto-resistência.

2.3.1 Memória Magneto-Óptica

Memória magneto-óptica é tecnologia empregada em discos removíveis de alta capacidade, em um processo de gravação termomagnética do disco em movimento, como ilustrado na figura 2.4. Preliminarmente, o filme já está magnetizado na direção perpendicular (para cima) correspondendo ao bit 0. No processo de gravação, o feixe de um laser modulado pelo sinal elétrico contendo a informação a ser gravada (0 ou 1), é focalizado por uma lente na camada magnética. Nessa região, no foco da lente, existe um campo magnético criado por um ímã permanente dirigido para baixo, cujo valor é menor que o campo coersivo (H_c) do filme a temperatura ambiente, desta forma, sozinho não altera a magnetização do filme. Portanto, se a informação a ser gravada for o bit 1, o feixe de laser aquece esta região focalizada pela lente, uma região muito pequena, produzindo uma rápida diminuição de H_c , possibilitando a inversão do sentido da magnetização do ímã. No processo de leitura, o laser emite um pulso que passa por um polarizador e incide no meio magnético, o feixe refletido atravessa o espelho parcial semi-refletor, sendo convertido em sinal elétrico no fotodiodo. Como a polarização do feixe refletido depende do sentido da magnetização na região do foco da lente, a intensidade da luz após o analisador varia dependendo se o bit gravado for 0 ou 1.

Neste processo de leitura que temos como fundamento o Efeito Kerr Magneto-Optico, ou seja, quando um feixe de luz polarizada incide na super-

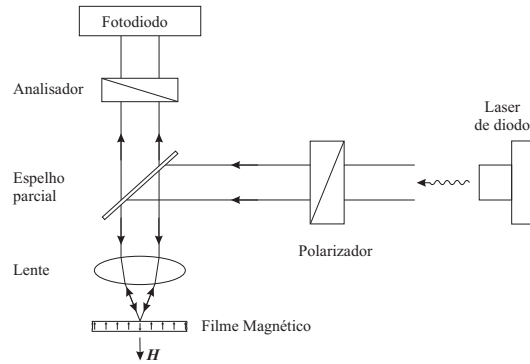


Figura 2.4: Ilustração de um sistema de gravação e leitura magneto-óptica. Figura retirada da referência [30]

fície de um material magnético, a luz refletida tem polarização em direção um pouco diferente da incidente, a mudança no sentido da polarização depende do sentido da magnetização.

Em disco magneto-ótico, feito com filmes finos ou multicamadas de ligas, onde os materiais mais utilizados nos filmes são ligas binárias ou ternárias de metais de transição $3d$ e terras raras, tais como Gd, Co, GdFe, TbFe, DyFe, GdTbFe e TbDyFe, ou seja, materiais com magnetização perpendicular ao filme e que apresentam um forte efeito magneto-ótico.

Entre as principais vantagens tecnológicas, em relação a gravação magnética convencional, está na maior capacidade de armazenamento, em virtude da área de focalização da lente ser muito menor do que a área mínima necessária para gravar e reproduzir um sinal com cabeçotes indutivos, cerca de 1000 vezes maior. Outra vantagem, o menor tempo de acesso a informação, cerca de 10 vezes menor, porque não há contato do cabeçote de gravação e leitura do disco, permitindo maior velocidade do disco.

A desvantagem está no alto custo desta tecnologia em relação aos discos magnéticos flexíveis e de disco ópticos compactos, dificultando sua propagação.

2.3.2 Spintrônica ou Magneto-eletrônica

Magneto-resistência gigante (GMR - Giant Magneto resistance) é o fenômeno onde a resistência em certas multicamadas formadas de filmes magné-

ticos, intercaladas por filmes metálicos, varia muito com o campo magnético aplicado, em até duas ordens de grandeza, devido à influência dos spins dos elétrons nas propriedades de transporte. Este fenômeno magneto-resistência gigante foi descoberto em 1988, por M.N. Baibich [22], estimulando a pesquisa em nanoestrutura e multicamadas magnéticas, resultando nas observações de inúmeros outros fenômenos nos quais as propriedades de transporte são controladas pelo spin do elétron, desenvolvendo vários dispositivos eletrônicos, dando origem a um novo ramo da tecnologia chamado de spintrônica ou magneto-eletrônica.

Um produto importante da spintrônica é a válvula de spins[30], tecnologia empregada em cabeçotes de leitura de gravação magnética em discos rígidos de computadores, como ilustrado na figura 2.5. O processo de gravação é feito com o dispositivo tradicional, onde a corrente de gravação cria um campo magnético no entreferro do núcleo do disco.

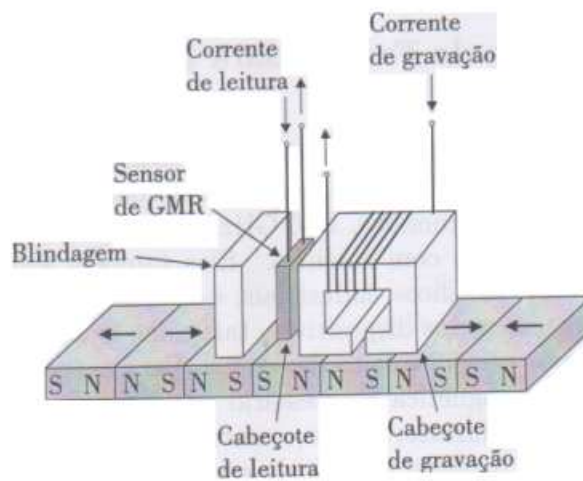


Figura 2.5: Ilustração de esquemática do cabeçote de leitura e gravação magnética em discos rígidos utilizados em computadores. Figura retirada da referência [30]

O processo de leitura da informação gravada é feita por um sensor formado por uma válvula de spin. Na região magnetizada, onde a informação está contida, um pulso de corrente passa no sensor, como a resistência do sensor varia com o campo criado pela magnetização, o valor da tensão resultante indica o bit de informação que está gravado.

A estrutura básica da válvula e spin, como ilustrado na figura 2.6, consiste de quatro camadas de filmes finos, depositados sequencialmente sobre um substrato apropriado que pode ser um cristal (Si ou GaAs) ou vidro.

Camada sensora: é a primeira camada, constituída de um filme de metal magnético mole, com baixa anisotropia magnética, com espessura da ordem de 10nm , a direção da magnetização será determinada por um campo externo que controla a resistência do dispositivo.

Camada Condutora: está sob a camada sensora, é uma camada constituída de um metal condutor não magnético (geralmente cobre) com espessura de 5nm por onde passa a maior parte da corrente de prova, A resistência desta camada depende da direção da magnetização da camada sensora em relação a camada presa.

Camada presa: está sob a camada condutora, é composta geralmente de NiFe ou CoFe, esta camada serve de referencia para a camada sensora. Tem a magnetização fixa em uma direção, quando a magnetização da camada sensora é paralela à da camada presa, a resistência R da válvula de spin é baixa, e quando é antiparalela a resistência é alta. O processo que prende a magnetização é conhecido como polarização por intercâmbio (exchange bias).

Camada antiferromagnética: é composta de materiais antiferromagnéticos a temperatura ambiente, podendo ser o NiO e IrMn, esta camada possui uma espessura maior que as outras, da ordem de dezenas de nm, para que o arranjo de spins fique congelado. A polarização de intercâmbio (exchange

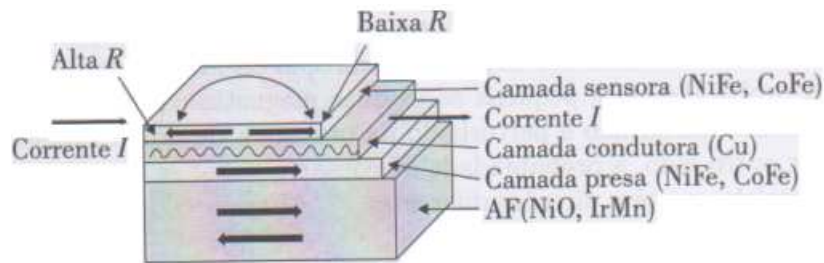


Figura 2.6: Ilustração da estrutura básica de uma válvula de spin. Figura retirada da referência [30]

bias)[31, 32], é a interação de intercâmbio é entre átomos na interface de uma camada ferromagnética (FM) com a camada de antiferromagnética (AF).

Quando o conjunto é resfriado na presença de um campo magnético externo, passando de uma temperatura acima para uma abaixo da temperatura de ordenamento do material AF os spins de interface no lado AF passam a ser majoritariamente da sub-rede paralela à magnetização de camada FM. Como a camada AF tem magnetização desprezável não é afetada por campos externos permanecendo em um estado congelado, gerando um campo magnético efetivo na interface, dezenas ou centenas de oesterds, prendendo a magnetização da camada FM durante o resfriamento

A vantagem desta tecnologia é que a leitura feita pelo cabeçote magneto-resistivo é sensível ao campo criado pela magnetização, podendo detectar a magnetização em regiões menores que os cabeçotes indutivos convencionais, sensível ao fluxo magnético, que depende da área ocupada pelo bit. Desta forma, a possibilidade de aumentar a capacidade de memória tem sido contínua, desde a introdução do sensor GMR nos sistemas de gravação de discos rígidos comerciais, a partir de 1998, a capacidade de memória chega atualmente a 20Gb/polegada².

2.4 Modelos Teóricos

Com a finalidade de identificar e descrever o comportamento dos filmes finos, estudos experimentais reconhecem as características-chaves que os modelos teóricos devem conter: a anisotropia. Esta é necessária para produzir um ordenamento em sistemas bidimensionais. Experimentalmente [13], contudo, a anisotropia não deve determinar um eixo ou um plano fácil para todas as temperaturas, pois observações mostram que a magnetização é perpendicular ao plano do filme em baixas temperaturas. Em temperatura finita ocorre a reorientação e o realinhamento da magnetização no plano do filme. Observa-se também que em um alcance intermediário, em temperaturas abaixo da temperatura de transição de reorientação (TR), a magnetização desaparece em ambas as componentes perpendicular e planar. Estudos experimentais mostram também que a TR depende da espessura do filme, indicando a existência de estados metaestáveis para baixas temperaturas.

A natureza e intensidade da anisotropia magnética é determinada pela sutil combinação das interações magnetocristalinas, devido à estrutura do

cristal ou presente na superfície, e a interação dipolar, a qual é inerentemente anisotrópica. A interação dipolar com frequência é negligenciada em estudos teóricos, devido a sua pequena magnitude em relação a interação exchange (energia de troca: interação de curto alcance), porém desempenha um papel essencial na estabilização da ordem magnética de longo alcance em sistemas quase bidimensionais[27].

A interação dipolar quebra a simetria em um estado ordenado onde a orientação dos spins está perpendicular ao plano do filme para uma orientação dos spins paralela ao plano do filme. No estado fundamental para um sistema com interação dipolar, a organização dos spins em uma rede quadrada será sempre com todos os spins ordenados no plano do filme.

Portanto, apesar da intensidade relativamente pequena desta interação, sua contribuição para a configuração do estado fundamental dos spins é muito importante, por determinar as propriedades magnéticas desses materiais. Uma descrição teórica, deve incluir a interação dipolar.

Além do mais, a interação dipolar, por ser de longo alcance, conecta cada um dos spins com todos os outros spins da rede, esta interação entre os spins nem sempre decai lentamente com a distância mas depende também da orientação relativa dos spins e da sua orientação em relação ao vetor associado aos sítios. Conseqüentemente o estado fundamental de um sistema determinado somente pela interação dipolar, discorda do estado fundamental de um sistema determinado somente pela interação exchange.

Quando ambas as interações estão presentes o sistema é inerentemente frustrado, gerando uma competição entre as interações longo-alcance e de curto-alcance. Nosso objetivo é estudar essa competição.

Capítulo 3

Funções de Green

3.1 Funções de Green Retardada, Avançada e Causal

As Funções de Green representam uma técnica muito adequada na análise de sistemas de partículas em interação, permitindo o tratamento do problema de muitos corpos em mecânica quântica de uma maneira geral e que conduz a resultados corretos em diferentes limites[23]. Por exemplo, sem nenhuma dificuldade matemática, produz uma descrição das propriedades termodinâmicas desde o estado fundamental até a temperatura crítica.

Através do uso desta técnica podemos obter as energias de excitação do sistema, ou mesmo expressar a resposta de um sistema mecânico a uma perturbação externa.

Na física teórica temos diversas classes de Funções de Green. Estas são obtidas ao tirar valores médios. Temos as Funções de Green de teoria dos campos quando a média é tirada do estado fundamental, porém se obtivermos as Funções de Green sobre um ensemble estatístico teremos as Funções de Green da mecânica estatística ou termodinâmica que são dependentes do tempo e da temperatura.

Nesta dissertação utilizamos as Funções de Green no formalismo mecânico estatístico de Zubarev[33], os quais são obtidas ao tirar a média sobre o ensemble gran-canônico. Segundo Zubarev as Funções de Green podem ser

definidas como retardada $G_r(t, t')$, avançada $G_a(t, t')$ e causal $G_c(t, t')$:

$$G_r(t, t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_r = -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T \quad (3.1)$$

$$G_a(t, t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_a = i\theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')] \rangle_T \quad (3.2)$$

$$G_c(t, t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_c = -i \langle \hat{T} \{A(t), B(t')\} \rangle_T, \quad (3.3)$$

onde os comutadores entre os operadores $A(t)$ e $B(t')$ são dados por

$$\begin{aligned} [A(t), B(t)_\eta] &= A(t)B(t) - \eta B(t)A(t) \\ \{A(t), B(t)_\eta\} &= A(t)B(t) + \eta B(t)A(t) \end{aligned}$$

sendo $\eta = +1$ para bósons e $\eta = -1$ para férmions. Por outro lado, o operador de ordenamento temporal que põe a esquerda o operador de maior tempo, podendo haver uma mudança de sinal (η) durante a inversão, é dado por

$$\hat{T} \{A(t), B(t')\} = \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')A(t)$$

A função degrau (Heaviside) faz com que nenhuma das Funções de Green (r,a,c) esteja definida para $t = t'$ esta função é definida como:

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{se } t > t' \\ 0 & \text{se } t < t' \end{cases},$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t - t') = \delta(t - t'), \quad \text{ou} \quad \frac{\partial}{\partial t}\theta(t' - t) = -\delta(t' - t)$$

3.1.1 Função de Correlação Temporal para as Funções de Green

No estudo das propriedades termodinâmicas de um sistema magnético calculamos as médias estatísticas de vários operadores de interesse. Para um operador A esta média é definida como:

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A), \quad (3.4)$$

sendo que, no equilíbrio termodinâmico ρ é o operador densidade:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}},$$

onde \mathcal{H} a Hamiltoniana do sistema e Z é a função de partição dada por:

$$Z = T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} \right) ,$$

com o fator de Boltzmann dado por $\beta = \frac{1}{K_B T}$, onde definimos como $\mathcal{H} = \hat{H} - \mu\hat{N}$, sendo que \hat{H} é operador Hamiltoniano, μ é o potencial químico e \hat{N} é o número total de partículas.

Podemos reescrever a equação (3.4) como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} A \right) ,$$

está é a média estatística sobre o ensemble gran-canônico, onde

$$\Xi \equiv T_r \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right)$$

Como em geral trabalhamos com sistema de muitas partículas, sendo necessário introduzir uma função mais geral, chamada **Funções de Correlação Temporal** entre pares de operadores, definida como:

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle$$

ou

$$F_{BA}(t', t) = \langle B(t')A(t) \rangle$$

onde $A(t)$ e $B(t')$ são operadores dependentes do tempo na representação de Heisenberg (com $\hbar = 1$), assim temos:

$$\begin{aligned} A(t) &= e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} \\ B(t') &= e^{i\mathcal{H}t'} B(0) e^{-i\mathcal{H}t'} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Estas funções de correlação temporal podem ser obtidas através das Funções de Green, como verificaremos a seguir. Pela definição as Funções de Green (r,a,c) dependem de t e t' através da diferença $t - t'$, então escrevendo explicitamente a equação 3.1, temos:

$$G_r(t, t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_r = -i\theta(t - t') \langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle_T$$

Portanto, temos que calcular:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} A(t)B(t') \right) , \quad (3.6)$$

substituindo a equação (3.5) na equação (3.6) temos:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} B(0) e^{-i\mathcal{H}t'} \right)$$

Devido a invariância do traço sob permutação cíclica dos operadores, podemos fazer:

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-i\mathcal{H}t'} e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} B(0) \right) & (3.7) \\ &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-i\mathcal{H}t'} e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} B(0) \right) \\ &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}(t-t')} A(0) e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B(0) \right) \\ &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta H} A(t-t') B(0) \right) \end{aligned}$$

Portanto, podemos chamar

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \langle A(t-t')B(0) \rangle \\ &= F_{AB}(t-t') \end{aligned}$$

Comparando a equação (3.6) com a equação (3.7) temos:

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta\mathcal{H}} A(t) B(t') \right) \\ &= \frac{1}{\Xi} T_r \left(e^{-\beta H} A(t-t') B(0) \right) \\ &= \langle A(t-t')B(0) \rangle \end{aligned}$$

Desta forma, as funções de correlação podem ser definidas:

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle \text{ ou } F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t-t')$$

Notamos a invariância temporal das Funções de Green, ou seja:

$$G_{a,r,c}(t, t') = G_{a,r,c}(t-t')$$

3.1.2 Equação de Movimento para as funções de Green

Os operadores $A(t)$ e $B(t')$ presentes na definição das Funções de Green, satisfazem a equação de movimento de Heisenberg

$$\frac{d}{dt} A(t) = i\mathcal{H} e^{i\mathcal{H}t} A(t) e^{-i\mathcal{H}t} + e^{i\mathcal{H}t} A(t) (-i\mathcal{H}t) e^{-i\mathcal{H}t}$$

$$\frac{d}{dt}A(t) = i\mathcal{H}e^{i\mathcal{H}t}A(t)e^{-i\mathcal{H}t} - e^{i\mathcal{H}t}A(t)(i\mathcal{H}t)e^{-i\mathcal{H}t}$$

$$i\frac{d}{dt}A(t) = -\mathcal{H}A(t) + A(t)\mathcal{H}$$

$$i\frac{d}{dt}A(t) = [A(t), \mathcal{H}] \quad \text{ou ainda} \quad \frac{d}{dt}A(t) = -i[A(t), \mathcal{H}] \quad (3.8)$$

Vamos agora encontrar a equação de movimento para a Função de Green retardada (3.1), onde a derivada da equação em relação ao tempo é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{dG_r}{dt}(t, t') &= -i\frac{d\theta}{dt}(t-t') \langle [A(t); B(t')] \rangle_T \\ &+ (-i\theta(t-t') \left\langle \left[\frac{dA(t)}{dt}, B(t') \right] \right\rangle_T, \end{aligned} \quad (3.9)$$

substituindo as equações (3.4) e (3.8) na equação (3.9) teremos:

$$\begin{aligned} \frac{dG_r}{dt}(t, t') &= -i\delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T \\ &- i\theta(t-t') \langle [i[A(t), \mathcal{H}], B(t')] \rangle_T \end{aligned} \quad (3.10)$$

Observamos que do lado esquerdo da equação (3.10), no segundo membro, aparece uma nova Função de Green. Portanto, temos a equação de movimento para a Função de Green retardada:

$$i\frac{d}{dt}G_r(t, t') = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T + \ll [A(t), H]; B(t') \gg_r \quad (3.11)$$

A seguir encontraremos a equação de movimento para a Função de Green avançada, onde a derivada da equação (3.2) é:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}G_a(t, t') &= i\frac{d}{dt}\theta(t'-t) \langle [A(t); B(t')] \rangle_T \\ &+ i\theta(t'-t) \left\langle \left[\frac{d}{dt}A(t), B(t') \right] \right\rangle_T, \end{aligned} \quad (3.12)$$

do mesmo modo, substituindo as equações (3.4) e (3.8) na equação (3.12) para obter:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}G_a(t, t') &= -i\delta(t'-t) \langle [A(t), B(t')] \rangle_T \\ &+ i\theta(t'-t) \langle [-i[A(t), \mathcal{H}], B(t')] \rangle_T, \end{aligned}$$

reescrevendo a equação (3.13) obtém-se:

$$i \frac{d}{dt} G_a(t', t) = \delta(t' - t) \langle [A(t), B(t')] \rangle_T + i\theta(t' - t) \langle [[A(t), \mathcal{H}], B(t')] \rangle_T . \quad (3.13)$$

Novamente, observamos que do lado esquerdo da equação (3.13), no segundo membro, aparece uma nova Função de Green. Portanto, temos a equação de movimento para a Função de Green avançada:

$$i \frac{d}{dt} G_a(t, t') = \delta(t' - t) \langle [A(t), B(t')] \rangle_T + \ll [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \gg_a .$$

A seguir encontraremos a equação de movimento para a Função de Green causal, onde a derivada da equação (3.3) é:

$$i \frac{d}{dt} G_c(t, t') = \left\langle \frac{d}{dt} \theta(t - t') A(t) B(t') + \theta(t - t') \frac{d}{dt} A(t) B(t') \right\rangle + \left\langle \eta \frac{d}{dt} \theta(t' - t) B(t') A(t) + \eta \theta(t' - t) B(t') \frac{d}{dt} A(t) \right\rangle . \quad (3.14)$$

Adicionando as equações (3.4) e (3.8) em (3.14) como $\delta(t - t') = -\delta(t' - t)$ podemos escrever:

$$i \frac{d}{dt} G_c(t, t') = \langle \delta(t - t') A(t) B(t') - i\theta(t - t') [A(t), H] B(t') \rangle - \langle \eta \delta(t' - t) B(t') A(t) - i\eta \theta(t' - t) B(t') [A(t), H] \rangle ,$$

colocando em evidência $\delta(t - t')$, temos:

$$i \frac{d}{dt} G_c(t, t') = \langle \delta(t - t') (A(t) B(t') + \eta B(t') A(t)) \rangle - \langle i\theta(t - t') [A(t), \mathcal{H}] B(t') - \eta \delta(t' - t) B(t') [A(t), H] \rangle . \quad (3.15)$$

Podemos observar que do lado esquerdo da equação (3.15), no segundo membro, temos uma nova Função de Green. Desta forma, temos a equação de movimento para a Função de Green causal:

$$i \frac{d}{dt} G_c(t, t') = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T + \ll [A(t), H]; B(t') \gg_c$$

Mostramos finalmente que as três funções de Green satisfazem a mesma equação de movimento, podendo ser escrita de uma forma geral:

$$i \frac{d}{dt} G_j(t, t') = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T + \ll [A(t), H]; B(t') \gg_j \quad (3.16)$$

Podemos notar que a equação de movimento para as Funções de Green, apresenta uma nova Função de Green de ordem superior, desta forma, para desenvolver estas equações se faz necessário que sejam desacopladas reduzindo o sistema a um número finito de equações.

Transformada de Fourier

Desde que as Funções de Green dependam da diferença nos tempos($t - t'$) podemos introduzir as componentes de Fourier das mesmas através de:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(t-t') e^{iE(t-t')} d(t-t')$$

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad (3.17)$$

a função delta de Dirac é expressa por:

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} dE \quad (3.18)$$

Obsevaremos agora a transformada de Fourier temporal da equação de movimento da Função de Green retardada, substituindo a equação (3.17) e a equação (3.18) na equação (3.16) temos:

$$i \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} dE \langle [A(t), B(t')] \rangle$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \ll [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \gg_E e^{-iE(t-t')} dE ,$$

realizando as derivadas

$$\int_{-\infty}^{\infty} E G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(t')] \rangle e^{-iE(t-t')} dE$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \ll [A(t), H]; B(t') \gg_E e^{-iE(t-t')} dE \quad (3.19)$$

Observando a igualdade na equação (3.19) podemos concluir que a equação de movimento para a transformada de Fourier da Função de Green é:

$$\ll A(t), B(t') \gg_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(t')] \rangle + \ll [A(t), H]; B(t') \gg_E \quad (3.20)$$

Sendo

$$G_r(E) = \ll A(t), B(t') \gg_E$$

3.1.3 Representação Espectral

Para as Funções de Correlação

Considere o espectro de uma Hamiltoniana arbitrário dado por:

$$H | \nu \rangle = E_\nu | \nu \rangle$$

Assim:

$$\begin{aligned} F_{AB}(t' - t) = \langle B(t'), A(t) \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left(e^{\beta \mathcal{H}} B(t') A(t) \right) \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{\beta \mathcal{H}} B(t') A(t) | \nu \rangle \end{aligned} \quad (3.21)$$

Substituindo a equação (3.5) na equação (3.21), temos:

$$\begin{aligned} F_{AB}(t' - t) &= \langle B(t'), A(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{i\mathcal{H}t'} B(0) e^{-i\mathcal{H}t'} e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} | \nu \rangle e^{-\beta E_{\nu}} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | e^{i\mathcal{H}t'} B(0) e^{-i\mathcal{H}t'} | \mu \rangle \langle \mu | e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} | \nu \rangle e^{\beta E_{\nu}} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | B(0) | \mu \rangle \langle \mu | A(0) | \nu \rangle e^{-\beta E_{\nu}} e^{iE_{\nu}t'} e^{-iE_{\mu}t'} e^{iE_{\mu}t} e^{-iE_{\nu}t} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | B(0) | \mu \rangle \langle \mu | A(0) | \nu \rangle e^{\beta E_{\nu}} e^{iE_{\nu}(t'-t)} e^{-iE_{\mu}(t'-t)} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | B(0) | \mu \rangle \langle \mu | A(0) | \nu \rangle e^{-\beta E_{\nu}} e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu})(t-t')} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | B(0) | \mu \rangle \langle \mu | A(0) | \nu \rangle e^{-\beta E_{\nu}} e^{i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-t')} . \end{aligned}$$

Analogamente:

$$F_{AB}(t - t') = \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | A(0) | \mu \rangle \langle \mu | B(0) | \nu \rangle e^{i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-t')} e^{-\beta E_{\nu}}$$

Introduzimos a transformada de Fourier $J_{BA}(\omega)$ tal que:

$$F_{BA}(t' - t) = \langle B(t') A(t) \rangle_T = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega) e^{i\omega(t'-t)} d\omega \quad (3.22)$$

A função $J_{BA}(\omega)$ é chamada intensidade espectral e esta definida nos pontos ω , sendo que $E_{\mu} - E_{\nu} = \omega$, ou seja, nas excitações do sistema.

$$J_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(t - t') e^{i\omega(t'-t)} d(t - t')$$

Substituímos a equação (3.22) na equação (3.22), obtemos as representações espectrais das funções de correlação:

$$J_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} B_{\nu\mu} A_{\mu\nu} e^{-\beta E_{\nu}} e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu}-\omega)(t-t')} d(t - t')$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} B_{\nu\mu} A_{\mu\nu} e^{-\beta E_\nu} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i[(E_\mu - E_\nu) - \omega](t-t')} d(t-t') \\
&= \frac{1}{\Xi} \sum_{\nu\mu} B_{\nu\mu} A_{\mu\nu} e^{-\beta E_\nu} \delta(E_\nu - E_\mu - \omega)
\end{aligned}$$

onde $\langle \mu | A(0) | \nu \rangle = A_{\mu\nu}$ e $\langle \nu | B(0) | \mu \rangle = B_{\nu\mu}$.

Sendo que, por definição, temos a função delta de Dirac:

$$\delta(E_\nu - E_\mu - \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i[(E_\nu - E_\mu) - \omega](t-t')} d(t-t')$$

Analogamente, tem-se:

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega$$

Para as Funções de Green

Introduzindo a transformada de Fourier para as Funções de Green retardada (G_r), temos:

$$G_r(E) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{iE(t-t')} \theta(t-t') (\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle_T) \quad (3.23)$$

Substituindo as representações espectrais equações: (3.22) e (3.23) e fazendo $t'=0$, temos:

$$G_r(E) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t) e^{iE(t)} \theta(t) (J_{BA}(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t)} - \eta J_{BA}(\omega) e^{-i\omega(t)}) d\omega \quad (3.24)$$

reescrevendo a equação(3.24), obtemos:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{i(E-\omega)t} d(t)$$

A função de Heaviside pode ser escrita da seguinte forma:

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x + i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (3.25)$$

Substituindo a equação (3.25) na (3.25) temos:

$$G_r(E) = \frac{i}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega-x)t} d(t) \quad (3.26)$$

Assim, função delta pode ser escrita da seguinte forma:

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

a qual substituindo na equação (3.26) obtemos:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \delta(E - \omega - x) \quad (3.27)$$

Usando a propriedade da função delta de Dirac, desta forma podemos reescrever a equação (3.27):

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon} \quad (3.28)$$

Analogamente para a função de Green avançada, teremos:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon} \quad (3.29)$$

Notamos a similaridade das transformadas de Fourier nas equações (3.28) e (3.29), desta forma, podemos considerar E como uma variável complexa sendo que analisando os resultados obtidos reduzimos as Funções de Green a duas formas

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega} \begin{cases} G_r(E) & \text{se } \text{Im}E > 0 \\ G_a(E) & \text{se } \text{Im}E < 0 \end{cases}$$

As Funções $G_r(E)$ e $G_a(E)$ são analiticamente estendida ao semiplano de variável complexa $\text{Im}(E) > 0$ e $\text{Im}(E) < 0$, respectivamente, tendo como corte, ou singularidade, no eixo real $\text{Im}(E) = 0$, podemos assim considerar G_r e G_a como componentes de uma mesma função de variável E .

Assim,

$$2\pi i \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) \quad (3.30)$$

Usando a representação da função delta de Dirac, equação (3.30), e levando em conta o limite da diferença das funções de Green podemos obter a descontinuidade de $G(E)$ no eixo real, a qual podemos relacionar com a densidade espectral $J(\omega)$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) \times \\ &\times J_{BA}(\omega) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} - \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} \right) d\omega, \end{aligned} \quad (3.31)$$

substituindo a equação (3.30) na equação (3.31) obtemos:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) = i \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J_{BA}(\omega) \delta(E - \omega) d\omega$$

Usando a propriedade da função delta de Dirac: $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$ na equação (3.32) e colocando J_{BA} em evidência, obtemos:

$$J_{BA}(E) = \frac{i}{(e^{\beta E} - \eta)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \{G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon)\} , \quad (3.32)$$

Substituindo a equação (3.32) na equação 3.22, temos:

$$F_{BA}(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ie^{-iw(t-t')}}{(e^{\beta E} - \eta)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \{G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon)\}$$

Portanto, com $J(E)$ escrita em função de $G(E)$, nos podemos calcular as médias estatísticas dos operadores de nosso interesse.

3.2 Aplicação em Sistema Ferromagnético Simples

O estudo do ferromagnetismo de Heisenberg pode ser feito através da técnica das Funções de Green. Apresentando como vantagem que com a aplicação desta técnica podemos reencontrar os resultados obtidos através de diferentes aproximações, porém, com um único tratamento. Podemos obter uma relação geral para magnetização do ferromagnético válida para todo o intervalo de temperatura. Abrangendo os resultados da teoria de Ondas de Spin (região de baixas temperaturas) e teoria de Campo Molecular ($0 < T \leq T_c$)

Em um cristal ferromagnético real os spins estão sujeitos a varias interações com outros spins e com outras excitações na rede, tais como os fônons. Considerando um sistema ferromagnético simples, com N spins, \vec{S}_i na rede nos sítios i , interagindo com outro através do Hamiltoniano de Heisenberg, \mathcal{H} , e com um campo magnético \vec{H} . Para simplificar, consideramos o caso de $S = \frac{1}{2}$, a constante de interação de curto alcance (exchange), $J_{ij} (> 0)$ e assumindo uma dependencia da diferença $(i - j)$ e também que o campo magnético externo é ao longo do eixo z do sistema cartesiano, sendo este a direção de quantização dos spins. Portanto, o Hamiltoniano do sistema será:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - b \sum_i S_i^z , \quad (3.33)$$

onde $b = g\mu_B H$, sendo μ o magneton de Bohr e g o fator de Landé, sabe-se que:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \quad (3.34)$$

e também que:

$$\begin{aligned} S_i^+ &= S_i^x + iS_i^y \\ S_i^- &= S_i^x - iS_i^y \end{aligned}$$

onde somando ou subtraindo teremos:

$$\begin{aligned} S_i^x &= \frac{1}{2} (S_i^+ + S_i^-) \\ S_j^x &= \frac{1}{2} (S_j^+ + S_j^-) \\ S_i^y &= \frac{-i}{2} (S_i^+ - S_i^-) \\ S_j^y &= \frac{-i}{2} (S_j^+ - S_j^-) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Substituindo na Hamiltoniana, equação (3.33), a equação (3.34), temos:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - b \sum_i S_i^z, \quad (3.36)$$

agora, substituindo a equação (3.35) na equação (3.36), temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{4} (S_i^+ + S_i^-) (S_j^+ + S_j^-) \right] \\ &\quad - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{4} (S_i^+ - S_i^-) (S_j^+ - S_j^-) \right] + S_i^z S_j^z \\ &\quad - b \sum_i S_i^z. \end{aligned}$$

aplicando a propriedade distributiva, temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{4} (S_i^+ S_j^+ + S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ + S_i^- S_j^-) \right] \\ &\quad - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{4} (S_i^+ S_j^+ - S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+ + S_i^- S_j^-) \right] \\ &\quad + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z - b \sum_i S_i^z, \end{aligned}$$

simplificando os termos semelhantes

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{4} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ + S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \\ &\quad - b \sum_i S_i^z, \end{aligned}$$

finalmente, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] \\ & - b \sum_i S_i^z \end{aligned} \quad (3.37)$$

A equação de movimento para a transformada de Fourier da Função de Green é:

$$E \ll S_m^+; S_n^- \gg_E = \frac{1}{2\pi} \langle [S_m^+, S_n^-] \rangle + \ll [S_m^+, \mathcal{H}]; S_n^- \gg_E \quad (3.38)$$

Substituindo a equação 3.37 na equação 3.38, temos:

$$\begin{aligned} E \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{2\pi} \langle [S_m^+, S_n^-] \rangle \\ &+ \ll - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left\{ \frac{1}{2} [S_m^+, S_i^+ S_j^-] + \frac{1}{2} [S_m^+, S_i^- S_j^+] + [S_m^+, S_i^z S_j^z] \right\} \\ &- b \sum_i [S_m^+, S_i^z]; S_n^- \gg_E \end{aligned} \quad (3.39)$$

Resolvendo os comutadores, sabendo-se que:

$$\begin{aligned} [S_i^\pm, S_j^z] &= \mp S_i^\pm \delta_{ij} \\ [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^z \delta_{ij} \\ [S_m^+, S_n^-] &= 2S_m^z \delta_{mn} \\ [S_m^+, S_i^+ S_j^-] &= S_i^+ [S_m^+, S_j^-] + [S_m^+, S_i^+] S_j^- = S_i^+ (2S_m^z \delta_{mj}) \\ [S_m^+, S_i^- S_j^+] &= S_i^- [S_m^+, S_j^+] + [S_m^+, S_i^-] S_j^+ = (2S_m^z \delta_{mi}) S_j^+ \\ [S_m^+, S_i^z S_j^z] &= S_i^z [S_m^+, S_j^z] + [S_m^+, S_i^z] S_j^z = S_i^z (-S_m^+ \delta_{mj}) + (-S_m^+ \delta_{mi}) S_j^z \\ [S_m^+, S_i^z] &= -S_m^+ \delta_{mi} \end{aligned}$$

Substituindo na equação (3.39), temos:

$$\begin{aligned} E \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{2\pi} \langle 2S_m^z \delta_{mn} \rangle \\ &+ \ll - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^+ (S_m^z \delta_{mj}); S_n^- \gg_E \\ &+ \ll \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_m^z \delta_{mi}) S_j^+; S_n^- \gg_E \\ &+ \ll \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z (-S_m^+ \delta_{mj}); S_n^- \gg_E \\ &+ \ll \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (-S_m^+ \delta_{mi}) S_j^z; S_n^- \gg_E \end{aligned}$$

$$- \ll b \sum_i -S_m^+ \delta_{mi}; S_n^- \gg_E \quad (3.40)$$

Somando em (j) e depois em (i), obtemos:

$$\begin{aligned} E \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \delta_{mn} \rangle \\ &- \sum_{i \neq m} J_{im} \ll S_i^+ S_m^z; S_n^- \gg_E \\ &- \sum_{j \neq m} J_{mj} \ll S_m^z S_j^+; S_n^- \gg_E \\ &- \sum_{i \neq m} J_{im} \ll S_i^z S_m^+; S_n^- \gg_E \\ &- \sum_{j \neq m} J_{mj} \ll S_m^+ S_j^z; S_n^- \gg_E \\ &+ b \sum_i \ll S_m^+ \delta_{mi}; S_n^- \gg_E , \end{aligned}$$

onde finalmente obtemos um sistema infinito de equações acopladas:

$$\begin{aligned} (E - b) \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \delta_{mn} \rangle \\ &- 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \left\{ \ll S_j^+ S_m^z; S_n^- \gg_E + \ll S_j^z S_m^+; S_n^- \gg_E \right\} \end{aligned}$$

Nesta equação, a função de Green, no segundo termo do membro direito, contém um número maior de operadores do que a função de Green inicial. Se resolvermos esta função de Green resultaria em uma nova equação com um número de operadores ainda maior, novas repetições do processo resultaria em uma cadeia infinita de equações acopladas. Portanto, é necessário truncar a sucessão de equações aplicando uma aproximação que faz com que os produtos de operadores sejam fatorados chamada de "Randon Phase Approximation" ou RPA[34], ou seja:

$$\begin{aligned} \ll S_j^+ S_m^z; S_n^- \gg_E &\simeq \langle S_m^z \rangle \ll S_j^+; S_n^- \gg_E \\ \ll S_j^z S_m^+; S_n^- \gg_E &\simeq \langle S_j^z \rangle \ll S_m^+; S_n^- \gg_E \end{aligned}$$

Portanto::

$$\begin{aligned} (E - b) \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle \delta_{mn} \\ &- 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_m^z \rangle \ll S_j^+; S_n^- \gg_E \\ &+ 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_j^z \rangle \ll S_m^+; S_n^- \gg_E , \end{aligned}$$

reescrevendo a equação anterior, temos

$$\begin{aligned} \left(E - b - 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_j^z \rangle \right) \ll S_m^+; S_n^- \gg_E &= \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle \delta_{mn} \\ &- 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_m^z \rangle \ll S_j^+; S_n^- \gg_E, \end{aligned}$$

sendo

$$\ll S_m^+; S_n^- \gg = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(m-n)} G_k(E)$$

e sua transformada inversa:

$$G_k(E) = \frac{1}{N} \sum_{m-n} e^{-ik(m-n)} \ll S_{m+}, S_{n-} \gg_E$$

a função delta de Kronecher:

$$\delta_{mn} = \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(m-n)}$$

$$\begin{aligned} \left(E - b - 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_j^z \rangle \right) \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(m-n)} G_k(E) &= \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(m-n)} \\ &- 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_m^z \rangle \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(j-n)} G_k(E), \end{aligned}$$

finalmente

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(m-n)} &= \left(E - b - 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_j^z \rangle \right) \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(m-n)} G_k(E) \\ &+ 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_m^z \rangle \frac{1}{n} \sum_k e^{ik(j-n)} G_k(E) \end{aligned}$$

multiplicando por $e^{-ik(m-n)}$ temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle &= \left(E - b - 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_j^z \rangle \right) G_k(E) \\ &+ 2 \sum_{j \neq m} J_{jm} \langle S_m^z \rangle e^{ik(j-m)} G_k(E) \end{aligned} \quad (3.41)$$

sabe-se que: $J_{(k)} = \sum_{j \neq m} J_{jm} e^{ik(j-m)}$ e $J_{(0)} = \sum_{j \neq m} J_{jm}$

Substituindo na equação(3.41), temos

$$\frac{1}{\pi} \langle S_m^z \rangle = \left(E - b - 2 \left(J_{(0)} - J_{(k)} \right) \langle S_j^z \rangle \right) G_k(E) \quad (3.42)$$

onde

$$E_{(k)} = g\mu_B H + 2 \left(J_{(0)} - J_{(k)} \right) \langle S_j^z \rangle$$

Desta forma obtemos a função de Green

$$G_k(E) = \frac{\langle S^z \rangle}{\pi} \frac{1}{E - E_K} \quad (3.43)$$

Agora para obtermos a magnetização, necessitamos conhecer

$$\ll S_m^+; S_n^- \gg_{E=0} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(m-n)} G_k(E) \quad (3.44)$$

substituindo a equação (3.43) na equação (3.44) temos:

$$\ll S_m^+; S_n^- \gg_{E=0} = \frac{1}{N\pi} \langle S^z \rangle \sum_k \frac{e^{ik(m-n)}}{E - E_K}, \quad (3.45)$$

sabendo-se que a densidade espectral é:

$$J(E) = \frac{i}{e^{\beta E} - 1} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \ll S_m^+; S_n^- \gg_{E=w+i\xi} - \ll S_m^+; S_n^- \gg_{E=w-i\xi} \right\} \quad (3.46)$$

substituindo a equação (3.45) e equação (3.46)

$$J(E) = \frac{i}{e^{\beta E} - 1} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{1}{N\pi} \langle S^z \rangle \sum_k \frac{e^{ik(m-n)}}{E + i\xi - E_K} - \frac{1}{N\pi} \langle S_m^z \rangle \sum_k \frac{e^{ik(m-n)}}{E - i\xi - E_K} \right\}$$

fazendo uso da função delta de Dirac:

$$2i\pi\delta(x) = \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{x - i\xi} - \frac{1}{x + i\xi} \right)$$

temos:

$$J(E) = \frac{2}{e^{\beta E} - 1} \frac{\langle S^z \rangle}{N} \sum_k e^{ik(m-n)} \delta(E - E_k), \quad (3.47)$$

substituindo a equação (3.47) na equação(3.22) deem:

$$\langle S_m^+ S_n^- \rangle = \frac{2}{N} \langle S^z \rangle \sum_k e^{ik(m-n)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-iE(t-t')}}{e^{\beta E} - 1} dE \delta(E - E_k),$$

aplicando a propriedade da função delta de Dirac temos:

$$\langle S_m^+ S_n^- \rangle = \frac{2}{N} \langle S^z \rangle \sum_k e^{ik(m-n)} \frac{e^{-iE_k(t-t')}}{e^{\beta E_k} - 1},$$

considerando $t=t'$ temos:

$$\langle S_m^+ S_n^- \rangle = \frac{2}{N} \langle S^z \rangle \sum_k \frac{e^{ik(m-n)}}{e^{\beta E_k} - 1}$$

para caso especial de $S = \frac{1}{2}$, temos

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

então fazendo $m = n$, e

$$\Phi_{(T)} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta E_k} - 1}$$

podemos escrever que:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - 2 \langle S^z \rangle \Phi_{(T)}$$

$$\langle S^z \rangle + 2 \langle S^z \rangle \Phi_{(T)} = \frac{1}{2}$$

assim a magnetização é dada por:

$$\langle S^z \rangle = \frac{\frac{1}{2}}{1 + 2\Phi_{(T)}}$$

Quando $\Phi(T) = 0$, temos o estado fundamental: $\langle S^z \rangle = \frac{1}{2}$

3.2.1 Analisando no limite $T \ll T_c$

Podemos expandir $\Phi(T)$. Para $T \ll 1$, $\Phi(T)$ será muito pequeno sabendo-se que a expansão:

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots$$

temos:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1 + 2\Phi(T)} \right)$$

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left\{ 1 - 2\Phi(T) + [2\Phi(T)]^2 - [2\Phi(T)]^3 + \dots \right\}$$

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left[1 - 2\Phi(T) + 4\Phi^2(T) - 8\Phi^3(T) + \dots \right],$$

simplificando

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \Phi(T) + 2\Phi^2(T) - 4\Phi^3(T) + \dots$$

Reescrevendo $\Phi(T)$ considerando a primeira zona de Brillouin:

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1},$$

sendo $d^3k = k^2 dk \sin(\theta) d\theta d\phi$ temos

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{8\pi^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} k^2 dk \sin(\theta) d\theta d\phi \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1}$$

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{8\pi^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} k^2 dk \sin(\theta) d\theta \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \left(\phi \Big|_0^{2\pi} \right)$$

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{4\pi^2} \int_0^{\infty} k^2 dk \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} (-\cos \theta \Big|_0^{\pi})$$

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{4\pi^2} \int_0^{\infty} k^2 dk \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} (1 + 1)$$

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{\infty} k^2 dk \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1}$$

Expandindo o denominador em série de potências, onde

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots$$

$$\frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} = \frac{e^{-\beta E(k)}}{\underbrace{1 - e^{-\beta E(k)}}_x} = e^{-\beta E(k)} \left[1 + e^{-\beta E(k)} + e^{-2\beta E(k)} + \dots \right]$$

$$\frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} = e^{-\beta E(k)} + e^{-2\beta E(k)} + e^{-3\beta E(k)} + \dots = \sum_{l=1}^{\infty} e^{-l\beta E(k)}$$

Reescrevemos agora a equação:

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk k^2 e^{-l\beta E(k)}$$

Façamos $K^2 = \frac{q^2}{a^2}$ que diferenciando: $dk = \frac{dq}{a}$, a equação anterior fica:

$$\Phi(T) = \frac{a^3}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{dq}{a} \frac{q^2}{a^2} e^{-l\beta E(K)}$$

$$\Phi(T) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-l\beta E(k)}$$

Expandindo $E(k)$ para valores pequenos de K

$$J_{(k)} = \sum_{j \neq m} J_{mj} e^{-i\vec{k}(\vec{m}-\vec{j})}$$

Expandindo pelo número de primeiros vizinhos, obtemos:

$$J_{(k)} = 2J [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

Para $k = 0$, $J(0) = 6J$.

A expansão de $J(k)$ para $ka \ll 1$ é dada pela expansão do cos:

$$J(k) = 2J \left[1 - \frac{k_x^2 a^2}{2!} + \frac{k_x^4 a^4}{4!} - \frac{k_x^6 a^6}{6!} + \dots \right]$$

$$\left[1 - \frac{k_y^2 a^2}{2!} + \frac{k_y^4 a^4}{4!} - \frac{k_y^6 a^6}{6!} + \dots \right]$$

$$\left[1 - \frac{k_z^2 a^2}{2!} + \frac{k_z^4 a^4}{4!} - \frac{k_z^6 a^6}{6!} + \dots \right]$$

$$J(k) = 2J \left[3 - \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4!} (q_x^4 + q_y^4 + q_z^4) - \frac{1}{6!} (q_y^6 + q_z^6 + q_x^6) \right]$$

$$J(k) = J \left[6 - q^2 + \frac{1}{12} (q_x^4 + q_y^4 + q_z^4) - \frac{1}{360} (q_y^6 + q_z^6 + q_x^6) \right]$$

onde $q^2 = (K_x a)^2 + (K_y a)^2 + (K_z a)^2$

reescrevendo:

$$J(k) = J \left[6 - q^2 + \frac{1}{12} Q_1^4 - \frac{1}{360} Q_2^6 + \dots \right]$$

Consideraremos um campo magnético externo nulo:

$$E_{(\vec{k})} = h + 2(J_{(0)} - J_{(k)}) \frac{1}{2}$$

$$E_{(\vec{k})} = (6J - 6J + Jq^2 - \frac{J}{12} Q_1^4 + \frac{J}{360} Q_2^6 + \dots)$$

$$E_{(\vec{k})} = Jq^2 - \frac{J}{12}Q_1^4 + \frac{J}{360}Q_2^6 + \dots$$

Podemos reescrever a equação

$$\Phi(T) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-l\beta(Jq^2 - \frac{J}{12}Q_1^4 + \frac{J}{360}Q_2^6 + \dots)}$$

que pode ser escrita como:

$$\Phi(T) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-la\beta q^2} e^{lb\beta Q^4} e^{-lc\beta Q^6}$$

$$\Phi(T) = aT^{\frac{3}{2}} + bT^{\frac{5}{2}} + cT^{\frac{7}{2}}$$

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - aT^{\frac{3}{2}} - bT^{\frac{5}{2}} - cT^{\frac{7}{2}} + a^2T^3 - 4abT^4$$

3.2.2 Analisando no Limite $T \rightarrow T_c$

A temperatura crítica (T_c) indica o limite em que a magnetização vai a zero ($\langle S^z \rangle \rightarrow 0$). $\Phi(T)$ é muito grande, fazemos uma expansão em $\langle S^z \rangle$ determinando uma expressão para T_c .

Assim, reescrevemos a equação na forma de integral:

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} d^3k \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \quad (3.48)$$

lembrando que:

$$E_{(\vec{k})} = 2 \langle S^z \rangle (J_{(0)} - J_{(k)})$$

Substituindo $E(k)$ em , dará:

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} d^3k \frac{1}{e^{\beta 2 \langle S^z \rangle (J_{(0)} - J_{(k)})} - 1}$$

para a expansão chamaremos $v = \beta 2 \langle S^z \rangle (J_{(0)} - J_{(k)})$

$$\frac{1}{e^v - 1} = \frac{1}{1 + v + \frac{v^2}{2!} + \frac{v^3}{3!} \dots - 1} = \frac{1}{v \left(1 + \frac{v}{2} + \dots\right)} =$$

$$\frac{1}{v} \left(1 - \frac{v}{2} + \dots\right) = \frac{1}{v} - \frac{1}{2} + \dots$$

reescrevermos a equação:

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{v} - \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{2} + \dots$$

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{2\beta \langle S^z \rangle [J(0) - J(k)]} + \Theta(1)$$

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{16\pi^3\beta \langle S^z \rangle} \int_{ZB} \frac{d^3k}{[J(0) - J(k)]} + \Theta(1)$$

$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2+4\Phi(T)}$, mas próximo de T_c nota-se que $\Phi(T) \gg 1$ então podemos reescrevê-la:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{4\Phi(T)}$$

$$1 = 4 \langle S^z \rangle \Phi(T)$$

em seguida, substituímos

$$1 = 4 \langle S^z \rangle \frac{V_0}{16\pi^3\beta \langle S^z \rangle} \int_{ZB} \frac{d^3k}{[J(0) - J(k)]} + \Theta(1)$$

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{J(0) - J(k)}$$

Reescrevendo a equação temos:

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2V_0}{8\pi^3 J(0)} \int_{ZB} \frac{d^3k}{[J(0) - J(k)]/J(0)}$$

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2}{J(0)} \underbrace{\frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{1 - \frac{J(k)}{J(0)}}}_{F(-1)}$$

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2}{6J} F(-1)$$

Concluimos, obtendo a temperatura crítica em função de uma soma que é conhecida [35] na literatura.

$$\frac{K_B T_c}{J} = \frac{6}{2F(-1)} = 1,978 \quad (3.49)$$

Sendo $F(-1) = 1,51638$

Vamos aplicar estes procedimentos para o problema da competição existente entre a interação exchange e a interação dipolar em filmes magnéticos finos, quanto a estabilização da ordem magnética, analisaremos desta forma a frustação do sistema.

Capítulo 4

Interações Competitivas em Sistemas Magnéticos Bidimensionais

4.1 Introdução

Muito se tem estudado sobre o comportamento de sistemas magnéticos de baixas dimensionalidades. Filmes magnéticos ultrafinos, os quais são caracterizados por uma resposta altamente não linear para pequenas perturbações, se tornaram, nas últimas décadas, um imenso tema para pesquisas teóricas e experimentais. Estes interesses surgiram não somente pelos aspectos acadêmicos, porém principalmente devidos às amplas possibilidades de aplicações tecnológicas.

Uma questão interessante, do ponto de vista acadêmico, se refere a competição da anisotropia magnética com a interação de troca. Por exemplo, apesar das anisotropias magnéticas em filmes ferromagnéticos ultrafinos (metais de transições) serem muito menores que a interação de troca isotrópica, observações mostram que elas afetam de modo significativo as propriedades magnéticas, tanto na fase ferromagnética como na fase paramagnética. Essa extensão da influência das anisotropias magnéticas além da temperatura de Curie é uma característica que distingue os sistemas com baixa dimensionalidade (sistemas bidimensionais) dos sistemas volumosos.

Em sistemas ferromagnéticos quase-bidimensionais do tipo $(\text{CN}_3\text{NH}_3)_2\text{-CuCl}_4$, a anisotropia da suscetibilidade magnética foi encontrada a ser preservada até

$T/T_c \approx 1.2$ [36]. Em filmes magnéticos ultrafinos evidências experimentais, para existência de uma susceptibilidade magnética na fase paramagnética, foi encontrado por Back e colaboradores[37].

Várias técnicas experimentais têm sido usadas para estudar as excitações magnéticas em filmes ultrafinos. Em um estudo recente, Tacchi e colaboradores[38] utilizaram a "Brillouin Light Scattering" para estudar excitações magnéticas em filmes magnéticos [NiFe/Cu(110) e Fe/Cu(110)] construídos com poucas camadas atômicas, caracterizado por uma forte anisotropia uniaxial no plano. Eles observaram que as frequências dos mágnons, quando aplicado um campo magnético ao longo da direção perpendicular ao plano em uma temperatura bem abaixo da temperatura de Curie, apresentam uma dependência com o campo de forma não linear. Por outro lado, quando o campo magnético é aplicado ao longo da direção do eixo fácil, a frequência é observada a aumentar quase linearmente com o aumento do campo magnético. Eles também verificaram que as anisotropias das excitações magnéticas persistem mesmo na fase paramagnética, isto é, a frequências dos mágnons aumenta quase linearmente com o aumento do campo magnético, porém com diferentes inclinações dependendo da direção do campo aplicado. Estes resultados foram confirmados por cálculos teóricos, utilizando uma modificação (desenvolvida por M.G. Pini e colaboradores[39]) do método das funções de Green.

A competição entre interações magnéticas de curto alcance e as de longo alcance tem tido um crescente interesse em seu entendimento[19, 20]. A interação dipolar dá origem a uma excitação de onda de spins em sistemas magnéticos, da mesma forma como faz a interação de troca. Quando nenhuma anisotropia está presente as ondas de spins dipolares podem levar a importantes efeitos quânticos. Ferromagnetos com interação puramente dipolar foi estudado na aproximação de onda de spin por Cohen e Keffer[6], e eles verificaram que nas redes bcc e fcc aparecem apreciáveis correções do ponto zero para a energia do estado fundamental.

Recentemente, Sousa e Branco[20] estudaram o modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ em duas dimensões com interação de troca antiferromagnética ($J < 0$) entre os primeiros vizinhos, e considerou também parte da interação dipolar de longo alcance, somente o termo dipolar ($J_{dd} \approx \frac{S_i \cdot S_j}{r^3}$), acoplando todos os possíveis pares de spins na rede quadrada. Utilizando o método das Funções de Green-Zubarev e a aproximação das fases aleatórias, eles mostraram a dependência da temperatura crítica ferromagnética como uma função da frustração ($\delta = \frac{J_{ex}}{J_{dd}}$). A temperatura crítica entre as fases ferromagnéticas e paramagnéticas decresce com o parâmetro da frustração, como era esperado, porém vai a zero em um valor finito

deste parâmetro.

Nesta dissertação, vamos estudar a competição entre a interação de curto alcance ($J < 0$, anti-ferromagnética) e a interação dipolar ferromagnética de longo alcance na desestabilização da ordem de longo alcance de um filme ferromagnético. Tal como Sousa e Branco[20], o nosso modelo também consistirá do modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ em duas dimensões com interação de troca antiferromagnética ($J < 0$) entre os primeiros vizinhos e da interação dipolar acoplado todos os possíveis pares de spins na rede quadrada. Devemos ressaltar que, diferentemente de Sousa e Branco, estamos utilizando a interação dipolar com todos os seus termos.

4.2 Modelo e Método das Funções de Green-Zubarev

Nesta seção, vamos considerar o problema da competição entre as interação de troca antiferromagnética de curto alcance e a interação dipolar ferromagnética de longo alcance. O sistema considerado é constituído por N spins distribuídos em duas monocamadas magnéticas superpostas. Inicialmente, em baixas temperaturas, os spins em cada ponto da rede estão acoplados ferromagneticamente através da interação dipolar, constituindo assim um estado ferromagnético estável, como ilustra a figura 4.2.

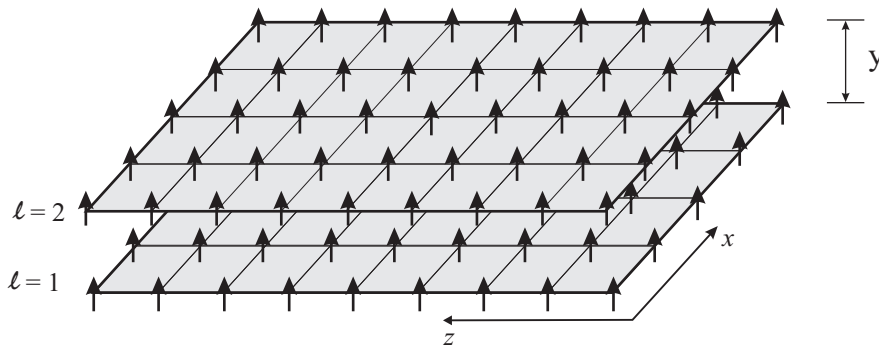


Figura 4.1: A ilustração representa N spins distribuídos em duas monocamadas magnéticas superpostas ($l = 1$ e $l = 2$), onde os spins em cada ponto da rede estão acoplados ferromagneticamente através da interação dipolar J_{dd} , em baixas temperaturas

Em seguida, a interação de troca antiferromagnética é ligada estabelecendo dessa forma uma competição entre estas interações. Por um lado, a interação dipolar tende a favorecer o estado ferromagnético, e por outro lado a interação de troca antiferromagnética tende destruí-lo, como podemos observar na ilustração da figura 4.2. A medida que a interação de troca cresce, a ordem ferromagnética decresce até atingir uma temperatura na qual ocorre a transição ferromagnética-paramagnética, onde esta temperatura deverá depender do parâmetro de frustração ($\delta = J_{ex}/J_{dd}$).

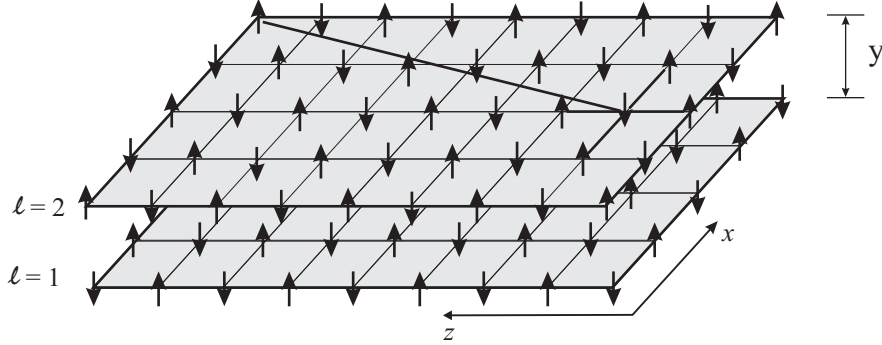


Figura 4.2: A ilustração representa a competição entre as interações de longo alcance J_{dd} e a interação de curto alcance J_{ex} , nas duas monocamadas magnéticas superpostas ($l = 1$ e $l = 2$).

Portanto, o modelo que descreve o nosso sistema é o modelo quântico de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ acrescido do termo com a interação dipolar, a qual é escrito por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{dd} \quad (4.1)$$

O primeiro termo refere-se a interação de curto alcance (interação de troca) e o segundo termo representa a interação de longo alcance (interação dipolar). O termo da interação de troca é dada por:

$$\mathcal{H}_{ex} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (4.2)$$

onde o operador de spin \mathbf{S}_n é o momento angular efetivo do íon localizado em sítios de duas redes quadrada paralela no plano (z,x) a uma distância em unidades de \hbar . A soma se estende a todos os pares de primeiros vizinhos localizados nos sítios i e j da rede (J_{ij} é o parâmetro de troca). Assumimos que a interação de troca é antiferromagnética ($J < 0$) entre os primeiros vizinhos, em ambos os planos.

O termo da Hamiltoniana representa a interação dipolar a qual é escrita:

$$\mathcal{H}_{dd} = \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 \sum_{i \neq j} \sum_j \frac{1}{R_{ij}^3} \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{3}{R_{ij}^2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{R}_{ij}) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{R}_{ij}) \right\}, \quad (4.3)$$

onde a soma é sobre todos os pares possíveis da rede \mathbf{R}_{ij} é o vetor que conecta o sítio i ao sítio j , o qual é escrito como $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. Introduzindo a relação

$$S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y, \quad (4.4)$$

e lembrando das relações de comutação entre os operadores de spin

$$[\mathbf{S}_i^-, \mathbf{S}_j^+] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad e \quad [\mathbf{S}_i^\pm, S_j^z] = \mp S_i^\pm \delta_{ij}. \quad (4.5)$$

Utilizando essas relações o termo de troca é reescrito na forma

$$\mathcal{H}_{ex} = \sum_{i \neq j} \sum_j J_{ij} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right]. \quad (4.6)$$

Agora, o vetor \mathbf{R}_{ij} será reescrito em termos das coordenadas polares

$$R_{ij}^\pm = R_{ij}^x \pm i R_{ij}^y. \quad (4.7)$$

Utilizando os operadores $S^+, S^-, R_{ij}^-, R_{ij}^+$, o termo dipolar se reescreve:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{dd} = & \frac{\gamma^2}{2} \sum_{i \neq j} \sum_j \left\{ \frac{1}{R_{ij}^3} \left(1 - \frac{3Z_{ij}^2}{R_i^2} \right) \left[S_i^z S_j^z - \frac{1}{4} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \right. \\ & - \frac{3}{4} \left[S_i^+ S_j^+ B_{ij} + S_i^- S_j^- B_{ij}^* \right] - \frac{3}{2} \left[(S_i^+ S_j^z + S_i^z S_j^+) F_{ij} \right. \\ & \left. \left. + (S_i^- S_j^z + S_i^z S_j^-) F_{ij}^* \right] \right\}, \quad (4.8) \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} \gamma &= g \mu_B, \\ B_{ij} &= \frac{(R_{ij}^-)^2}{|R_{ij}|^5} \quad ; \quad B_{ij}^* = \frac{(R_{ij}^+)^2}{|R_{ij}|^5} \\ F_{ij} &= \frac{(R_{ij}^- Z_{ij})}{|R_{ij}|^5} \quad ; \quad F_{ij}^* = \frac{(R_{ij}^+ Z_{ij})}{|R_{ij}|^5}. \quad (4.9) \end{aligned}$$

Para estudar os efeitos da competição no comportamento magnético nesses sistemas bidimensionais, utilizaremos o método das funções de Green, por ser uma

técnica muito adequada na análise de sistemas de partículas interagentes possibilitando obtenção das energias de excitações do sistema. Escolhemos as funções de Green dependente do tempo e da temperatura no tratamento mecânico estatístico de Zubarev[33], a qual é definida por:

$$G_{ij}^{+-}(t, t') = \ll S_i^+(t); S_j^-(t') \gg_\omega = -i\theta(t - t') \ll [S_i^+(t); S_j^-(t')] \gg \quad (4.10)$$

como visto no capítulo 2, a transformada de Fourier temporal da equação de movimento das funções de Green é dada pela expressão:

$$\omega \langle \langle S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [S_l^+, S_m^-] \rangle + \langle \langle [S_l^+, \mathcal{H}]; S_m^- \rangle \rangle_\omega, \quad (4.11)$$

Nesta equação, a função de Green, no segundo termo do membro direito, contém um número maior de operadores do que a função de Green inicial. Se escrevêssemos uma equação para $\langle \langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle \rangle_\omega$ semelhante à equação (4.11), resultaria em uma nova equação de movimento com um número de operadores ainda maior $\langle \langle [[S_l^+, H], H]; S_m^- \rangle \rangle_\omega$. E novas repetições do processo resultaria em uma cadeia infinita de equações acopladas, as quais devem ser deacopladas através de uma aproximação.

Agora substituindo \mathcal{H} (Hamiltoniana do sistema) na equação (4.11) resulta em:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega &= \frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} \\ &+ 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[\langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega - \langle \langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right] \\ &- \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{R_{lj}^3} \left(1 - \frac{Z_{lj}^2}{R_{lj}^2} \right) \left[\langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega + 2 \langle \langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right] \right. \\ &- 3B_{lj}^* \langle \langle S_l^z S_j^-; S_m^- \rangle \rangle_\omega \\ &+ 3F_{lj}^* \left[2 \langle \langle S_l^z S_j^z; S_m^- \rangle \rangle_\omega - \langle \langle S_l^+ S_j^-; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right] \\ &\left. + 3F_{lj} \left[\langle \langle S_j^+ S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Para truncar a sucessão de equações, Bogolyubov e Tyablikov propuseram uma aproximação que despreza as correlações entre o operador S^z , em um sítio da rede, e os operadores S^+ e S^- em outro sítio da mesma rede. Esta aproximação, chamada de "Random Phase Approximation"(RPA), faz com que os produtos de operadores sejam fatorados, isto é

$$\langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle \cong \langle S_l^z \rangle \langle \langle S_j^+; S_m^- \rangle \rangle. \quad (4.13)$$

Originalmente, Bogolyubov e Tyablikov[34] desenvolveram a RPA para um sistema infinito e com spin $S=1/2$. Mais tarde, nos trabalhos de Tahir-Kheli[35] e de Hewson e Ter Haar[40] a RPA foi estendida para um valor de S qualquer, mas ainda para sistemas infinitos onde a média termodinâmica de S_l^z ($\langle S_l^z \rangle$) é a mesma em todos os pontos da rede.

S. Selzer e N. Majlis[42] estenderam a RPA para um sistema semi-infinito, considerando que o sistema seja formado por uma superposição de redes planares, onde a média de S_l^z varia plano à plano, sendo porém constante em um mesmo plano. A esta extensão da RPA vamos chamar de "Local Random Phase Approximation" (LRPA).

No intuito de esclarecer a LRPA, é útil considerar um sítio i em uma rede de Bravais qualquer. A localização deste sítio é feita por um índice que explicita o plano ao qual o sítio pertence e por um vetor que dá as suas coordenadas no plano. Portanto, a posição do sítio i é dada pelo vetor $\mathbf{R}_i = (\mathbf{L}_{\parallel}, L)$, sendo \mathbf{L}_{\parallel} o vetor de posição do ponto i no plano L . Em termos desta notação, reescreve-se:

$$\langle S_i^z \rangle = \langle S_{\mathbf{L}_{\parallel}, l}^z \rangle = \langle S_l^z \rangle ,$$

com o que fica explícita a hipótese de que a média de S_l^z não depende do vetor \mathbf{L}_{\parallel} , isto é, só depende do plano.

Neste momento, antes de aplicar a LRPA, vamos fazer a primeira aproximação em nosso trabalho, isto é, na equação (4.12) desprezaremos as funções de Green do tipo $\langle\langle S_l^z S_j^z; S_m^- \rangle\rangle$, $\langle\langle S_j^+ S_l^+; S_m^- \rangle\rangle$, $\langle\langle S_l^+ S_j^-; S_m^- \rangle\rangle$ e $\langle\langle S_l^- S_j^+; S_m^- \rangle\rangle$. Esta é uma aproximação, usual, na qual se despreza as flutuações de ordens mais altas. Naturalmente, alguns efeitos desses termos podem ser eliminados fazendo uma correção, do estado fundamental ferromagnético de Weiss, através de uma rotação nos spins. Espera-se que com essa rotação local dos spins a correção seja de ordem muito menor que o parâmetro da energia dipolar a qual definiremos por:

$$E_d = \frac{\gamma^2}{J_{\parallel} a^3} ,$$

onde " a " e " J_{\parallel} " são, respectivamente, o parâmetro de rede e o acoplamento de troca entre spins do mesmo plano. Essas contribuições não alteram os resultados da relação de dispersão e, conseqüentemente, da temperatura de Curie. No entanto, o desvio de spin do ponto zero seria alterado por fatores de segunda ordem em E_d . Portanto, a equação (4.12) torna-se:

$$\omega \langle\langle S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} + 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[\langle\langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle\rangle_{\omega} - \langle\langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_{\omega} \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{\mathbf{R}_{lj}^3} \left(1 - \frac{3Z_{lj}^2}{\mathbf{R}_{lj}^2} \right) \left[\langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right. \right. \\
& \left. \left. + 2 \langle \langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right] - 3B_{lj}^* \langle \langle S_l^z S_j^-; S_m^- \rangle \rangle_\omega \right\}. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

A segunda aproximação é a aplicação da *LRPA* à equação (4.14), com a qual obtemos:

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm}^{+-}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} + 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[\langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) - \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{+-}(\omega) \right] \\
& - \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{\mathbf{R}_{lj}^3} \left(1 - \frac{3Z_{lj}^2}{\mathbf{R}_{lj}^2} \right) \left[\langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) \right. \right. \\
& \left. \left. + 2 \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{+-}(\omega) \right] - 3B_{lj}^* \langle S_j^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) \right\}, \quad (4.15)
\end{aligned}$$

onde $G_{mn}^{+-}(\omega) = \langle \langle S_m^+; S_n^- \rangle \rangle_\omega$. Na equação (4.15), aparecem dois tipos de funções de Green, G^{+-} e G^{--} , fato que nos obriga escrever a equação, de movimento para a transformada de Fourier da função de Green G^{--} , isto é,

$$\omega \langle \langle S_l^-; S_m^- \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [S_l^-, S_m^-] \rangle + \langle \langle [S_l^-, H]; S_m^- \rangle \rangle_\omega. \quad (4.16)$$

Seguindo a mesma estratégia anterior, a equação (4.16) torna-se:

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm}^{--}(\omega) &= -2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[\langle S_l^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) - \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{--}(\omega) \right] \\
& + \frac{\gamma}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{\mathbf{R}_{lj}^3} \left(1 - \frac{3Z_{lj}^2}{\mathbf{R}_{lj}^2} \right) \left[\langle S_l^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) \right. \right. \\
& \left. \left. + 2 \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{--}(\omega) \right] + 3B_{lj} \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) \right\}. \quad (4.17)
\end{aligned}$$

A simetria translacional tridimensional de um cristal infinito é perdida para o nosso sistema (filme fino). Porém, em cada plano é preservada a simetria translacional bidimensional, permitindo eliminar a posição relativa dos pontos i e j através da transformada de Fourier espacial, com a qual aparecerá a dependência das funções de Green em \mathbf{k}_\parallel , que são vetores de onda localizados dentro da primeira zona de Brillouin dos planos paralelos.

Tomando a transformada de Fourier das equações (4.15) e (4.17) em relação a $(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)$ obtemos, respectivamente:

$$\langle S_l^z \rangle \delta_{lm} = \left\{ \omega + 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(0) \langle S_j^z \rangle \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \gamma^2 \sum_j \left[\tilde{F}_{lj}(0) - \tilde{H}_{lj}(0) \right] \langle S_j^z \rangle \left\{ \tilde{G}_{lm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\
& - \left. \left\{ 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle + \frac{\gamma^2}{2} \sum_j \left[\tilde{F}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \tilde{H}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] \langle S_l^z \rangle \right\} \tilde{G}_{jm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\
& + \left. \frac{3\gamma^2}{2} \sum_j B_{lj}^*(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle \tilde{G}_{jm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right\}, \tag{4.18}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
0 & = \left\{ \omega - 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(0) \langle S_j^z \rangle \right. \\
& - \gamma^2 \sum_j \left[\tilde{F}_{lj}(0) - \tilde{H}_{lj}(0) \right] \langle S_j^z \rangle \left\{ \tilde{G}_{lm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\
& + \left. \left\{ 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle - \frac{\gamma^2}{2} \sum_j \left[\tilde{F}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \tilde{H}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] \langle S_l^z \rangle \right\} \tilde{G}_{jm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\
& + \left. \left. \frac{3\gamma^2}{2} \sum_j B_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle \tilde{G}_{jm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \right\}, \tag{4.19}
\end{aligned}$$

onde aparecem termos que são representados por somas sobre sítios da rede:

$$\begin{aligned}
\tilde{F}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) & = \sum_{j_{\parallel}} F_{lj}(\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})} = \sum_{j_{\parallel}} \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})}}{(\hat{R}_{lj}^2 + Y_{lj}^2)^{3/2}}, \\
\tilde{H}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) & = \sum_{j_{\parallel}} H_{lj}(\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})} = \sum_{j_{\parallel}} \frac{3Z_{lj}^2 e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})}}{(\hat{R}_{lj}^2 + Y_{lj}^2)^{5/2}}, \\
\tilde{B}_{lj}^*(\mathbf{k}_{\parallel}) & = \sum_{j_{\parallel}} B_{lj}(\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})} = \sum_{j_{\parallel}} \frac{(R_{lj}^-)^2 e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})}}{(\hat{R}_{lj}^2 + Y_{lj}^2)^{5/2}}, \\
\tilde{B}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) & = \sum_{j_{\parallel}} B_{lj}(\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})} = \sum_{j_{\parallel}} \frac{(R_{lj}^+)^2 e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{1}_{\parallel} - \mathbf{j}_{\parallel})}}{(\hat{R}_{lj}^2 + Y_{lj}^2)^{5/2}},
\end{aligned}$$

sendo $\hat{R}_{lj}^2 = x_{lj}^2 + z_{lj}^2$.

As equações (4.18) e (4.19) formam um sistema, que de agora em diante, passará a ser o nosso objeto de análise. Convém compactar as nossas equações, fazendo:

$$A_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \tilde{F}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \tilde{H}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}),$$

Vamos primeiramente estudar o problema mais simples, ou seja, vamos considerar $n=2$, o qual leva às seguintes simplificações:

$$\begin{aligned}\langle S_1^z \rangle &= \langle S_2^z \rangle = S , \\ A_{11} &= A_{22} \quad ; \quad A_{12} = A_{21} \\ J_{11} &= J_{22} \quad ; \quad J_{12} = J_{21} \quad ,\end{aligned}$$

Após realizarmos o somatório em j para $l=1$ e $l=2$, obtemos:

$$\begin{aligned}(\omega + \lambda\sigma)G_{1m}^{+-} - \sigma\beta G_{2m}^{+-} + \sigma b_1^* G_{1m}^{--} + \sigma b_2^* G_{2m}^{--} &= \sigma\delta_{1m} , \\ (\omega + \lambda\sigma)G_{2m}^{+-} - \sigma\beta G_{1m}^{+-} + \sigma b_1^* G_{2m}^{--} + \sigma b_2^* G_{1m}^{--} &= \sigma\delta_{2m} , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{1m}^{--} + \sigma\beta G_{2m}^{--} + \sigma b_1^* G_{1m}^{+-} + \sigma b_2^* G_{2m}^{+-} &= 0 , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{2m}^{--} + \sigma\beta G_{1m}^{--} + \sigma b_2^* G_{1m}^{+-} + \sigma b_1^* G_{2m}^{+-} &= 0 ,\end{aligned}\tag{4.20}$$

onde

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{S}{\pi} , \\ \lambda &= 2\pi \left[J_{11}(0) + J_{12}(0) - J_{11}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] + \frac{\gamma^2\pi}{2} \left[2(A_{11}(0) + A_{12}(0)) + A_{11}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] , \\ \beta &= -2\pi J_{12}(\mathbf{k}_{\parallel}) + \frac{\gamma^2\pi}{2} A_{12}(\mathbf{k}_{\parallel}) , \\ b_1^* &= -\frac{3\pi\gamma^2}{2} B_{11}^*(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad ; \quad b_1 = -\frac{3\pi\gamma^2}{2} B_{11}(\mathbf{k}_{\parallel}) \\ b_2^* &= -\frac{3\pi\gamma^2}{2} B_{12}^*(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad ; \quad b_2 = -\frac{3\pi\gamma^2}{2} B_{12}(\mathbf{k}_{\parallel}) .\end{aligned}$$

Fazendo $m=1$ e $m=2$, as equações (4.20) tornam-se:

$$\begin{aligned}(\omega + \lambda\sigma)G_{11}^{+-} - \sigma\beta G_{21}^{+-} + \sigma b_1^* G_{11}^{--} + \sigma b_2^* G_{21}^{--} &= \sigma , \\ (\omega + \lambda\sigma)G_{12}^{+-} - \sigma\beta G_{22}^{+-} + \sigma b_1^* G_{12}^{--} + \sigma b_2^* G_{22}^{--} &= 0 , \\ (\omega + \lambda\sigma)G_{21}^{+-} - \sigma\beta G_{11}^{+-} + \sigma b_1^* G_{21}^{--} + \sigma b_2^* G_{11}^{--} &= 0 , \\ (\omega + \lambda\sigma)G_{22}^{+-} - \sigma\beta G_{12}^{+-} + \sigma b_1^* G_{22}^{--} + \sigma b_2^* G_{12}^{--} &= \sigma , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{11}^{--} + \sigma\beta G_{21}^{--} - \sigma b_1 G_{11}^{+-} - \sigma b_2 G_{21}^{+-} &= 0 , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{12}^{--} + \sigma\beta G_{22}^{--} - \sigma b_1 G_{12}^{+-} - \sigma b_2 G_{22}^{+-} &= 0 , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{21}^{--} + \sigma\beta G_{11}^{--} - \sigma b_2 G_{11}^{+-} - \sigma b_1 G_{21}^{+-} &= 0 , \\ (\omega - \lambda\sigma)G_{22}^{--} + \sigma\beta G_{12}^{--} - \sigma b_2 G_{12}^{+-} - \sigma b_1 G_{22}^{+-} &= 0 .\end{aligned}\tag{4.21}$$

Estas equações podem ser escritas na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{\Omega}\mathbf{G} = \mathbf{\Sigma}$$

onde

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11}^{+-}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) & G_{12}^{+-}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) \\ G_{21}^{+-}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) & G_{22}^{+-}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) \\ G_{11}^{-+}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) & G_{12}^{-+}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) \\ G_{21}^{-+}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) & G_{22}^{-+}(\mathbf{k}_{\parallel}, w) \end{pmatrix}, \mathbf{\Sigma} = \frac{1}{\pi} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \omega + \lambda\sigma & -\sigma\beta & \sigma b_1^* & \sigma b_2^* \\ -\sigma\beta & \omega + \lambda\sigma & \sigma b_2^* & \sigma b_1^* \\ -\sigma b_1 & -\sigma b_2 & \omega - \lambda\sigma & \sigma\beta \\ -\sigma b_2 & -\sigma b_1 & \sigma\beta & \omega - \lambda\sigma \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Capítulo 5

Resultados e Conclusões

5.1 Introdução

Neste capítulo, vamos apresentar e discutir o nosso principal resultado, a relação de dispersão dos mágnons em função dos parâmetros da Hamiltoniana.

Todos os nossos resultados foram obtidos considerando a soma direta dos coeficientes dipolares. Esta escolha é justificável devido os métodos analíticos apresentarem sérias dificuldades, as quais tornariam os resultados bastante discutíveis. Por exemplo, o método analítico de Fumi-Tose[41] apresenta a função de Bessel de segunda espécie nas expressões dos coeficientes dipolares, isto implica na necessidade de usar aproximações. E para k pequeno é necessário realizar as somas em um número muito grande de pontos, o que corresponde a realizar a soma direta. Por outro lado, o método desenvolvido por Yafet[10] tem o defeito de introduzir um parâmetro de corte para ajustar o seu resultado com o da soma direta quando $K = 0$. Portanto, neste método seria razoável introduzir outros parâmetros para os diferentes k_s , o que tornaria o método inviável.

5.1.1 A relação de Dispersão

A relação de dispersão ou a frequência de propagação dos magnons, em nosso sistema, é uma função de vários parâmetros $\omega(k, J, E_d, y)$, e é dada pelas raízes do determinante $|\Omega|$, na equação (4.22). Aqui, y representa a distância de separação entre as duas monocamadas.

$$\omega_1^2 = (\lambda\sigma + \sigma\beta)^2 - \sigma^2 [b_1 (b_1^* - b_2^*) + b_2 (b_2^* - b_1^*)] \quad (5.1)$$

$$\omega_2^2 = (\lambda\sigma - \sigma\beta)^2 - \sigma^2 [b_1 (b_1^* + b_2^*) + b_2 (b_2^* + b_1^*)] , \quad (5.2)$$

onde ω_1 representa o ramo ótico e ω_2 o ramo acústico.

Neste capítulo, estamos estudando a competição da interação ferromagnética dipolar de longo alcance, a qual em baixas temperaturas favorece o estado ferromagnético, e a interação de troca antiferromagnética de curto alcance que por sua vez favorece o estado antiferromagnético.

A bicamada magnética é constituída pela superposição de duas monocamadas magnéticas crescidas sobre uma superfície diamagnética. Em cada monocamada os momentos magnéticos estão acoplados pela interação antiferromagnética de troca entre os primeiros vizinhos, paralela ao plano (J_{\parallel}). E todos os spins do plano estão acoplados entre si através da interação ferromagnética dipolar de longo alcance. Por outro lado, os momentos magnéticos de uma monocamada acoplam com os seus primeiros localizados na outra monocamada pela interação de troca (J_{\perp}). Todos os momentos de uma monocamada se acoplam com todos os outros momentos da monocamada diferente através da interação dipolar. Inicialmente, vamos imaginar

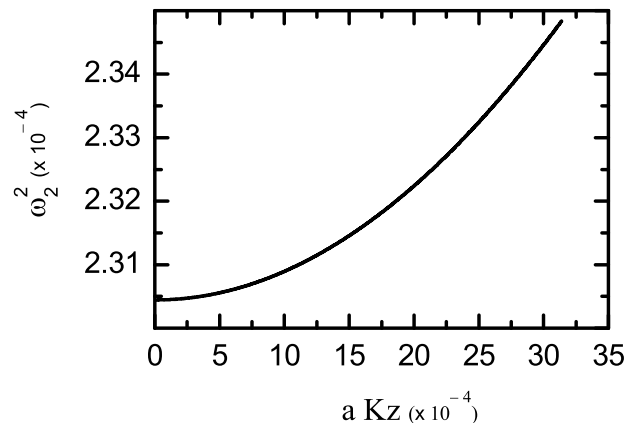


Figura 5.1: Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z (k_x = 0)$. A curva corresponde aos seguintes parâmetros $J = J_{\parallel} = J_{\perp} = 0$ e $E_d = 0.02$

que todos os spins interagem somente através da interação dipolar, dessa forma o sistema se apresenta em um estado fundamental ferromagnético. Esta situação pode ser vista na figura 5.1, a qual exibe a relação de dispersão do ramo acústico na região de k_z muito pequeno, onde consideramos a energia dipolar igual a $E_d = 0,02$ e a energia de troca igual $J_{\parallel} = J_{\perp} = 0$. O diagrama mostra que os momentos magnéticos (spins) interagem entre si somente através da interação dipolar, assim o sistema para minimizar a sua energia assume o estado ferromagnético.

Por outro lado, a figura 5.2 mostra a situação na qual a interação de troca de curto alcance é vagarosamente ligada a partir do zero. Assim, o estado ferromagnético é mantido até a energia de troca assumir o valor de $J = 0,000875$ para $E_d = 0,02$. Quando a interação de troca assume valores maiores $J > 0,000875$ a relação de dispersão passa a ser imaginário puro, informando que a ordem ferromagnética foi destruída. Neste caso, o sistema é frustrado, isto é, os spins não podem ficar num estado ferromagnético e nem no estado antiferromagnético. Definindo $\delta = J/E_d$, então o sistema apresenta frustração em um certo valor crítico de delta, isto é, $\delta_c = 0,04375$. As figuras 5.3 e 5.4 exibem respectivamente a relação de

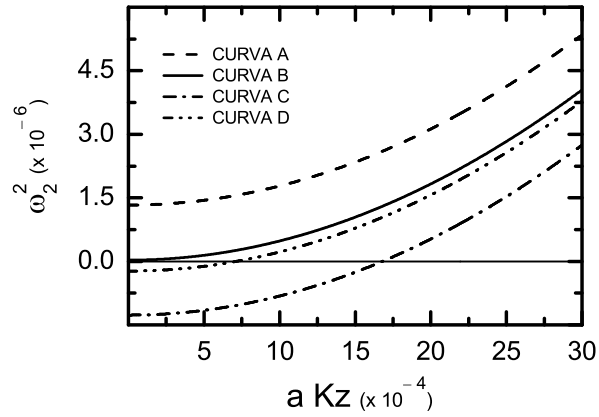


Figura 5.2: Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus k_z ($k_x = 0$). As curvas correspondem ao valor $E_d = 0,02$ e aos seguintes valores do parâmetro J : curva A ($J = 0,00087$), B ($J = 0,000875$), C ($J = 0,000876$) e D ($J = 0,000880$). O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início à frustração do sistema.

dispersão do modo acústico para os valores de $E_d = 0,03$ e $0,04$ respectivamente. Os dois casos mostram o mesmo comportamento da figura 5.1, no qual o sistema se apresenta no estado ferromagnético até um valor crítico de $\delta = 0,04375$, a partir do qual o sistema se apresenta em um estado de frustração.

Valores maiores da interação dipolar não foram considerados devido a materiais magnéticos reais não apresentarem energia dipolar muito grande. Esta interação é pequena, porém, de longo alcance, a qual faz com que todos os spins sejam interagentes.

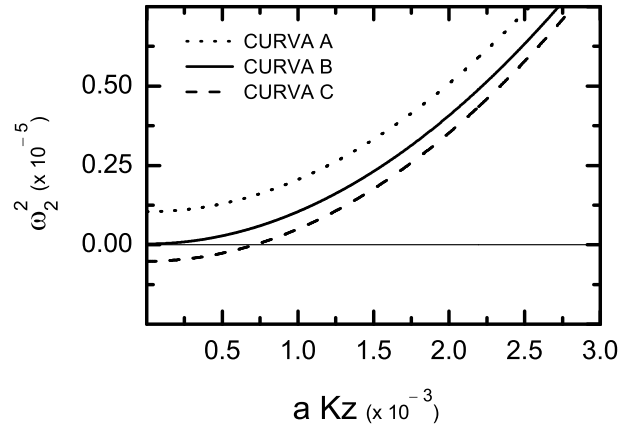


Figura 5.3: Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. As curvas correspondem ao valor $E_d = 0.02$ e aos seguintes valores do parâmetro J : curva A ($J = 0,00087$), B($J = 0,000875$), C($J = 0,000876$) e D($J = 0,000880$). O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início a frustração do sistema.

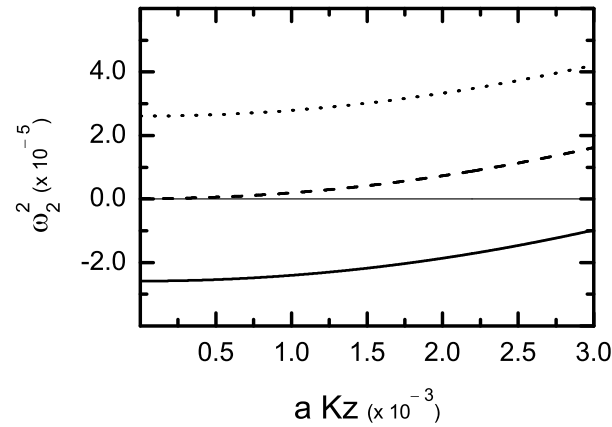


Figura 5.4: Relação de dispersão do modo acústico, ω_2^2 , versus $k_z(k_x = 0)$. As curvas correspondem ao valor $E_d = 0,04$ e aos seguintes valores do parâmetro J : curva A ($J = 0,0017$), B($J = 0,00175$) e C($J = 0,0018$). O valor crítico de $\delta_c = 0,04375$ dá início a frustração do sistema.

5.2 Conclusão

Nesta dissertação estudamos a competição entre as interações de troca antiferromagnética (de curto alcance) e a interação dipolar (de longo alcance).

Inicialmente, consideramos um sistema bidimensional representado pelo modelo

de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ com $J = 0$ e acrescido da interação dipolar ferromagnética. Mostramos que nessa condição a interação dipolar, na região de k pequeno, estabiliza a ordem ferromagnética. Assim, um filme magnético onde os spins interagem entre si somente através da interação dipolar de longo-alcance tem um estado ferromagnético na região de pequenos valores do vetor de onda K .

Em seguida, permitimos que os spins primeiros vizinhos no filme interaga entre si através da interação de troca antiferromagnética, além de todos spins acoplarem entre si através da interação dipolar (interação de longo alcance). Neste caso, aparece a competição entre as duas interações. Assim, como sabemos que a interação de troca é de duas ou três ordens de grandeza maior que a dipolar, o estado ferromagnético persiste somente para pequenos valores da interação de troca. À medida que valores da interação de troca cresce o estado ferromagnético vai desaparecendo. Portanto, o estado ferromagnético é estável até um certo valor crítico de J_c . Para valores de $J > J_c$ não há estado ferromagnético estável. Este comportamento ocorre para diversos parâmetros dipolares. Para verificar a frustração para quaisquer valores dos parâmetros de troca e dipolar definimos $\delta = \frac{J_{ex}}{Ed}$. Quando atingir um certo valor, o qual chamaremos de $\delta_c = 0,04375$, o sistema se torna frustrado. Portanto, quando δ atingir seu valor crítico os momentos magnéticos do sistema tornam-se frustrados, pois o sistema não pode estar num estado ferromagnético nem em um estado antiferromagnético.

5.3 Perspectivas Futuras

Como perspectivas futuras desta dissertação podemos realizar os seguintes estudos:

1 - Considerar a mesma mesma Hamiltoniana, porém com os spins distribuídos em duas sub-redes. Neste caso, podemos estudar a competição entre as interações de troca antiferromagnética e a dipolar ferromagnética.

2 - Com a mesma Hamiltoniana anterior podemos estudar as propriedades termodinâmicas e o comportamento do calor específico suscetibilidade, etc.

3 - Usando as mesmas técnicas e com a mesma Hamiltoniana, porém com interação dipolar antiferromagnética poderemos reduzir um estudo completo das propriedades termodinâmicas de $T = 0$ a $T = T_c$.

Bibliografia

- [1] B.Heinrich, S.T.Purcell, J.R.Dutcher, K.B.Urquhart, J.F. Cochran and A.S. Arrott, Phys. Rev. B **38** , 12879 (1988)
- [2] J.R.Dutcher, J.F.Cochran, I.Jacob, and W.F.Egelhoff,Jr, Phys. Rev. B **39**, 10430 (1989)
- [3] J.Sandercock, J. Appl. Phys **50** ,7784 (1979)
- [4] B.Heinrich, A.S.Arrott, J.F.Cochran, S.T.Purcell, K.B.Urquhart, and K.Myrtle, J.Cryst. Growth **81**, 562 (1987)
- [5] D.P.Papas, K.P.Kamper and H.Hopster, Phys. Rev. Lett. **64**, 3179 (1990)
- [6] M.H. Cohen, F. Keffer, Phys. Rev. **99**, 1128 (1955)
- [7] R.P. Erickson and D.L.Mills, Phys. Rev. B **43** , 10715 (1991)
- [8] R.P.Erickson, D.L.Mills, Phys. Rev. B **44**, 11825 (1991)
- [9] S.V. Maleev, Soc. Phys. JETP **43** , 1240 (1976)
- [10] Y.Yafet, J.Kwo, E.M.Gyorgy, Phys. Rev. B **33**, 6519 (1988)
- [11] M.G.Pini, A.Rettori, D.Pescia, N.Majlis, S.Selzer, Proceedings of Nato Conf. on "Microscopic Aspects of Non Linearity in Condensed Matter", Editors A. R. Bishop, VTognetti, Plenum Press (1991)
- [12] N.Majlis, S.Selzer, G.C.Strinati, Phys. Rev. B **45** , 7872 (1992)
- [13] K.de Bell, A.B. MacIsaac, and J. P. Whitehead,Rev. Mod. Phys **72**, 225 (2000), and references therein
- [14] N.D.Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)

-
- [15] E. Frey and F. Schwabl, *adv. phys.*, **43**, 577 (1994)
- [16] A.Skjeltorp and D. Sherrington, *Dynamical Properties of Unconventional Magnetic Systems* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1988)
- [17] H.Diep, *Magnetic Systems with Competing Interactions* (World Scientific, Singapore, 1994)
- [18] R.M.White, *quantum theory of magnetism*, Mc-Graw Hill, New York (1970)
- [19] H.Nakano, M.Takahashi, *Phys. Rev.B* **52** , 6606 (1995)
- [20] J.R.Sousa e N.S.Branco, *Phys. Rev. B* **72**, 134421 (2005)
- [21] S.M.Rezende, *Mat. e Disp. Eletrônicos*, 2^a Ed, Ed Livraria da Física,SP, 2004
- [22] M.N.Baibich, J.M.Broto, A.Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988)
- [23] H.N. Nazareno, *Mecânica Estatística e Funções de Green*, Ed. UNB, Brasilia (1986)
- [24] F.J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1230
- [25] S.V. Tyablikov, *Methodos in Quantun Theory of Magnetism*, Plenum Prese, New York (1967)
- [26] J.B.N de Moraes, W. Figueiredo, *J. Phys. Cond. Matt* **5**, 3809 (1993)
- [27] A.S.Arruda,N Majilis e S. Selzer, *Phys. Rev. B* **51**, 3933 (1995)
- [28] J.S.Cabral Neto, *Estudo sistemático das propriedades termodinâmicas e criticidade de filmes finos e super-redes magnéticas*, Tese (Doutorado), UFSCar (2005)
- [29] T.A.S.Pereira, *Confinamento Dielétrico versus Quântico em Nanoestruturas*, Tese de Doutorado, UFC (2006)
- [30] S.M.Rezende, *Mat. e Disp. Eletrônicos*, 2^a Ed, Ed Livraria da Física,SP, 2004
- [31] W.H.Meiklejohn e C.P. Bean, *Phys. Rev.* **105**, 904 (1957)
- [32] A.E.Berkowitz e K. Takano, *Journal of Magn. and Magn. Materials* **200**, 552 (1999)

-
- [33] D.N.Zubarev, Sov. Phys Uspekhi **3**, 320 (1960)
- [34] N.N.Bogolyubov, S.V. Tyablikov, Sov. Phys. - Dokl. **4**, 604 (1959)
- [35] R.A.Tahir-Kheli, Phys. Rev.**132**, 689 (1963)
- [36] J.J.M.Steijger, E.Frikkee, L.J.de Jongh, W.J.Huiskamp, Phys. B **123**,271 (1984)
- [37] C.H.Back, A.Kashuba, D.Pescia, Phys. Low-Dim. Struct. 2, **9** (1994)
- [38] S.Tacchi, A.Stollo, M.Madami, G.Gubbiotti, G.Carlotti, M.G.Pini, P.Politi, R.L.Stamps, Surface Science **600** , 4147-4150 (2006)
- [39] M.G.Pini, P.Politi, R.L.Stamps, Phys. Rev. B **72** , 14454 (2005)
- [40] A.C.Hewson, D.T. Haar, Physica **30** , 890 (1964)
- [41] F.G.Fumi, M.P.Tosi, Phys. Rev.**117**, 1466 (1960)
- [42] S.Selzer, N.Majlis, Phys. Rev.B **26** , 404 (1981)

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)