### UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

## Centro de Ciências Exatas e da Terra Departamento de Física

Dissertação de Mestrado



UFMT Cuiabá Agosto - 2007

## Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

## Interação de Longo Alcance em uma Bicamada Magnética

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda

Agosto - 2007

A você Devair, dedico esta dissertação e o meu sincero amor.

### Agradecimentos

- Ao professor Dr. Alberto Sebastião de Arruda, pela confiança e brilhante orientação depositadas durante o desenvolvimento desta dissertação e durante minha vida acadêmica;
- Aos meus filhos: Gustavo e Yasmin, agradeço a compreensão pelas ausências inevitáveis;
- Ao meu marido, pelo companheirismo e incentivo;
- Aos meus pais, Avelino e Rosangela, que apesar de não estarem mais juntos, sempre me incentivaram na minha realização pessoal;
- Aos colegas e amigos do grupo, em especial: Adriano, Aglezio, Alessandro Ferreira, Dorilson, João, Josiel, Jannaira e Robson;
- A Marlene, minha amiga de todos os momentos;
- Aos professores do Departamento de Física, principalmente ao professor Jorge Luiz Brito de Faria (Hulk), pela sua presteza e enorme sabedoria;
- Ao Departamento de Física e a secretaria da Pós-Graduação, em especial a Dulce, por resolver os problemas burocráticos;
- Finalmente, agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Mato Grosso (FAPEMAT), pelo apoio financeiro durante a realização do mestrado.

### Resumo

Neste trabalho foi estudado as propriedades termodinâmicas acima da temperatura crítica de uma bicamada magnética (filme fino), quando submetida as ações das interações de troca, da anisotropia dipolar (longo alcance) e de um campo magnético externo. A interação de troca entre os spins primeiros vizinhos é ferromagnética. Foi obtida numericamente a magnetização em função da temperatura e a relação de dispersão de um filme fino. Usamos o método das funções de Green dependentes de dois tempos e temperatura, que é um método muito adequado para sistemas de muitos corpos interagentes. Os resultados mostraram que o sistema apresenta ordem de longo alcance até um valor crítico do parâmetro de anisotropia dipolar. Foram mostrados os comportamentos da magnetização e da relação de dispersão na presença e na ausência de um campo magnético externo para diversos valores de anisotropia dipolar.

### Abstract

In this work, it was studied the thermodynamic properties above of the critical temperature of a magnetic bilayer (thim film), when submitted the actions of the interactions of exchange, the dipolar anisotropy (long range) and of a external magnetic field. The interaction of exchange between spins next neighbors is ferromagnetic. It was found numerically the magnetization in function of the temperature, and the relation of dispersion of the thim film. We use the Green's function theory dependents of two times and temperature, wich is a method very adysted for systems of many interagents bodies. The results showed that the system presents long-range order until a critical value of parameter of dipolar anisotropy. The behaviors of the magnetization and the relation of dispersion in the presence and the absence of a external magnetic field for diverse values of dipolar anisotropy have been showed.

# Sumário

## Introdução

1	Mag	Magnetismo: Aspecto Histórico		
	1.1	Introd	ução	5
	1.2	Nanon	nagnetismo	7
		1.2.1	Filmes Finos	8
	1.3	Propri	edades magnéticas dos sólidos	8
		1.3.1	Materiais Diamagnéticos	10
		1.3.2	Materiais Paramagnéticos	11
		1.3.3	Materiais Ferromagnéticos	12
	1.4	Intera	ções Competitivas no Filme	16
		1.4.1	Interação de Troca	16
		1.4.2	Interação Dipolar	21
		1.4.3	Anisotropia Magnetocristalina	22
<b>2</b>	Efeitos da Interação Dipolar em Filmes Magnéticos Acima			
	da 7	Tempe	ratura Crítica	25
	2.1	Model	o e Método de Cálculo	25
	2.2	2.2 As equações do movimento no método das funções de Green-		
		Zubare	ev	28

1

	2.3	Cálculo da Magnetização	35
	2.4	Cálculo da Relação de Dispersão	37
3	Res	ultados e Conclusões	38
	3.1	Introdução	38
	3.2	Comportamento Térmico da Magnetização	39
		3.2.1 Relação de Dispersão	55
	3.3	Conclusão e Perspectivas Futuras	60
A	Mé	étodo das Funções de Green	62

# Lista de Figuras

Dispositivo eletrônico da ordem de nanometro
Disco rígido constituído de camada de filme fino magnético 8
Variação térmica da magnetização espontânea relativa do ferro
em função de Tc [17] 13
Domínios magnéticos de um material
Efeito da histerese magnética
Geometria utilizada para estudar a bicamada magnética (plano
yz)
Magnetização a campo nulo $(\mathbf{H}=0)$ em função da temperatura
reduzida $K_B T/J$ para N=1023 e $ed = 0.010(a), 0.011(b)$ e
$0.012(c). \ldots 41$
Magnetização x Temperatura para N=4095, H=0 e $ed=0.010(a),$
$0.011(b) \in 0.012(c)$
Magnetização x temperatura para N=16383, H=0 e $ed$ =
$0.010(a), 0.011(b) \in 0.012(c). \dots \dots$
Magnetização x temperatura para N=65535, H=0 e $ed$ =
$0.010(a), 0.011(b) \in 0.012(c). \dots \dots$
Magnetização x temperatura para N=262143, H=0 e $ed$ =
$0.010(a), 0.011(b) \in 0.012(c).$

3.6	Diagrama de fases de $T_c \ge ed_c$	47
3.7	Magnetização x temperatura para N=1023, $H=10^{-5}$ e $ed=$	
	0.0150(a), e $ed = 0.0158(b)$	48
3.8	Magnetização x temperatura para N=4095, $H=10^{-5}$ e $ed=$	
	0.0150(a), e $ed = 0.0158(b)$	48
3.9	Magnetização x temperatura para N=6383, $H=10^{-5}$ e $ed=$	
	0.0150(a), e $ed = 0.0158(b)$	49
3.10	Magnetização x temperatura para N=65535, $H=10^{-5}$ e $ed=$	
	0.0150(a), e $ed = 0.0158(b)$	49
3.11	Magnetização x temperatura para N=262143, $H~=~10^{-5}$ e	
	ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).	50
3.12	Magnetização x temperatura para N=1023, $H=10^{-4}$ e $ed=$	
	0.02(a), e $ed = 0.05885$	51
3.13	Magnetização x temperatura para N=1023, $H=10^{-3}$ e $ed=$	
	$0.100(a), e \ ed = 0.115.$	52
3.14	Magnetização x temperatura para N=4095, $H=10^{-3}$ e $ed=$	
	$0.100(a), e \ ed = 0.115.$	53
3.15	Magnetização x temperatura para N=16383, $H=10^{-3}$ e $ed=$	
	$0.100(a), e \ ed = 0.115.$	53
3.16	Magnetização x temperatura para N=65535, $H=10^{-3}$ e $ed=$	
	$0.100(a), e \ ed = 0.115.$	54
3.17	Magnetização x temperatura para N=262143, $H~=~10^{-3}$ e	
	ed = 0.100(a), e ed = 0.115.	54
3.18	Relação de dispersão para diversos valores de interação dipolar	
	e campo magnético H=0	56
3.19	Relação de dispersão para valores de ed: $0.0150$ e $0.0158$ e	
	campo magnético H=0.00001	57

3.20	Relação de dispersão para diversos valores de interação dipolar		
	e campo magnético H=0	58	
3.21	Relação de dispersão para valores de ed: $0.0150$ e $0.0158$ e		
	campo magnético H=0.00001	58	
3.22	Relação de dispersão dos magnons na ausência de campo magnétic	ю	
	externo $(H=0)(a)$ e sob a influência de um campo externo		
	(H=0.001)(b)	59	
3.23	Relação de dispersão dos magnons sob a influência de um		
	campo magnético externo (H=0.5)(a) e (H=1.0) (b). $\ $	59	

# Lista de Tabelas

1.1	Temperatura de Curie de alguns materiais ferromagnéticos [14,			
	15]	14		
3.1	Valores de $T_c$ para diversos valores de $ed$ e diferentes tamanhos			
	de retículo na ausência de campo magnético externo, H=0. $$ .	46		
3.2	Valores de $T_c$ em função de $e_d$ e do tamanho do retículo na			
	presença de um campo magnético externo da ordem de 10 <sup>-5</sup>	50		

## Introdução

Foi-se o tempo onde pensar grande era o mais importante. Atualmente as indústrias eletroeletrônicas buscam compactar as diversas funções em um único aparelho e simultaneamente, a sua miniaturização. Estudos buscam desenvolver técnicas que tornem o ser humano apto a manipular átomos ou moléculas como se fossem bloquinhos de um brinquedo de montar. O rítimo acelerado da tecnologia tem colocado no mercado aparelhos cada vez menores contendo um número brutal de informações, um exemplo são os *pen drives* que circulam por aí, alguns com memórias de até 64 gigabytes e medem até 9,2 centímetros de altura por 2,5 centímetros de largura. Encontra-se aplicações dos filmes finos na eletrônica, armazenamento de dados, biotecnologia e farmacologia, no caso de filmes moleculares [1, 2].

A tecnologia de filmes finos abrange nos dias de hoje a formação de camadas ferromagnéticas como meio de gravação com orientação perpendicular, bem como a fabricação de cabeças gravadoras/leitoras. Um exemplo de filmes finos utilizados como gravação magnética são os discos rígidos comuns.

Pesquisas em materiais magnéticos e filmes finos tiveram um considerável crescimento, devido às descobertas feitas nas estruturas desses filmes e suas aplicações tecnológicas, incluindo uso na eletrônica e medicina. Por exemplo, o uso de filmes magnéticos ultrafinos para armazenamento de dados exige que a magnetização do filme seja embutida e lida com elevado grau de exatidão [3]. Os filmes finos podem ser preparados através de vários métodos diferentes, dependendo da composição, espessura e aplicabilidade. Todos se baseiam na deposição gradual de átomos ou moléculas, do material desejado em uma superfície, que serve de apoio, o substrato.

Para o desenvolvimento de materiais com características sob medida para uma aplicação específica, há a exigência de alguns fatores: uma detalhada compreensão das interações microscópicas presentes nas estruturas desses materiais; identificar de que maneira essas interações são afetadas por fatores semelhantes, tais como composição e preparação e ainda identificar de que maneira essas interações determinam as propriedades do material.

Estudos teóricos [4, 5] e experimentais [6] têm revelado propriedades magnéticas incomuns relacionadas a filmes finos. Incluem, por exemplo, um crescimento inicial na magnetização estática com o crescimento da temperatura na presença de um campo magnético externo [7]. Assim, para estudar a magnetização do ponto de vista microscópico usamos o modelo de Heisenberg [8], interação de curto alcance, que decai exponencialmente com a distância  $(\mathbf{r})$  entre os momentos magnéticos [9].

Para spins com simetria rotacional, a ordem espontânea de longo alcance não ocorre à qualquer temperatura finita se somente interações de troca estiver presente [10]. Uma descrição teórica realista desses sistemas deve incluir uma interação dipolar (que é de longo alcance), uma interação de troca e anisotropia magnetocristalina. Sua presença quebra a simetria rotacional do sistema, e modifica drasticamente a relação de dispersão dos mágnons. Como mostraremos nesta dissertação, a partir de determinados valores da interação dipolar, a relação de dispersão deixa de ter um comportamento não mais quadrático e passa a ser um imaginário puro (na ausência de campo magnético externo). Mostraremos o comportamento da relação de dispersão na presença do campo magnético externo.

Esses fatores nos levam ao desenvolvimento desta dissertação. Primeiramente, no capítulo 1, fizemos uma revisão teórica [11, 12, 13, 14, 15], incluindo os aspectos históricos e uma breve descrição das interações microscópicas que ocorrem nas estruturas desses materiais [16, 17].

No capítulo 2, estudamos uma bicamada magnética, filme fino, de spins S = 1/2 com interações ferromagnéticas entre seus primeiros vizinhos localizadas dentro de cada plano. Os spins primeiro vizinhos, das duas camadas, também interagem através de uma interação de intercâmbio de curto alcance. Os spins são interligados, aos pares, através da interação dipolar, que é de longo alcance. Calculamos a magnetização em função da temperatura para diversos valores de interação dipolar e comparamos os resultados na ausência [18, 19] e presença do campo magnético externo. Os cálculos foram feitos utilizando o método das funções de Green [20, 21] em conjunto com a aproximação das fases aleatórias (RPA) [22, 23, 24]. O método que desenvolvemos é aplicado para problemas envolvendo filmes com  $\mathbf{n}$  camadas, situadas entre meios não magnéticos infinitos. Assim, calculamos numericamente, utilizando o método das funções de Green com uma extenção da **RPA**, proposta por Selzer e Majlis [25], onde a média da magnetização varia plano a plano, sendo porém constante em um mesmo plano. Esta extensão da RPA, chamada de **LRPA**, Local Random Phase Approximation. Após fazer algumas aproximações chega-se a um conjunto de equações, a qual é escrita através de uma forma matricial. Assim encontramos a relação de dispersão, a qual é dada pelo cálculo das raízes do determinante.

No capítulo 3, apresentamos os principais resultados observados nos cálculos da magnetização versus temperatura e também na relação de dispersão, onde comparamos os resultados na presença e ausência de campo magnético externo. No apêndice A, o método das funções de Green aplicada a um modelo ferromagnético de spin S=1/2 é desenvolvido.

## Capítulo 1

## Magnetismo: Aspecto Histórico

### 1.1 Introdução

Acredita-se que tenham sido os gregos, na antiguidade, os primeiros a observarem os fenômenos relacionados ao magnetismo. Palavra que está relacionada ao fato de um ser "influenciar" outro sem tocar. Sua origem também está ligada a um mineral, a magnetita  $Fe_3O_4$ , encontrada em grandes quantidades em uma cidade da região da antiga Turquia, denominada Magnésia. Esse mineral, imã permanente que se encontra em forma natural, apresentava propriedades e uso envolvidos por muito misticismo. Somente após o século XIX houve um avanço nos modelos para explicar os fenômenos magnéticos. Isto ocorreu devido a descoberta da relação entre o magnetismo e a eletricidade.

No início do século XIX os professores de ciências se chamavam professores de filosofia natural, usavam a pilha de Volta para fazer demonstração de fenômenos ligados à corrente elétrica, geração de faíscas, produção de calor e até decomposição da água em oxigênio e hidrogênio. Curiosamente, teria sido numa aula e não num laboratório de pesquisa que essa relação foi descoberta. Hans Christian Oersted, professor dinamarquês, no século XIX, no ano de 1820, comprovou uma forte e importantíssima correlação entre eletricidade e Magnetismo. Demonstrava em aula o aquecimento de um fio devido à passagem da corrente elétrica. E estando esse fio próximo a uma bússola, teria feito a agulha mudar sua posição, deixando de indicar o pólo norte. Oersted verificou que o sentido da rotação da agulha dependia do sentido da corrente elétrica que atravessava o fio. Publicando assim, seu trabalho em julho de 1820, causando um impacto extraordinário na comunidade científica. Com a descoberta de Oersted, que uma corrente elétrica gera um campo magnético, começou-se o questionamento se o inverso seria possível, isto é, um campo magnético gerar uma corrente elétrica. Em 1824 Faraday começou uma detalhada pesquisa, e da mesma maneira que ocorreu com Oesrted, ao acaso, ocorreu com Faraday. Faraday teria enrolado um núcleo de ferro com duas bobinas, e percebeu que quando ligava ou desligava uma das bobinas numa bateria, passava uma corrente elétrica na outra e logo em seguida, a corrente desaparecia. Faraday constatou que isso se dava à variação do campo magnético, que surgia quando a bobina era ligada, cuja variação se dava através das linhas de campo, conceito criado por ele. James Clerk Maxwell (1831 - 1879) constatou uma conexão entre os campos magnéticos e elétricos, uma variação do fluxo do campo magnético dá origem a um campo elétrico, uma variação do fluxo do campo elétrico deve originar um campo magnético. Completando assim, a perfeita simetria entre os fenômenos eletromagnéticos. Formulou assim, um conjunto de quatro equações, que levam seu nome, e que hoje, são o alicerce e a base que fundamenta o eletromagnetismo. O escopo das equações de Maxwell é notável, no qual se baseia os princípios de fundamentos de todos os dispositivos eletromagnéticos e ópticos de larga escala como motores, rádio, televisão, radar

de microondas, microscópios e telescópios. Através das equações de Maxwell é possível estudar as propriedades elétricas e magnéticas de novos materiais, do ponto de vista macroscópico.

### 1.2 Nanomagnetismo



Figura 1.1: Dispositivo eletrônico da ordem de nanometro.

O nanomagnetismo trata do estudo e aplicações das propriedades magnéticas de nanopartículas isoladas (da ordem de nanometro), amostras magnéticas volumosas, tais como: partículas nanoscópicas magnéticas, nanofios, filmes finos e multicamadas. O nanomagnetismo tem inúmeras aplicações práticas, que vai da geologia à gravação magnética, dos ferrofluídos ou líquidos magnéticos (utiliza nanopartículas magnéticas na forma de suspensão coloidal) até o transporte de drogas que podem ser direcionadas a orgãos ou tecidos específicos [1]. Uma importantíssima aplicação do nanomagnetismo tem sido a gravação magnética, que paralelamente ao crescente aumento da densidade de circuitos eletrônicos nos chips, que dobra a cada dezoito meses (tendência conhecida como Lei de Moore), a densidade de gravação magnética nos discos rígidos disponíveis no mercado, a qual evolui ainda mais rapidamente.

### 1.2.1 Filmes Finos



Figura 1.2: Disco rígido constituído de camada de filme fino magnético.

Filmes finos consiste em um pequeno número de camada (com espessura que podem variar de alguns ângstrons a dezenas de microns) de átomos depositados em uma superfície que serve de apoio, o substrato. Os estudos e aplicações relacionados a filmes finos surgiram com a necessidade da indústria e da eletrônica em reter um número cada vez maior de informação em componentes que ocupam o mínimo de espaço físico possível. Dependendo da aplicabilidade, os filmes podem ser fabricados por materiais do tipo isolantes, metais, semicondutores ou ainda, supercondutores. Além de serem usados como cobertura magnética em disco de gravação (no caso de armazenamento de dados), os filmes finos constituem ainda outros sistemas, tais como: contatos metálicos em dispositivos semicondutores, sensores poliméricos para detecção do amadurecimento de frutas [2], etc.

### 1.3 Propriedades magnéticas dos sólidos

Os fenômenos magnéticos são amplamente utilizados nos dias atuais e certamente em um futuro ainda muito distante. O uso de materiais magnéticos vai desde os pequenos imãs usados na confecção de rádios portáteis à complexos computadores com capacidade brutal de armazenamento de dados. Entender o comportamento microscópico desses materiais, a maneira pela qual seus momentos de dipolos magnéticos interagem entre si e como respondem a aplicação de um campo magnético externo, é imprescindível para possibilitar o desenvolvimento de novas técnicas e tecnologias. Assim, há necessidade de uma descrição teórica de como os átomos ou moléculas interagem uma com a outra em materiais que apresentam magnetismo para assim compreender os grandes avanços das pesquisas no que se refere às aplicações tecnológicas. Assim, apresentamos abaixo uma breve descrição de alguns conceitos básicos.

A matéria é constituída por átomos e nesses átomos estão presentes os elétrons em movimento. A cada elétron em movimento pode-se dizer que é uma micro corrente eletrônica (corrente amperiana), ao seu redor surge um campo magnético de origem também atômica, que deve-se ao **momento de dipolo magnético orbital**. O elétron é um monopolo em relação aos campos elétricos e um dipolo em relação aos campos magnéticos. Associado ao elétron existe um momento angular intrínseco, denominado spin ( $\vec{S}$ ), que induz o momento magnético de spin. Define-se **magnetização** como sendo o momento magnético resultante por unidade do volume do material.

As diversas classes de materiais podem apresentar momentos de dipolos magnéticos intrínsecos, também chamados de momentos magnéticos permanentes, ou induzidos devido a aplicação de um campo magnético externo. Ambos, na presença de um campo magnético externo, interagem com ele de forma a produzir um campo de indução própria que tenderá a modificar o campo original. Esse campo de **indução magnética B** é denominado **campo molecular**, e é dado por:

$$\overrightarrow{B} = \mu_0(\overrightarrow{H} + \overrightarrow{M}), \tag{1.1}$$

onde **M** é a magnetização, **H** é a intensidade de campo magnético aplicado,  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética no vácuo.

Verifica-se experimentalmente, que para certos materiais isotrópicos, a magnetização  $\mathbf{M}$  é dada por:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}, \qquad (1.2)$$

onde  $\chi$  é a susceptibilidade magnética, uma função resposta importantíssima no estudo de materiais magnéticos, que representa a variação da magnetização de um material quando este sofre variação de campo magnético externo. A magnetização **M** pode ser escrita em termos de  $\chi$  e **B**, substituindo a eq. (1.2) na eq. (1.1), que será dada por:

$$\overrightarrow{M} = \frac{\chi \overrightarrow{B}}{\mu_0 (1+\chi)}.$$
(1.3)

A forma pela qual os átomos ou moléculas se agrupam em um determinado sólido, a forma pela qual os elétrons que compõem um determinado átomo se distribuem na camada eletrônica, e a maneira com a qual os dipolos magnéticos interagem uns com os outros na ausência e presença de um campo magnético externo, são os fatores que nos possibilitam distinguir e estudar as várias classes de materiais magnéticos existentes.

#### 1.3.1 Materiais Diamagnéticos

No diamagnetismo não há dipolos magnéticos permanentes, isto é, as camadas dos átomos ou íons estão completas. Um exemplo são os gases nobres, He, Ne, Ar, Kr e Xe e também no caso de sólidos com ligações iônicas, tais como Kbr, LiF,  $CaF_2$  e NaCl [16]. Para cada órbita ao redor do núcleo de um átomo tem-se dois elétrons circulando em direções opostas, assim, esse emparelhamento explica o momento magnético nulo dos átomos na ausência de um campo magnético externo. Quando na presença de um campo magnético externo, haverá uma mudança nas velocidades dos elétrons, que de acordo com a lei de Lenz, surgirá uma corrente em sentido contrário nas órbitas do átomo que se oporá ao campo externo, a partir daí, a soma dos momentos magnéticos do material não será mais nula. Em outras palavras, a origem do efeito magnético é devido a quantização das órbitas dos elétrons ou a quantização da energia cinética dos elétrons relacionada ao movimento perpendicular a direção do campo magnético externo aplicado. Portanto, o diamagnetismo é um efeito quântico. Assim, materiais diamagnéticos apresentam uma resposta ao campo magnético externo, onde a magnetização tem direção contrária a do campo externo. Nos materiais puramente diamagnéticos a susceptibilidade é negativa e independe da temperatura.

Todos os materiais magnéticos na presença de um campo externo manifestam a propriedade diamagnética, tendo uma contribuição negativa para a susceptibilidade, que de uma maneira geral é desprezível à parcela positiva.

#### 1.3.2 Materiais Paramagnéticos

O paramagnetismo só é observado em materiais cujos átomos apresentam suas subcamadas eletrônicas parcialmente cheias, exemplos: V, Mn, Ti, Pt, Ale O, quando na presença de um campo magnético externo interagem produzindo o seu próprio campo magnético, o induzido, que então tenderão a se orientarem paralelamente, um em relação ao outro. Dessa maneira a energia é menor quando o momento de dipolo magnético é paralelo ao campo do que antiparalelo, assim a orientação paralela é preferida. Estes campos magnéticos quando somados (induzido e o aplicado), resulta em uma susceptibilidade positiva. A tendência dos momentos magnéticos de ficarem paralelos em relação ao campo é desfeita a medida que há um acréscimo de temperatura, levando a uma direção caótica dos momentos magnéticos. Assim, a susceptibilidade decresce com o crescimento da temperatura, obedecendo a *lei de Curie*, onde C é uma constante positiva característica de materiais paramagnéticos isolantes, que é dada por:

$$\chi = \frac{C}{T}.$$

Do ponto de vista teórico, a lei de Curie foi primeiramente descrita por Paul Langevin (1905), onde assumiu a existência de momentos magnéticos localizados, numa rede cristalina, não interagentes (livres). Usando a mecânica estatística clássica, com uma energia Zeeman do acoplamento dos momentos magnéticos com o campo externo, a lei de Curie foi reproduzida.

#### **1.3.3** Materiais Ferromagnéticos

Ferromagnetismo é a existência de uma magnetização espontânea em pequenas porções de um material, mesmo na ausência de um campo de indução externo. As principais características dos materiais ferromagnéticos são:

- magnetização varia com a temperatura, tendo seu valor máximo em T = 0K, e cai à zero a uma certa temperatura crítica  $T_c$ , denominada temperatura de Curie, conforme mostra esquematicamente na fig.(1.3).
- a partir da temperatura crítica o material passa a ser paramagnético, onde só é magnetizado na presença de um campo magnético externo.
- um material ferromagnético tem em seu volume pequenas regiões magnetizadas ao acaso que são os chamados domínios magnéticos (veja fig.1.4).



Figura 1.3: Variação térmica da magnetização espontânea relativa do ferro em função de Tc [17].



Figura 1.4: Domínios magnéticos de um material.

A energia térmica não é capaz de desmagnetizar um material que se encontra à temperatura normal. Uma das maneiras de se conseguir isso é aquecer o material até uma determinada temperatura, denominada temperatura de Curie, que a partir daí, o material passa a apresentar propriedades paramagnéticas. Na tabela 1.1, abaixo apresentamos as temperaturas de Curie de alguns materiais ferromagnéticos.

Assim como no paramagnetismo, o ferromagnetismo só é observado em materiais cujos átomos apresentam suas subcamadas parcialmente cheias. O que difere do paramagnetismo é o fato de que nos materiais paramagnéticos

Material	$T_c(K)$	Material	$T_c(K)$
Fe	1043	Cu <sub>2</sub> MnIn	500
Со	1388	EuO	77
Ni	627	EuS	16,5
Gd	293	MnAs	318
Dy	85	MnBi	670
$\mathrm{CrBr}_3$	37	$\mathrm{GdCl}_3$	2,2
Au <sub>2</sub> MnAl	200	$\mathrm{Fe}_{2}\mathrm{B}$	1015
Cu <sub>2</sub> MnAl	630	MnB	578

Tabela 1.1: Temperatura de Curie de alguns materiais ferromagnéticos [14, 15].

os momentos de dipolos magnéticos só respondem à aplicação de um campo magnético externo. Nos materiais ferromagnéticos existe os momentos de dipolos magnéticos permanentes que tem uma magnetização espontânea. Essa magnetização espontânea é explicada através da **interação de troca**, onde os elétrons 3d das subcamadas de um átomo de ferro, por exemplo, orientamse de modo que seus spins sejam paralelos, pois essa configuração minimiza a energia do átomo. Em geral, isso ocorre pois dois elétrons 3d ficam mais afastados (repulsão) se seus elétrons forem paralelos do que se forem antiparalelos (atração). Pois de acordo com o Princípio da Exclusão de Pauli, dois elétrons com o mesmo spin não podem ocupar o mesmo nível no mesmo instante. No entanto, este princípio não exclui a possibilidade da coexistência de dois elétrons com spins contrários, ou seja, um positivo (para cima) e um negativo (para baixo). Há assim, uma distância de equilíbrio em que o átomo ou molécula estará com mínima energia. Assim, a energia eletrostática de um sistema dependerá da orientação relativa entre os spins. A diferença de energia define a energia de troca.

Um material ferromagnético não se encontra magnetizado por completo. O que existe são pequenas regiões, os domínios magnéticos (fig.1.4), onde os momentos magnéticos estão todos apontando em uma certa direção preferencial. E que somando a magnetização total, chega-se a um número próximo de zero.

A interação dipolar é a principal responsável pelo surgimento dos domínios magnéticos. O que ocorre é que esses materiais quando expostos a um campo magnético externo e em seguida esse campo é retirado, surge dois efeitos. O primeiro é um crescimento das paredes de domínios onde em seu interior os momentos magnéticos estão alinhados na mesma direção que o campo aplicado e outro efeito é uma rotação na direção de magnetização, dentro de um domínio, no sentido do campo magnético externo.

O efeito da histerese (fig.1.5), quando a magnetização de um material não vai a zero quando se aplica um campo externo e em seguida esse campo é removido, é explicado através do fato de que os limites dos domínios não retornam a forma original quando se é aplicado um campo externo e em seguida removido. Fator esse devido as imperfeições da amostra, tais como impurezas.

15



Figura 1.5: Efeito da histerese magnética.

### 1.4 Interações Competitivas no Filme

Uma descrição teórica realista desses sistemas deve incluir além de uma interação de troca, que é de curto alcance, uma interação dipolar e de uma anisotropia magnetocristalina. Pois apenas interação de troca não é suficiente para estabilizar a ordem de longo alcance em sistemas bidimensionais à temperatura finita. A existência da ordem magnética de longo alcance surge de uma combinação entre interações dipolar e a anisotropia magnetocristalina. Estas interações quando presentes em um sistema, quebram a invariância rotacional da interação de troca. A interação dipolar introduz interações de longo alcance.

### 1.4.1 Interação de Troca

Heisenberg [8] e Dirac propuseram no início deste século um formalismo para tratar o magnetismo forte dos materiais, sendo representado pelo Hamiltoniano:

$$H_{ex} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j , \qquad (1.4)$$

sendo  $J_{ij}$  a energia de troca entre dois pares de íons i e j, a soma se estende a todos os pares de spins localizados nos sítios i e j da rede.  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ o operador de spin no sítio i da rede cristalina e  $S_i^{\nu}(\nu = x, y, z)$  é a componente  $\nu$  do operador de spin no sítio i. A fim de elucidar a natureza da interação de troca, consideraremos um modelo simples de dois elétrons com um Hamiltoniano não dependente do spin, descrito por:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) + V_{12}(r) , \qquad (1.5)$$

onde  $\mathbf{p}_i(i = 1, 2)$  é o vetor momento linear do elétron i, m sua massa,  $V_i(\mathbf{r}_i)$ o potencial de ligação do elétron i = 1, 2 ao núcleo e  $V_{12}(r)$  o potencial de interação  $(r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  entre eles. O hamiltoniano dado pela eq. (1.5) não contém termos que envolve o operador de spin, assim, a função de onda espacial é obtida da equação de Schoedinger estacionária

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(1, 2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) , \qquad (1.6)$$

sendo  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  a auto-função de onda e E(1, 2) a auto-energia dos dois elétrons. Segundo o princípio da exclusão de Pauli, dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos não podem ocupar o mesmo estado quântico ao mesmo tempo, como consequência a função de onda total, que é o produto da espacial com *spinor*, isto é:  $\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(1, 2)$ , tem que ser antisimétrica ( $\Psi_T(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ). Para o termo de spin, ausente no Hamiltoniano (1.5), podemos obter duas configurações de *spinores*:

$$\chi_s(S=0, M=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi(\uparrow\downarrow) - \chi(\downarrow\uparrow) \right] (SINGLETO), \qquad (1.7)$$

$$\chi_t(S=1,M) = \begin{cases} \chi(\uparrow\uparrow), & M = 1\\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi(\uparrow\downarrow) + \chi(\downarrow\uparrow)], & M = 0 \text{ TRIPLETO}, \\ \chi(\downarrow\downarrow), & M = -1 \end{cases}$$
(1.8)

sendo  $\chi(m_1, m_2)$  o *spinor* dos dois elétrons (spin 1/2) com componentes z do spin  $m_1, em_2$   $[m_i = +1 :\uparrow e - 1 :\downarrow] e \chi(S, M)$  o *spinor* soma, podendo ser singleto-antisimétrico eq. (1.7) ou tripleto-simétrico eq. (1.8).

A solução da equação diferencial eq.(1.6) fornece a função de onda espacial, porém devido a interação entre os elétrons  $V_{12}(r)$  a solução exata não é possível. Potenciais não solúveis são tratados na mecânica quântica, via teoria de perturbação estacionária. Sendo nossa perturbação, o potencial  $V_{12}(r)$ , na ausência deste potencial o sistema fica solúvel, devido ao fato do objetivo ser a solução de uma equação parcial característica para os dois elétrons idênticos a resolver não acoplados, do tipo:

$$H_0(i)\Phi_n(\mathbf{r}_i) = E_n^0(i)\Phi_n(\mathbf{r}_i), \qquad (1.9)$$

com  $H_0(=1,2)$  dado por:

$$H_0(i) = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_i(\mathbf{r}_i)$$

sendo  $\Phi_n(\mathbf{r}_i)$  a auto-função de onda espacial de um elétron i no estado quântico com auto-energia  $E_n^0(i)$ .

Devido ao de interação  $V_{12}(r)$ , o sistema só poderá ser resolvido aproximadamente. Utilizamos o método da teoria de perturbação degenerada de primeira ordem, tendo como escopo a resolução do seguinte determinante para obtenção das auto-energias:

$$0 = \begin{pmatrix} \langle H \rangle_{11} - E(1,2) & \langle H \rangle_{12} \\ \langle H \rangle_{21} & \langle H \rangle_{22} - E(1,2) \end{pmatrix} .$$
(1.10)

o elemento da matriz  $\langle H\rangle_{ij}$  é definido por:

$$\langle H \rangle_{ij} = \int \Psi_i^{0*}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) V_{12}(r) \Psi_j^0(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2, \qquad (1.11)$$

usando as definições (1.9) e (1.11), obtemos:

$$\langle H \rangle_{11} = \langle H \rangle_{22} = E_{nl}^0(1,2) + K,$$

$$\langle H_{12} \rangle = \langle H_{21} \rangle = J,$$

sendo K e J definidos por:

$$K = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}_1) \Phi_l^*(\mathbf{r}_2) V_{12}(r) \Phi_n(\mathbf{r}_1) \Phi_l(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2$$

е

$$J = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}_1) \Phi_l^*(\mathbf{r}_2) V_{12}(r) \Phi_n(\mathbf{r}_2) \Phi_l(\mathbf{r}_1) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2$$
(1.12)

a última equação (1.12) denominada integral de *exchange* ou de troca. Resolvemos seu determinante (1.10), afim de obtermos seu significado físico, obtendo

$$E_1(1,2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J$$
(1.13)

com auto-função associada

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \Phi_n(\mathbf{r}_1)\Phi_l(\mathbf{r}_2) + \Phi_n(\mathbf{r}_2)\Phi_l(\mathbf{r}_1) \right] \quad \text{SIMÉTRICA}$$
(1.14)

е

$$E_2(1,2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J$$
(1.15)

com auto-função associada

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \Phi_n(\mathbf{r}_1) \Phi_l(\mathbf{r}_2) - \Phi_n(\mathbf{r}_2) \Phi_l(\mathbf{r}_1) \right] \quad \text{ANTISIMÉTRICA} \quad (1.16)$$

De acordo com o princípio da exclusão de Pauli, que exige que as auto-funções de onda total dos férmions sejam antisimétricas, então dos reaultados (1.7), (1.8), (1.14) e (1.16) obtemos para os dois elétrons as seguintes auto-funções com os respectivos auto-valores (auto-energa):

$$\Psi_{T}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = \begin{cases} \Psi_{1}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}).\chi_{s}(S=0,M=0) \longrightarrow E_{1}^{S}(1,2) = E_{n}^{0}(1) + E_{l}^{0}(2) + K + J \quad (a) \\ \Psi_{2}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}).\chi_{t}(S=1,M) \longrightarrow E_{2}^{T}(1,2) = E_{n}^{0}(1) + E_{l}^{0}(2) + K - J \quad (b) \\ (1.17) \end{cases}$$

Seja  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$  o spin total dos dois elétrons, então  $\mathbf{S}^2, \mathbf{S}_1^2 \in \mathbf{S}_2^2$ apresentam a autofunção total  $\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  com os respectivos autovalores  $S(S+1), S_1(S_1+1) \in S_2(S_2+1)$  ( $\hbar \equiv 1, S_1 = S_2 = 1/2$ ). Utilizando a definição do spin total nas eq.(1.17), obtemos:

$$\mathbf{S}^{2}\Psi_{T}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = (\mathbf{S}_{1}^{2} + \mathbf{S}_{2}^{2} + 2\mathbf{S}_{1}\mathbf{S}_{2})\Psi_{T}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = S(S+1)\Psi_{T}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}),$$

definindo o operador de spin de Pauli  $\sigma = 2\mathbf{S}$ , da expressão anterior encontramos a seguinte relação:

$$\frac{1}{2}(1+\sigma_1.\sigma_2)\Psi_T(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = [S(S+1)-1]\Psi_T(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \begin{cases} -\Psi_T(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) & S=0\\ \Psi_T(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) & S=1. \end{cases}$$
(1.18)

As auto-energias (1.13) e (1.15) podem ser reescritas por

$$E(S) = \begin{cases} E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J & S = 0\\ E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J & S = 1 \end{cases}$$
(1.19)

substituindo (1.18) em (1.19), obtemos um Hamiltoniano efetivo de spin, que é dado por:

$$H(S) = W - \frac{J}{2}\sigma_1 \sigma_2,$$

onde  $W = H_0(1) + H_0(2) + K - J/2$ . Das relações (1.19) temos que o exchange pode ser obtido pela diferença

$$J = \frac{1}{2} \left[ E(S=0) - E(S=1) \right].$$

Fisicamente, o estado tripleto corresponde ao estado dos spins paralelos ( $\uparrow\uparrow$ ) e o estado singleto ao estado em que os spins estão antiparalelos ( $\uparrow\downarrow$ ). Nos sistemas ferromagnéticos, o coeficiente de troca é positivo, previlegiando o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos de spin o qual leva a um estado de mínima energia. A interação de troca decai rapidamente (exponencial) com a separação entre os sítios, contrastando com a interação coulombiana que cai mais lentamente ( $\simeq \frac{1}{r}$ ). Razão esta é que *J* contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, sendo assim *J* dependerá do envolvimento das funções de onda, envolvimento esse decrescente exponencialmente com a distância (r) [9]. Esse Hamiltoniano é conhecido como modelo de Heisenberg isotrópico, pois as três direções no espaço apresentam a mesma probabilidade de orientação:  $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$ .

#### 1.4.2 Interação Dipolar

Em todos os sistemas reais, além da interação de troca (curto alcance), uma de longo alcance sempre estará presente entre os momentos magnéticos dos spins. A interação dipolar (cuja dedução é obtida facilmente do magnetismo) é representada pela expressão:

$$H_{dd} = \frac{1}{2}g^2\mu_B^2 \sum_{i\neq j} \sum_j \frac{1}{R_{ij}^3} \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{3}{R_{ij}^2} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) \left( \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) \right\}, \quad (1.20)$$

onde  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$  é o vetor posição que separa os sítios i e j. A soma é feita sobre todos os pares possíveis dos sítios da rede e  $\mathbf{R}_{ij}$  é o vetor conectando o sítio i ao j. A divisão por 2 acontece quando a soma dupla é realizada, que é devida a igualdade da energia na interação de dois momentos, ou seja,  $E_{i,j} = E_{j,i}$ , bastando dividir a energia total por 2. Ainda na eq.(1.20), o ângulo entre o momento e a distância entre dois momentos ( $\mathbf{S}_i \in \mathbf{R}_{ij}$ ) que minimiza a energia é 0°.

O nosso sistema a ser estudado, filmes finos, são sistemas que apresentam simetria rotacional bidimensional. A interação dipolar pode estabilizar a ordem de longo alcance à uma temperatura finita [18, 4]. A interação dipolar é de longo alcance, e decresce lentamente com o cubo da distância. Por ser uma interação fraca ela é rotineiramente negligenciada em muitos estudos teóricos de sistemas magnéticos. Um dos motivos para isso se dá ao fato dela ser de magnitude muito pequena (da ordem de  $10^{-4}$ ) se comparada a interação de troca. Em nosso sistema, a interação dipolar desempenha um papel importante para estabilizar a ordem de longo alcance à uma temperatura finita.

#### 1.4.3 Anisotropia Magnetocristalina

Quando átomos se agrupam formando um cristal, sua estrutura final tem eixos que caracterizam a simetria do cristal constituído. Se esse grupo de átomos que constitui a rede representa um momento magnético total não nulo, esse momento não terá necessariamente a mesma direção do eixo de simetria do cristal. As curvas de magnetização mudam de acordo com os eixos de simetria do cristal. Anisotropia é a característica de um meio ou material em que certas propriedades físicas serão diferentes conforme as diversas direções. Anisotropia magnetocristalina seria uma orientação preferencial da magnetização em relação aos planos ou eixos do cristal pelo qual o material é formado. Esta anisotropia é proveniente de diversos fatores, tais como: forma da amostra, estrutura cristalina, *stress* interno e temperatura. Através da interação spin-orbita, interação na qual o spin eletrônico ligado no núcleo sente a ação do campo magnético gerado pelo núcleo em virtude de seu movimento relativo entre os elétrons e o núcleo, descreveremos as orientações preferenciais da magnetização em relação aos planos ou eixos do cristal. Essa interação pode ser representada pelo Hamiltoniano

$$\widehat{H}_{\mathbf{L},\mathbf{S}} = \sum_{i} \varepsilon(\mathbf{r}_{i}) \mathbf{L}_{i}.\mathbf{S}_{i}, \qquad (1.21)$$

sendo  $\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{d\Theta(r)}{dr_i}$ ,  $\mathbf{L}_i$  o operador de momento angular e  $\mathbf{S}_i$  o operador de spin no sítio i e  $\Theta(\mathbf{r})$  o potencial eletrostático. Fazendo uso da teoria de perturbação de  $2^a$  ordem, a eq. (1.21) é reescrita

$$\widehat{H}_{\mathbf{L}.\mathbf{S}} = \sum_{i,(\alpha,\beta)} \Lambda^{i}_{\alpha\beta} S^{\alpha}_{i} S^{\beta}_{i}, \qquad (1.22)$$

onde

$$\Lambda^{i}_{\alpha\beta} = 2\varepsilon^{2} \sum_{l\neq p} \frac{\langle p|L^{\alpha}_{i}|l\rangle \left\langle l|L^{\beta}_{i}|p\right\rangle}{E^{0}_{p} - E^{0}_{l}}, \qquad (1.23)$$

o Hamiltoniano (1.22) é deduzido levando em consideraação propriedades de simetria em um caso particular que leva em consideração apenas termos diagonais do tensor  $\Lambda^i_{\alpha\beta} = A_i \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} - E_i [\delta_{\alpha x} \delta_{\beta x} - \delta_{\alpha y} \delta_{\beta y}]$ , o que resulta na anisotropia ortorrômbica

$$\widehat{H}_{ion} = -\sum_{i} A_i (S_i^z)^2 + \sum_{i} E_i \left[ (S_i^x)^2 - (S_i^y)^2 \right], \qquad (1.24)$$

o Hamiltoniano (1.24) é conhecido na literatura como anisotropia de íonúnico, importantíssima para o caso em que S = 1/2, onde reduz-se a uma constante. Que para  $A_i = 0$ , a eq.(1.24) torna-se o caso da anisotropia uniaxial. Podendo o Hamiltoniano de Heisenberg (1.4) ser escrito como

$$H_{ex} = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i A_i (S_i^z)^2 , \qquad (1.25)$$
onde A é a constante anisotrópica. No caso em que tem-se A = 0, o modelo de Heisenberg isotrópico é recuperado, caracterizado por não apresentar uma direção preferencial para a magnetização. Se  $0 \le A < 1$ , tem-se o modelo de Heisenberg com anisotropia de plano fácil. A anisotropia induz os spins a se alinharem perpendicularmente ao eixo z, estado esse que minimiza a energia do sistema, caracterizado por um singleto ( $S^z = 0$ ). Quando A < 0, os spins tem a preferência de se direcionarem na direção do eixo z, simetria essa conhecida como eixo fácil [13].

### Capítulo 2

# Efeitos da Interação Dipolar em Filmes Magnéticos Acima da Temperatura Crítica

### 2.1 Modelo e Método de Cálculo

Neste capítulo abordaremos os efeitos da interação dipolar nas propriedades magnéticas de um filme fino ferromagnético acima da temperatura crítica, devido a aplicação de um campo magnético externo. Consideremos o filme imerso em um meio não magnético, sendo representado pela Hamiltoniana de Heisenberg acrescida do termo de Zeeman e da interação dipolar, ou seja

$$H = H_1 + H_2 + H_3 , \qquad (2.1)$$

onde  $H_1$  é a Hamiltoniana de Heisenberg discutida no capítulo anterior, dada pela espressão:

$$H_1 = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \ . \tag{2.2}$$



Figura 2.1: Geometria utilizada para estudar a bicamada magnética (plano yz).

onde o operador  $\mathbf{S}_n$  representa o momento angular efetivo do íon localizado no sítio n da rede, em unidades de  $\hbar$ . Introduzindo a relação

$$S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y , \qquad (2.3)$$

teremos as seguintes relações de comutação entre os operadores de spins:

$$[\mathbf{S}_i^-, \mathbf{S}_j^+] = 2\mathbf{S}_i^z \delta_{ij} \quad e \quad [\mathbf{S}_i^\pm, \mathbf{S}_j^z] = \mp \mathbf{S}_i^\pm \delta_{ij} \quad , \tag{2.4}$$

em termos do operadores  $S_i^\pm,$ o Hamiltoniano de troca, eq.(2.2), será reescrito por

$$H_1 = -\sum_{i \neq j} \sum_j J_{ij} \left[ \frac{1}{2} \left( S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) + S_i^z S_j^z \right].$$
(2.5)

O termo de Zeeman representa o efeito da aplicação de um campo magnético externo na direção do eixo z, e é dado por

$$H_2 = -h\sum_i S_i^z , \qquad (2.6)$$

este termo garante que no estado fundamental (T = 0), os momentos de dipolos magnéticos estejam alinhados na direção do eixo z. Nesta equação,

temos que  $h = g\mu_B H_0$ , onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr,  $H_0$  o campo magnético externo e g o fator de Landé .

Finalmente, o termo da interação dipolar (também discutido no capítulo anterior) é descrito, pela a expressão:

$$H_3 = \frac{1}{2}g^2\mu_B^2 \sum_{i\neq j} \sum_j \frac{1}{R_{ij}^3} \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{3}{R_{ij}^2} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) \left( \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) \right\}.$$
 (2.7)

O vetor  $\mathbf{R}_{ij}$  será reescrito em termos das coordenadas circulares, onde  $\mathbf{R}_{ij}$  é a posição relativa dos sítios i e j, com  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ . Fazendo os produtos escalares, definindo  $R_{ij}^{\pm} = R_{ij}^x \pm i R_{ij}^y$ , obtemos

$$\left( \mathbf{S}_{i} \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) = \frac{1}{2} \left( S_{i}^{+} R_{ij}^{-} + S_{i}^{-} R_{ij}^{+} \right) + S_{i}^{z} R_{ij}^{z}$$
$$\left( \mathbf{S}_{j} \cdot \mathbf{R}_{ij} \right) = \frac{1}{2} \left( S_{j}^{+} R_{ij}^{-} + S_{j}^{-} R_{ij}^{+} \right) + S_{j}^{z} R_{ij}^{z}.$$

Em termos das coordenadas circulares, o termo da interação dipolar é reescrito da seguinte forma:

$$H_{3} = \frac{\gamma^{2}}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j} \left\{ \frac{1}{R_{ij}^{3}} \left( 1 - \frac{3Z_{ij}^{2}}{R_{ij}^{2}} \right) \left[ S_{i}^{z} S_{j}^{z} - \frac{1}{4} \left( S_{i}^{+} S_{j}^{-} + S_{i}^{-} S_{j}^{+} \right) \right] - \frac{3}{4} \left[ S_{i}^{+} S_{j}^{+} B_{ij} + S_{i}^{-} S_{j}^{-} B_{ij}^{+} \right] - \frac{3}{2} \left[ \left( S_{i}^{+} S_{j}^{z} + S_{i}^{z} S_{j}^{+} \right) U_{ij} + \left( S_{i}^{-} S_{j}^{z} + S_{i}^{z} S_{j}^{-} \right) U_{ij}^{+} \right] \right\},$$

$$(2.8)$$

sendo

$$Z_{ij} = R_{ij}^{z}$$
$$B_{ij} = \frac{\left(R_{ij}^{-}\right)^{2}}{|R_{ij}|^{5}} \qquad U_{ij} = \frac{\left(R_{ij}^{-}Z_{ij}\right)}{|R_{ij}|^{5}},$$

onde  $\gamma = g \mu_B,$ a Hamiltoniana de nosso sistema é dada por

$$H = H_1 + H_2 + H_3$$

ou seja

$$H = -\sum_{i \neq j} \sum_{j} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} \left( S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) + S_i^z S_j^z \right] - \gamma H_0 \sum_i S_i^z + \frac{\gamma^2}{2} \sum_{i \neq j} \sum_j \left\{ \frac{1}{R_{ij}^3} \left( 1 - \frac{3Z_{ij}^2}{R_{ij}^2} \right) \left[ S_i^z S_j^z - \frac{1}{4} \left( S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) \right] - \frac{3}{4} \left[ S_i^+ S_j^+ B_{ij} + S_i^- S_j^- B_{ij}^+ \right] - \frac{3}{2} \left[ \left( S_i^+ S_j^z + S_i^z S_j^+ \right) U_{ij} + \left( S_i^- S_j^z + S_i^z S_j^- \right) U_{ij}^+ \right] \right\}.$$
(2.9)

## 2.2 As equações do movimento no método das funções de Green-Zubarev

As propriedades termodinâmicas do nosso sistema serão obtidas através da utilização do método das funções de Green-Zubarev, o qual está discutido detalhadamente no apêndice A. Portanto, estamos interessados no cálculo da magnetização,  $(\langle S_n^z \rangle)$ . Para este fim a trasformada de Fourier temporal da equação de movimento das Funções de Green (F.G.), onde H é a Hamiltoniana do sistema, é dada pela expressão:

$$\omega\langle\langle S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle [S_l^+, S_m^-] \rangle + \langle\langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle\rangle_\omega.$$
(2.10)

Para escrevermos a transformada acima, é necessário escrever o comutador  $[S_l^+, H]$ . Assim aplicando as relações de comutação que aparecem em (2.4), e após realizarmos as respectivas somas sobre os sítios da rede encontramos a expressão:

$$[S_{l}^{+}, H] = -2\sum_{j} J_{lj} \left( S_{j}^{+} S_{l}^{z} - S_{j}^{z} S_{l}^{+} \right) + \gamma H_{0} S_{l}^{+} + \frac{\gamma^{2}}{2} \sum_{j} \left\{ \frac{1}{R_{lj}^{3}} \left( 1 - \frac{3Z_{lj}^{2}}{R_{lj}^{2}} \right) \left( -2S_{j}^{z} S_{l}^{+} - S_{j}^{+} S_{l}^{z} \right) - 3(S_{j}^{-} S_{l}^{z}) B_{lj}^{+} - -3 \left[ \left( -S_{j}^{+} S_{l}^{+} \right) U_{lj} + \left( -S_{j}^{-} S_{l}^{+} + 2S_{l}^{z} S_{j}^{z} \right) U_{lj}^{+} \right] \right\}.$$
(2.11)

Portanto, substituindo a eq. (2.11) em (2.10):

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} &= \frac{1}{\pi}\langle S_{l}^{z}\rangle\delta_{lm} + \gamma H_{0}\langle\langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} \\
&- 2\sum_{j\neq l} J_{lj} \left[\langle\langle S_{l}^{z}S_{j}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} - \langle\langle S_{j}^{z}S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega}\right] \\
&- \frac{\gamma^{2}}{2}\sum_{j\neq l} \left\{\frac{1}{R_{lj}^{3}} \left(1 - \frac{3Z_{lj}^{2}}{R_{lj}^{2}}\right) \left[\langle\langle S_{l}^{z}S_{j}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} + 2\langle\langle S_{j}^{z}S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega}\right] \\
&+ 3B_{lj}^{+}\langle\langle S_{l}^{z}S_{j}^{-}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} - 3U_{lj}^{+} \left[-2\langle\langle S_{l}^{z}S_{j}^{z}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega} \\
&+ \langle\langle S_{j}^{-}S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega}\right] - 3U_{lj}[\langle\langle S_{j}^{+}S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{\omega}]\right\}, 
\end{aligned}$$
(2.12)

onde

$$\langle [S_l^+, S_m^-] \rangle = 2 \langle S_l^z \rangle \delta_{lm}.$$

Na eq. (2.12) a função de Green, no segundo termo do membro direito, contém um número maior de operadores do que a função de Green inicial (lado esquerdo). Portanto, seria necessário escrever uma equação de movimento para  $\langle \langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle \rangle_{\omega}$  semelhante à eq. (2.10), porém resultaria em uma nova equação com um número de operadores ainda maior  $\langle \langle [[S_l^+, H], H]; S_m^- \rangle \rangle_{\omega}$ . Novas repetições do processo resultaria em uma cadeia infinita de equações acopladas. Assim, são necessárias certas condições iniciais e algumas aproximações para desacoplar esse conjunto de equações. Uma aproximação muito conhecida é a aproximação das fases aleatórias (*Randon Phase Aproximation* - RPA). Neste trabalho uma adaptação da RPA será utilizada para o caso de sistema com superfície (filmes finos).

A primeira aproximação em nosso trabalho, na eq. (2.12) desprezamos as funções de Green do tipo

$$\langle \langle S_l^z S_j^z; S_m^- \rangle \rangle, \langle \langle S_j^- S_l^+; S_m^- \rangle \rangle$$
 e  $\langle \langle S_j^+ S_l^+; S_m^- \rangle \rangle$ 

Esta é uma aproximação usual, na qual se despreza as flutuações de ordem mais alta. 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 [18], o qual definiremos por:

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

portanto, a eq. (2.12) se reduz a

$$\omega \langle \langle S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} + \gamma H_0 \langle \langle S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} 
- 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[ \langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} - \langle \langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} \right] 
- \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{R_{lj}^3} \left( 1 - \frac{3Z_{lj}^2}{R_{lj}^2} \right) \left[ \langle \langle S_l^z S_j^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} \right] 
+ 2 \langle \langle S_j^z S_l^+; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} \right] + 3B_{lj}^+ \langle \langle S_l^z S_j^-; S_m^- \rangle \rangle_{\omega} \right\}. \quad (2.13)$$

A segunda aproximação é a LRPA [25], é uma extensão da RPA [22], para um sistema semi-infinito, considerando que o sistema seja formado por uma superposição de redes planares, onde a média  $\langle S_l^z \rangle$  varia plano à plano, sendo no entanto, constante em um mesmo plano. O que nos permite escrever:

$$\langle S_{\mathbf{l}}^{z} \rangle = \langle S_{\mathbf{l}\parallel,l}^{z} \rangle = \langle S_{l}^{z} \rangle, \qquad (2.14)$$

o que fica evidente que a média de  $S_l^z$ , não depende do vetor  $\mathbf{L}_{\parallel}$ , isto é, só depende do plano. Dessa maneira, aplicamos a segunda aproximação, a LRPA à eq. (2.13) obtemos

$$\omega G_{lm}^{+-}(\omega) = \frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} - 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[ \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) - \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{+-}(\omega) \right] 
+ \gamma H_0 G_{lm}^{+-}(\omega) - \frac{\gamma}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{\mathbf{R}_{lj}^3} \left( 1 - \frac{3Z_{lj}^2}{\mathbf{R}_{lj}^2} \right) \left[ \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) \right] 
+ 2 \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{+-}(\omega) \right] + 3B_{lj}^+ \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) \right\},$$
(2.15)

onde

 $G_{mn}^{+-}(\omega) = \langle \langle S_m^+; S_n^- \rangle \rangle_{\omega}.$ 

Na equação anterior (2.15) aparecem dois tipos de funções de Green,  $G^{+-}$  e  $G^{--}$ . Este fato nos obriga a escrever a equação de movimento para a transformada de Fourier da função de Green  $G^{--}$ , dada por:

$$\omega \langle \langle S_l^-; S_m^- \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [S_l^-, S_m^-] \rangle + \langle \langle [S_l^-, H]; S_m^- \rangle \rangle_\omega.$$
(2.16)

Seguindo os mesmos procedimentos anteriores; a eq. (2.16) resultará

$$\omega G_{lm}^{--}(\omega) = 2 \sum_{j \neq l} J_{lj} \left[ \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) - \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{--}(\omega) \right] - \gamma H_0 G_{lm}^{--}(\omega) 
+ \frac{\gamma}{2} \sum_{j \neq l} \left\{ \frac{1}{\mathbf{R}_{lj}^3} \left( 1 - \frac{3Z_{lj}^2}{\mathbf{R}_{lj}^2} \right) \left[ \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{--}(\omega) \right] 
+ 2 \langle S_j^z \rangle G_{lm}^{--}(\omega) \right] + 3B_{lj} \langle S_l^z \rangle G_{jm}^{+-}(\omega) \right\}.$$
(2.17)

Em sistemas que apresentam superfície, a simetria translacional tridimensional é destruída. Porém, em cada plano é preservada a simetria translacional bidimensional permitindo introduzir a transformada de Fourier espacial da equação de movimento para a função de Green  $G^{+-}$  e  $G^{--}$ , em relação à  $(R_l - R_m)$ , a qual aparecerá a dependência das funções de Green em  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , que são vetores de onda localizados dentro da primeira zona de Brilloiun dos planos paralelos. Dessa forma, todas as funções de Green que aparecem em nosso sistema de equações tornam-se independentes dos pontos da rede, dependendo somente de  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . Assim, tomando a transformada de Fourier das eqs. (2.15) e (2.17) em relação, ( $\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m$ ), obtemos respectivamente

$$\frac{1}{\pi} \langle S_l^z \rangle \delta_{lm} = \left\{ \omega - \gamma H_0 - 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(0) \langle S_j^z \rangle + \gamma^2 \sum_j \left[ \tilde{U}_{lj}(0) - \tilde{V}_{lj}(0) \right] \langle S_j^z \rangle \right\} \tilde{G}_{lm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \\
+ \left\{ 2 \sum_j \tilde{J}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle + \frac{\gamma^2}{2} \sum_j \left[ \tilde{U}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \tilde{V}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] \langle S_l^z \rangle \right\} \tilde{G}_{jm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) \\
+ \frac{3\gamma^2}{2} \sum_j B_{lj}^+(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_l^z \rangle \tilde{G}_{jm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}), \qquad (2.18)$$

е

$$0 = \left\{ \omega + \gamma H_{0} + 2 \sum_{j} \tilde{J}_{lj}(0) \langle S_{j}^{z} \rangle - \gamma^{2} \sum_{j} \left[ \tilde{U}_{lj}(0) - \tilde{V}_{lj}(0) \right] \langle S_{j}^{z} \rangle \right\} \tilde{G}_{lm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) - \left\{ 2 \sum_{j} \tilde{J}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_{l}^{z} \rangle + \frac{\gamma^{2}}{2} \sum_{j} \left[ \tilde{U}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \tilde{V}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] \langle S_{l}^{z} \rangle \right\} \tilde{G}_{jm}^{--}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) - \frac{3\gamma^{2}}{2} \sum_{j} B_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) \langle S_{l}^{z} \rangle \tilde{G}_{jm}^{+-}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}).$$

$$(2.19)$$

Após tomarmos as transformadas de Fourier, utilizamos algumas simplificações onde aparecem termos que são representados por somas sobre sítios da rede:

$$\begin{split} \tilde{U}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \sum_{j_{\parallel}} \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{j}_{\parallel} - \mathbf{l}_{\parallel})}}{\hat{R}_{lj}^{3}}, \\ \tilde{V}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \frac{3Z_{lj}^{2}e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{j}_{\parallel} - \mathbf{l}_{\parallel})}}{\hat{R}_{lj}^{5}}, \end{split}$$

$$\tilde{B}_{lj}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{j_{\parallel}} B_{lj} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{j}_{\parallel} - \mathbf{l}_{\parallel})}.$$
(2.20)

As eqs. (2.18) e (2.19) formam um sistema de equações que de agora em diante passará a ser o nosso objeto de análise. Compactando essas equações, fazendo:

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

$$\tau = \omega - \gamma H_0 ,$$
  

$$\tau' = \omega + \gamma H_0 .$$
 (2.21)  

$$\langle S_1^z \rangle = \langle S_2^z \rangle = S ,$$
  

$$A_{11} = A_{22} ; A_{12} = A_{21} ,$$
  

$$J_{11} = J_{22} ; J_{12} = J_{21} ,$$
  

$$B_{11} = B_{22} ; B_{21} = B_{12} .$$

Substituindo essas definições e fazendo a soma em j<br/> para l=1 e l=2, obtemos:

$$(\tau + \lambda \sigma)G_{1m}^{+-} + \sigma \beta G_{2m}^{+-} + \sigma b_1^* G_{1m}^{--} + \sigma b_2^* G_{2m}^{--} = \sigma \delta_{1m} ,$$

$$(\tau + \lambda \sigma)G_{2m}^{+-} + \sigma \beta G_{1m}^{+-} + \sigma b_1^* G_{2m}^{--} + \sigma b_2^* G_{1m}^{--} = \sigma \delta_{2m} ,$$

$$(\tau' - \lambda \sigma)G_{1m}^{--} - \sigma \beta G_{2m}^{--} - \sigma b_1 G_{1m}^{+-} - \sigma b_2 G_{2m}^{+-} = 0 ,$$

$$(\tau' - \lambda \sigma)G_{2m}^{--} - \sigma \beta G_{1m}^{--} - \sigma b_2 G_{1m}^{+-} - \sigma b_1 G_{2m}^{+-} = 0.$$

$$(2.22)$$

Em cada uma das equações acima, fazendo m=1 e m=2, e lembrando que

$$\delta_{yx} = \begin{cases} 1, & \text{se } x = y \\ 0, & \text{se } x \neq y \end{cases}$$

as eqs. (2.22) resultarão

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

Estas equações podem ser escritas na seguinte forma matricial:

$$\Delta X = \Upsilon , \qquad (2.24)$$

sendo

$$\Delta = \begin{pmatrix} \tau + \lambda \sigma & \sigma \beta & \sigma b_1^* & \sigma b_2^* \\ \sigma \beta & \tau + \lambda \sigma & \sigma b_2^* & \sigma b_1^* \\ -\sigma b_1 & -\sigma b_2 & \tau' - \lambda \sigma & -\sigma \beta \\ -\sigma b_2 & -\sigma b_1 & -\sigma \beta & \tau' - \lambda \sigma \end{pmatrix}, \qquad (2.25)$$
$$X = \begin{pmatrix} G_{11}^{+-} & G_{12}^{+-} \\ G_{21}^{+-} & G_{22}^{+-} \\ G_{21}^{--} & G_{22}^{--} \end{pmatrix}, \qquad (2.26)$$
$$\Upsilon = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (2.27)$$

As raízes do determinante da matriz  $\Delta$  nos fornece a relação de dispersão, a qual será utilizada para estudar a estabilização da ordem de longo alcance em filmes finos.

#### 2.3 Cálculo da Magnetização

Dentro do formalismo das funções de Green-Zubarev (ver apêndice A), a magnetização em função dos parâmetros da Hamiltoniana é dada por

$$S = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{1 + 2\Phi(S)} \right).$$
(2.28)

A resolução autoconsistente da eq. (2.28) fornece a magnetização em função da temperatura para vários valores do parâmetro adimensional ed, dado por  $ed=\frac{\gamma^2}{J_\parallel a^3}$ , sendo

$$\Phi(S) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\xi \to 0^+} \int d\omega \left\{ \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \frac{Im \,\Delta^{-1}(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega + i\xi)_{ll}}{e^{\beta\omega} - 1} \right\} \,.$$
(2.29)

Assim, para realizar este cálculo é necessário determinar os elementos de matriz  $\Delta_{ll}^{-1}$  que aparecem na expressão de  $\Phi(S)$ . Partimos da matriz inversa, definida por

$$(\Delta^{-1})_{lm} = \frac{adj\Delta_{lm}}{det\Delta}, \qquad (2.30)$$

onde  $adj\Delta_{lm}$  é a matriz dos cofatores de  $\Delta$ . Na prática, precisamos somente calcular o elemento  $(\Delta^{-1})_{11}$ , pois a magnetização é a mesma em ambos os planos, e teremos

$$det \Delta = \omega^{4} - 2\omega^{2}(a_{0}^{2} + a_{1}^{2} - b_{0}^{2} - b_{1}^{*}b_{1} + H^{2} - 2Ha_{0}) + (a_{0}^{2} + a_{1}^{2} - b_{0}^{2} - b_{1}^{*}b_{1})^{2} - (b_{0}^{*}b_{1} + b_{1}^{*}b_{0} - 2a_{0}a_{1})^{2} + H^{4} - 2H^{2}b_{0}^{2} - 4a_{0}H^{3} + 6H^{2}a_{0} - 2H^{2}b_{1}^{*}b_{1} - 2a_{1}^{2}H^{2} - 4Ha_{0}^{3} - 4Ha_{1}b_{1}^{*}b_{0} - 4Ha_{1}b_{0}^{*}b_{1} + 4Ha_{0}b_{1}^{*}b_{1} + 4Ha_{0}b_{0}^{2} + 4Ha_{0}a_{1}^{2}, \qquad (2.31)$$

e o cofator  $C_{11}$  é dado por

$$C_{11} = \omega^{3} - \omega^{2}a_{0} - \omega(a_{0}^{2} + a_{1}^{2} - b_{0}^{2} - b_{1}^{*}b_{1}) + [a_{0}^{3} - a_{0}(a_{1}^{2} + b_{1}^{*}b_{1} + b_{0}^{2}) + a_{1}b_{1}^{*}b_{0} + a_{1}b_{0}^{*}b_{1}] - H^{3} + H^{2}(3a_{0} - \omega) + H(\omega^{2} - 3a^{2} + 2a_{0}\omega + b_{1}^{*}b_{1} + a_{1}^{2} + b_{0}^{*}b_{0})$$
(2.32)

onde

$$a_{0} = \sigma \lambda , \quad a_{1} = \sigma \beta ,$$
  

$$b_{0} = \sigma \frac{3\pi\gamma^{2}}{2} B_{11}(\mathbf{k}_{\parallel}) , \quad b_{1} = \sigma \frac{3\pi\gamma^{2}}{2} B_{12}(\mathbf{k}_{\parallel})$$
  

$$b_{1}^{*} = \sigma \frac{3\pi\gamma^{2}}{2} B_{12}^{*}(\mathbf{k}_{\parallel}). \quad (2.33)$$

Assim, o elemento de matriz  $\Delta_{11}^{-1}$ ficará determinado, ou seja,

$$\Delta^{-1}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{C_{11}(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})}{D(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})}.$$
(2.34)

A integral em  $d\omega$  na eq. (2.29) é resolvida pelo método dos resíduos e pela aplicação do teorema de Cauchy. Assim, a integral se reduz a uma soma das contribuições dos polos, que são os zeros do determinante. Temos então:

$$\lim_{\xi \to 0^+} \int d\omega \frac{Im\Omega_{11}^{-1}(\omega + i\xi)}{e^{\beta\omega} - 1} = -Im\sum_{\alpha} \frac{i\pi C_{11}(\omega_{\alpha})}{(e^{\beta\omega_{\alpha}} - 1)D'(\omega_{\alpha})} , \qquad (2.35)$$

onde  $\omega_{\alpha}$  são as raízes do determinante de  $\Omega$ .  $D'(\omega_{\alpha})$  é a derivada em relação a  $\omega$  do determinante e é dada por:

$$D'(\omega_{\alpha}) = [4\omega^3 - 4\omega(a_0^2 + a_1^2 - b_0^*b_0 - b_1b_1^* + H^2 - 2Ha_0)]_{\omega = \omega_{\alpha}} .$$
(2.36)

A eq. (2.33) é reescrita na forma

$$\Phi(S) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2k_{\parallel} \sum_{\alpha} \frac{\pi C_{11}(\omega_{\alpha})}{(e^{\beta\omega} - 1)D'(\omega_{\alpha})}.$$
 (2.37)

### 2.4 Cálculo da Relação de Dispersão

Para o cálculo da relação de dispersão, resolvemos a matriz (2.25), a qual o seu determinante é dado por:

$$det \Delta = (\tau + \lambda \sigma) C_{11} - \sigma \beta C_{21} + \sigma b_1 C_{31} - \sigma b_2 C_{41}, \qquad (2.38)$$

onde  $C_{11}, C_{21}, C_{31}$  e  $C_{31}$  são cofatores do determinante.

$$det \ \Delta = \omega^4 - 2\omega^2 (a_0^2 + a_1^2 - b_0^2 - b_1^* b_1 + H^2 - 2Ha_0) + (a_0^2 + a_1^2 - b_0^2 - b_1^* b_1)^2 - (b_0^* b_1 + b_1^* b_0 - 2a_0 a_1)^2 + H^4 - 2H^2 b_0^2 - 4a_0 H^3 + 6H^2 a_0 - 2H^2 b_1^* b_1 - 2a_1^2 H^2 - 4Ha_0^3 - 4Ha_1 b_1^* b_0 - 4Ha_1 b_0^* b_1 + 4Ha_0 b_1^* b_1 + 4Ha_0 b_0^2 + 4Ha_0 a_1^2 ,$$

sendo

$$s_{1} = a_{0}^{2} + a_{1}^{2} - b_{0}^{2} - b_{1}^{*}b_{1} + H^{2} - 2Ha_{0} + \sqrt{4a_{1}^{2}H^{2} - 8a_{0}a_{1}^{2}H + 4Ha_{1}(b_{1}^{*}b_{0} + b_{0}b_{1}) + [(b_{0}b_{1} + b_{0}b_{1}^{*}) - 2a_{0}a_{1}]^{2}} s_{2} = a_{0}^{2} + a_{1}^{2} - b_{0}^{2} - b_{1}^{*}b_{1} + H^{2} - 2Ha_{0} - \sqrt{4a_{1}^{2}H^{2} - 8a_{0}a_{1}^{2}H + 4Ha_{1}(b_{1}^{*}b_{0} + b_{0}b_{1}) + [(b_{0}b_{1} + b_{0}b_{1}^{*}) - 2a_{0}a_{1}]^{2}},$$

As quatro raízes da eq. (2.31) são

$$\omega_1 = \sqrt{s_1}$$
$$\omega_2 = -\sqrt{s_1} = -\omega_1$$
$$\omega_3 = \sqrt{s_2}$$
$$\omega_4 = -\sqrt{s_2} = -\omega_3.$$

### Capítulo 3

### Resultados e Conclusões

### 3.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos os nossos principais resultados. Discutiremos o comportamento da magnetização em função da temperatura para diversos valores fixos do campo magnético externo e da interação dipolar. Na ausência de um campo magnético externo, é conhecido na literatura que a bicamada magnética é instável [18, 19], para valor do parâmetro dipolar maior que um certo valor crítico. Neste trabalho será mostrado que a aplicação de um pequeno campo magnético externo já é suficiente para restaurar a ordem de longo alcance, destruída pela interação dipolar. O restante deste capítulo será dividido da seguinte forma: na secção 3.2 discutiremos o comportamento da magnetização em função da temperatura para diversos valores do parâmetro dipolar e do campo magnético. Na secção 3.3 discutiremos o comportamento da relação de dispersão para diferentes valores do parâmetro dipolar e do campo magnético externo. Na secção 3.4 apresentaremos as principais conclusões e as perspectivas para futuros trabalhos.

#### 3.2 Comportamento Térmico da Magnetização

A solução numérica autoconsistente da eq. (2.28), levando em conta a eq. (2.29) possibilita obter os nossos principais resultados. As soluções correspondem ao cálculo da integral sobre a primeira zona de Brillouim da eq. (2.37) com um retículo de N pontos, onde N = 1023, N = 4095, N = 16383, N = 65535 e N = 262143. Em primeiro momento descrevemos o resultado obtido quando o sistema está submetido somente a influência da interação dipolar, na ausência de um campo magnético externo, e assim recuperamos os resultados obtidos nas referências [18] e [19].

Posteriormente, analisaremos o comportamento dos momentos de dipolos magnéticos quando expostos a um campo magnético muito pequeno, além da influência da interação dipolar.

Finalmente, apresentaremos os resultados observados quando os momentos de dipolos magnéticos experimentam a ação de um campo magnético externo de ordem relativamente grande  $(0, 10^{-5}, 10^{-4} \text{ e } 10^{-3})$  sob a influência do parâmetro de anisotropia dipolar. A figura (3.1) exibe o comportamento da magnetização para campo magnético externo igual a zero (H=0) e diversos valores do parâmetro dipolar (ed = 0.010, 0.011 e 0.012). Em todos esses casos o sistema apresenta temperatura crítica, as quais estão exibidas na tabela (3.1).

Para valores do parâmetro dipolar acima de ed = 0,012 o sistema apresenta uma instabilidade. Em outros termos, podemos dizer que o sistema apresenta frustração, uma vez que a interação de troca tende a ordenar o sistema, com ajuda da interação dipolar (a qual quebra a simetria rotacional) até ed = 0,012, de acordo com o teorema de Mermin-Wagner [10]. Porém, para valores de ed maiores que 0,012, estas interações impedem a ordenação magnética; frustrando o sistema. Há evidências experimentais que a interação dipolar grande faz os spins se orientarem perpendicularmente ao plano (xz). Assim, a ordem magnética permanece, no entanto, os dipolos magnéticos estariam orientados perpendicularmente ao plano inicial.

Finalizamos a análise da magnetização em função da temperatura com o diagrama de fases (3.6). Nele é exibido a temperatura crítica  $(T_c)$  em função do parâmetro de anisotropia dipolar crítico (ed) para diversos valores de pontos (N = 1023, N = 4095, N = 16383, N = 65535 e N = 262143) na primeira zona de Brillouim. A figura (3.2) exibe o comportamento da magnetização em função da temperatura para retículos com 4095 pontos, o comportamento é o mesmo exibido nas figuras anteriores (3.1). As demais figuras (3.2) exibem os mesmos comportamentos anteriores, porém a temperatura crítica tem a magnitude diminuida.



Figura 3.1: Magnetização a campo nulo (H = 0) em função da temperatura reduzida  $K_BT/J$  para N=1023 e ed = 0.010(a), 0.011(b) e 0.012(c).



Figura 3.2: Magnetização x Temperatura para N=4095, H=0 e ed = 0.010(a), 0.011(b) e 0.012(c).



Figura 3.3: Magnetização x temperatura para N=16383, H=0 e ed =0.010(a), 0.011(b) e 0.012(c).



Figura 3.4: Magnetização x temperatura para N=65535, H=0 e ed = 0.010(a), 0.011(b) e 0.012(c).



Figura 3.5: Magnetização x temperatura para N=262143, H=0 e ed =0.010(a), 0.011(b) e 0.012(c).

Sistemas somente com interação dipolar e interação de troca apresenta frustração, como também é no nosso caso para valores da interação dipolar maiores do que o valor crítico ed = 0,012. Abaixo apresentamos tabelas mostrando a temperatura crítica para diversos valores de ed e do tamanho do retículo.

N	ed = 0.008	ed = 0.010	ed = 0.011	ed = 0.012
1023	1.348	1.361	1.367	1.372
4095	1.249	1.263	1.270	1.276
6383	1.172	1.186	1.193	1.199
65535	1.108	1.121	1.127	1.138
262143	1.038	1.039	1.041	1.043

Tabela 3.1: Valores de  $T_c$  para diversos valores de ed e diferentes tamanhos de retículo na ausência de campo magnético externo, H=0.

Os diagramas das figuras (3.1) à (3.5) exibem o comportamento da magnetização em função da temperatura na ausência de campo magnético externo. A magnetização vai a zero a uma determinada temperatura crítica  $T_c$ . A temperatura crítica diminui a medida que tomamos mais pontos na primeira zona de Brillouin. Apesar da interação dipolar ser muito pequena em relação a interação de troca, é sabido que nos casos de sistemas com simetria rotacional, a interação dipolar estabiliza a ordem de longo alcance em temperatura finita [4], como é em nosso caso. O diagrama de fases (3.6) exibe a temperatura crítica  $(T_c)$  em função do parâmetro de anisotropia dipolar crítico (ed) para diversos valores de pontos (N = 1023, N = 4095, N = 16383, N = 65535 e N = 262143) na primeira zona de Brillouim. A medida que os números de pontos tornamse maiores, nota-se, de acordo com o diagrama de fases, que a temperatura crítica ( $T_c$ ) vai se estabilizando, assim a curva aproxima-se de uma reta.



Figura 3.6: Diagrama de fases de  $T_c \ge ed_c$ .

Nas figuras (3.7) à (3.11) o comportamento da magnetização em função da temperatura é exibido para diversos valores de ed e de diferentes tamanhos de retículos. O diagrama mostra que um pequeno  $(10^{-5})$  campo magnético não é suficiente para estabilizar completamente o sistema, isto é, para valores de ed > 0,0158 novamente o sistema apresenta frustração, isto é, não apresenta ordem de longo alcance.



Figura 3.7: Magnetização x temperatura para N=1023,  $H = 10^{-5}$  e ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).



Figura 3.8: Magnetização x temperatura para N=4095,  $H = 10^{-5}$  e ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).



Figura 3.9: Magnetização x temperatura para N=6383,  $H = 10^{-5}$  e ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).



Figura 3.10: Magnetização x temperatura para N=65535,  $H = 10^{-5}$  e ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).



Figura 3.11: Magnetização x temperatura para N=262143,  $H = 10^{-5}$  e ed = 0.0150(a), e ed = 0.0158(b).

N	$E_d = 0.0150$	$E_d = 0.0158$
1023	1.401	1.405
4095	1.330	1.334
6383	1.301	1.305
65535	1.293	1.297
262143	1.290	1.294

Tabela 3.2: Valores de  $T_c$  em função de  $e_d$  e do tamanho do retículo na presença de um campo magnético externo da ordem de  $10^{-5}$ .

Os diagramas das figuras (3.12) e (3.13) mostram que um campo magnético da ordem de  $10^{-4}$  já é suficiente para estabilizar a ordem de longo alcance. O campo magnético dessa magnitude levanta a frustração do sistema e suprime a temperatura crítica. Valores grandes do campo magnético fazem os dipolos magnéticos se alinharem na direção do eixo fácil em baixas temperaturas. Mesmo em altas temperaturas o campo magnético mantem uma pequena ordem magnética no sistema, isto é, o sistema não mais apresenta uma temperatura crítica.



Figura 3.12: Magnetização x temperatura para N=1023,  $H = 10^{-4}$  e ed = 0.02(a), e ed = 0.05885.



Figura 3.13: Magnetização x temperatura para N=1023,  $H = 10^{-3}$  e ed = 0.100(a), e ed = 0.115.

Nas figuras (3.14) à (3.17) é exibido o diagrama magnetização em função da temperatura. Novamente é mostrado que o sistema não se desordena, isto é, não apresenta temperatura crítica quando submetido a um campo magnético da ordem de  $10^{-3}$ . Neste contexto, a interação dipolar é desprezível em relação as outras interações (troca e campo magnético).



Figura 3.14: Magnetização x temperatura para N=4095,  $H = 10^{-3}$  e ed = 0.100(a), e ed = 0.115.



Figura 3.15: Magnetização x temperatura para N=16383,  $H=10^{-3}$  e ed=0.100(a), e ed=0.115.



Figura 3.16: Magnetização x temperatura para N=65535,  $H = 10^{-3}$  e ed = 0.100(a), e ed = 0.115.



Figura 3.17: Magnetização x temperatura para N=262143,  $H=10^{-3}$  e ed=0.100(a), e ed=0.115.

#### 3.2.1 Relação de Dispersão

O sistema que estamos estudando é composto por N momentos magnéticos, dispostos em um filme de duas camadas magnéticas. Os momentos magnéticos primeiros vizinhos interagem ferromagnéticamente através da interação de troca (J > 0) de curto alcance. Cada momento magnético interage com todos os outros através da interação dipolar, esta interação é de longo alcance. Um campo magnético externo é aplicado na direção do eixo fácil (z) em todos os pontos da rede. É sabido que em sistema com simetria translacional (em 3 e 2 dimensões), as interações dipolares alteram profundamente as propriedades do sistema. Em particular, o espectro de excitações elementares de um sitema ferromagnético com somente interação de troca isotrópica apresenta em 2<br/>d e 3<br/>d, um modo de excitação proporcional a  $k^2(\omega \sim k^2)$ na região de  $k \rightarrow 0.$ Quando a interação dipolar é levada em conta, a forma da relação de dispersão muda drasticamente. No caso tridimensional  $\omega \sim k$ e no caso bidimensional  $\omega \sim \sqrt{k}$ . Este último resultado é mostrado em nossa dissertação. No caso bidimensional, a interação dipolar é importante para estabilizar a ordem de longo alcance, pois somente com interação de troca isotrópica, que é de curto alcance, esta ordem não pode subsistir, como mostrado por Mermin e Wagner [10]. O fato da relação de dispersão de longos comprimetos de onda  $(k \to 0)$  ser proporcional a raiz quadrada de k $(\omega \sim \sqrt{k})$ , deve permitir que desvios de spin em temperatura maior do que zero (T > 0) seja finito, e somente divergir no caso de interação de troca isotrópica. Desta forma, a interação dipolar mantém a ordem de longo alcance para sistemas bidimensionais até um certo valor crítico  $(ed_c = 0.012)$ . A relação de dispersão calculada para o nosso sistema é dada por:

$$\begin{cases} \omega_1^2 = a_0^2 + a_1^2 - (b_0^2 + b_1 b_1^*) + H^2 - 2a_0 H + \\ + \sqrt{4a_1^2 H^2 - 8a_0 a_1^2 H} + 4Ha_1 (b_1^* b_0 + b_0 b_1) + [(b_0 b_1 + b_0 b_1^*) - 2a_0 a_1]^2} \\ \omega_2^2 = a_0^2 + a_1^2 - (b_0^2 + b_1 b_1^*) + H^2 - 2a_0 H + \\ - \sqrt{4a_1^2 H^2 - 8a_0 a_1^2 H} + 4Ha_1 (b_1^* b_0 + b_0 b_1) + [(b_0 b_1 + b_0 b_1^*) - 2a_0 a_1]^2}. \end{cases}$$

Nesta seção apresentaremos a influência da interação dipolar e do campo magnético externo na relação de dispersão.



Figura 3.18: Relação de dispersão para diversos valores de interação dipolar e campo magnético H=0.

Na figura (3.18) apresentamos o comportamento de  $\omega$  em função do vetor de onda na direção de  $k_z$  para diversos valores do parâmetro dipolar e com o campo magnético H = 0. Como já é conhecido, para ed = 0.013a frequência de excitação é um imaginário puro, de acordo com o teorema de Mermin e Wagner, o diagrama mostra que a interação dipolar estabiliza a ordem de longo alcance até um certo valor críico (ed = 0.012). Para valores maiores que o valor crítico, a interação dipolar elimina a ordem de longo alcance, isto é, a magnetização na direção de z desaparece. Estes resultados são apresentados por Arruda e colaboradores [18], porém os nossos apresentam melhores quantitativos devido ao fato de considerarmos redes muito maiores. A magnetização do sistema pode ter tomado uma direção perpendicular ao plano (xz) considerado.



Figura 3.19: Relação de dispersão para valores de ed: 0.0150 e 0.0158 e campo magnético H=0.00001.

A figura (3.19) exibe o efeito de um campo magnético externo da ordem de  $10^{-5}$ . Neste caso a instabilidade aparece para um valor maior do parâmetro dipolar  $ed_c = 0.0158$ , isto é, um pequeno campo magnético ajuda a manter a ordem magnética em uma extensão maior da interação dipolar.

As figuras abaixo (3.20 e 3.21) exibem o mesmo comportamento anterior, isto é, para campo magnético da ordem de  $10^{-4} ed_c = 0.02885$  e para campos da ordem de  $10^{-3}$ , o valor crítico é de  $ed_c = 0.115$ . Os diagramas das figuras (3.22) e (3.23) exibem o comportamento da relação de dispersão dos magnons com vetor de onda k = 0 a  $\frac{\pi}{a}$  da primeira zona de Brillouin.



Figura 3.20: Relação de dispersão para diversos valores de interação dipolar e campo magnético H=0.

Figura 3.21: Relação de dispersão para valores de ed: 0.0150 e 0.0158 e campo magnético H=0.00001.

A figura (3.22)(a) exibe o caso para H = 0, onde a relação de dispersão não apresenta gap. Nos demais diagramas (3.22)(b) e (3.23) apresentamos o efeito do campo magnético, o qual introduz um salto (gap) na energia das ondas de spin. O gap é proporcional ao valor do campo magnético.



Figura 3.22: Relação de dispersão dos magnons na ausência de campo magnético externo (H=0)(a) e sob a influência de um campo externo (H=0.001)(b).



Figura 3.23: Relação de dispersão dos magnons sob a influência de um campo magnético externo (H=0.5)(a) e (H=1.0) (b).
#### **3.3** Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho, o objetivo foi estudar a estabilização da ordem magnética devido a ação da interação dipolar e deste comportamento acima da temperatura crítica, devido a aplicação de um campo magnético externo.

Os nossos principais resultados podem ser resumidos do seguinte modo:

- 1. O sistema magnético apresenta ordem de longo alcance até um certo valor crítico da interação dipolar ( $e_d = 0.012$ ), para H=0. Até este valor da interação dipolar, a interação dipolo-dipolo ajuda estabilizar a ordem de longo alcance; a qual não viola o teorema de Mermin-Wagner [10].
- 2. O sistema apresenta instabilidade para valores de  $e_d > 0.012$ . O nosso modelo descreve o alinhamento dos dipolos magnéticos somente ao longo do plano (yz). Assim, o nosso modelo leva a concluir que valores grandes da interação dipolar leva o sistema à frustração. Porém, sabemos que há evidências experimentais de que grandes valores da interação dipolar leva os dipolos magnéticos a se alinharem perpendicularmente ao plano yz [6].
- 3. A aplicação de um pequeno campo magnético  $(10^{-5})$  não é suficiente para manter a ordem magnética no plano xz. O sistema é frustrado para valores de  $e_d > 0.0158$ .
- 4. Por outro lado, campos magnéticos da ordem 10<sup>-4</sup> já é suficiente para suprimir a frustração do sistema. A temperatura crítica é também eliminada, isto é, o sistema permanece magnetizado para altas temperaturas.

- 5. A aplicação de um campo magnético faz a relação de dispersão apresentar um salto (gap) em  $k_z \simeq 0$ . Este gap é proporcional ao campo aplicado.
- 6. Estes comportamentos apresentados foram captados tanto no comportamento da magnetização como função da temperatura com  $E_d$  fixo, como no comportamento da relação de dispersão em função de  $k_z$ .

Como sugestão para futuros trabalhos:

- A modificação do modelo para captar o alinhamento dos dipolos magnéticos perpendicular ao plano inicial (yz).
- Nesta mesma linha (dipolos alinhados paralelos ao plano yz) deve ser estudado o caso da interação de troca ser anti-ferromagnética, necessitando de considerarmos duas sub-redes interpenetrantes.

# Apêndice A

# Método das Funções de Green

#### 1-Introdução

A técnica das funções de Green (F.G.), desenvolvidas aqui, são do formalismo de Zubarev[20, 21], que é um método para tratar de sistemas de muitos corpos interagentes. Esta F.G., corresponde fisicamente a um propagador na qual uma dada grandeza física  $\phi(\vec{r},t)$  é obtida pela aplicação de  $G(\vec{r},\vec{r}',t,t')$ . Esta grandeza na posição  $\vec{r}$  e instante  $t'[\phi(\vec{r}',t')]$ . No estudo do magnetismo as F.G., são utilizadas para calcular funções de correlação.

# 1.1-Funções de Green Retardada, Avançada e Causal

As F.G., em mecânica estatística são apropriadas para o cálculo das funções de correlação e consequentemente são obtidas todas as grandezas termodinâmicas em todo intervalo de temperatura. No "ensemble" grande canônico, as F.G., retardada  $[G_r(t,t')]$ , avançada  $[G_a(t,t')]$  e causal  $[G_c(t,t')]$ , são definidas segundo Zubarev por:

$$G_r(t,t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_r = -i\theta(t-t') < [A(t); B(t')_\eta] >_T$$
(A.1)

$$G_a(t,t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_a = i\theta(t'-t) < [A(t); B(t')_{\eta}] >_T$$
(A.2)

$$G_c(t,t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_c = -i < \hat{T}A(t); B(t') \} >,$$
(A.3)

onde

$$\widehat{T}\left\{A(t); B(t')\right\} = \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')A(t)$$
(A.4)
$$\eta \quad \text{pode ser} \begin{cases} 1 & \text{bósons E} \\ -1 & \text{férmions D} \end{cases}$$

a função degrau ("Heaviside"):

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

e ainda

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t') = \delta(t-t'), \quad \text{ou} \quad \frac{\partial}{\partial t}\theta(t'-t) = -\delta(t'-t). \tag{A.5}$$

Para um operador arbitrário A, no equilíbrio térmico, o seu valor médio é dado por:

$$\langle A \rangle = T_r(\rho A)$$
 (A.6)

onde  $\rho$  é o operador densidade, definido do seguinte modo:

$$\rho = \frac{1}{z} e^{-\beta H} \tag{A.7}$$

sendo  ${\cal H}$ a hamiltoniana eZa função de partição dada por:

$$Z = T_r \left( e^{-\beta H} \right) \quad \beta = \frac{1}{K_B T}.$$

A equação (A.6) pode ainda ser reescrita como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\widehat{\Xi}} T_r \left( e^{-\beta(\widehat{H} - \mu \widehat{N})} \right),$$
 (A.8)

que é a média estatística sobre o "ensemble" grande canônico, onde  $\Xi \equiv T_r \left( e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \right)$ ,  $\hat{H}$  é o hamiltoniano independente do tempo,  $\mu$  é o potencial químico e  $\hat{N}$  é o número total de partículas. Introduziremos uma função mais geral, as chamadas **funções de correlação** entre pares de operadores (podem ser obtidas das F.G., correspondentes). Na representação de Heisenberg, os operadores dependem explicitamente do tempo, e correspondem à observáveis físicos e são obtidos dos operadores constantes (no tempo) da representação de Schrodinger da sequinte forma:

$$A_{(t)} = e^{i\hat{H}T} A_{(0)} e^{-i\hat{H}T}, (A.9)$$

sendo  $\hbar = 1$  Podemos escrever explicitamente a equação (A.1):

$$[G_r(t,t')] \equiv \ll A(t)B(t') \gg_r = -i\theta(t-t') \underbrace{\langle A(t); B(t') \rangle}_{-\eta < B(t')A(t) >_T}.$$
(A.10)

Queremos verificar, de acordo com a definição, que as funções de Green (r,a,c) dependem de t e t' através da diferença t - t', então calculamos:

$$I = \langle A(t); B(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-\beta H} A(t) B(t') \right),$$
(A.11)

como os operadores dependem explicitamente do tempo de acordo com:

$$A(t) = e^{iHt} A_{(0)} e^{-iHt} \quad e \quad B(t') = e^{iHt'} B_{(o)} e^{-iHt'}.$$
 (A.12)

Substituindo a equação (A.12) na equação (A.11) temos:

$$I = \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-\beta H} e^{iHt} A_{(0)} e^{-iHt} e^{iHt'} B_{(o)} \cdot e^{-iHt'} \right)$$
(A.13)

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

$$I = \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-iHt'} e^{-\beta H} e^{iHt} A_{(0)} e^{-iHt} e^{iHt'} B_{(o)} \right)$$
  

$$= \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-\beta H} e^{-iHt'} e^{iHt} A_{(0)} e^{-iHt} e^{iHt'} B_{(o)} \right)$$
  

$$= \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-\beta H} e^{iH(t-t')} A_{(0)} e^{-iH(t-t')} B_{(o)} \right)$$
  

$$= \frac{1}{\Xi} T_r \left( e^{-\beta H} A(t-t') B_{(o)} \right), \qquad (A.14)$$

comparando a equação anterior com a equação (A.11) temos:

$$\frac{1}{\Xi}T_r\left(e^{-\beta H}A(t-t')B_{(o)}\right) = \frac{1}{\Xi}T_r\left(e^{-\beta H}A(t)B(t')\right) \quad \text{ou ainda:}$$
(A.15)

$$\langle A(t); B(t') \rangle = \langle A(t-t'); B(0) \rangle$$
. (A.16)

As funções de correlação são definidas da seguinte forma:

$$F_{AB}(t,t') = \langle A(t); B(t') \rangle \quad \text{ou ainda:}$$
(A.17)

$$F_{AB}(t,t') = F_{AB}(t-t'),$$
 (A.18)

usando a equação anterior na definição da F.G., da equação (A.1), de imediato notamos a "invariância" temporal de tais funções, isto é:

$$G_{a,r,c}(t,t') = G_{a,r,c}(t-t').$$
 (A.19)

# 2-Equação de Movimento para as funções de Green

Os operadores  $A(t) \in B(t')$  presentes nas definições das F.G., das equações (A.1) e (A.2) e na representação de Heisenberg equação (A.9), satisfazem uma equação de movimento do tipo:

$$\frac{d}{dt}A(t) = iHe^{iHt}A(t)e^{-iHt} + e^{iHt}A(t)(-iHt)e^{-iHt}$$
(A.20)

$$\frac{d}{dt}A(t) = iHe^{iHt}A(t)e^{-iHt} - e^{iHt}A(t)(iHt)e^{-iHt} .i$$
 (A.21)

$$i\frac{d}{dt}A(t) = -HA(t) + A(t)H \tag{A.22}$$

$$i\frac{d}{dt}A(t) = [A(t), H]$$
 ou ainda  $\frac{d}{dt}A(t) = -i[A(t), H].$  (A.23)

A derivada da equação (A.1) é:

$$\frac{dG_r}{dt}(t,t') = -i\frac{d\theta}{dt}(t-t') < [A(t); B(t')]_{\eta} >_T 
+ (-i\theta(t-t') < [\frac{dA(t)}{dt}, B(t')] >_T,$$
(A.24)

substituindo as equações (A.5) e (A.23) na equação (A.24) teremos:

$$\frac{dG_r}{dt}(t,t') = -i\delta(t-t') < [A(t), B(t')]_{\eta} >_T - i\theta(t-t') < [-i[A(t), H], B(t')]_{\eta} >_T$$
(A.25)

$$i\frac{dG_{r}}{dt}(t,t') = \delta(t-t') < [A(t), B(t')]_{\eta} >_{T} \\ - \underbrace{i\theta(t-t') < [[A(t), H], B(t')]_{\eta} >_{T}}^{II}$$
(A.26)

da equação (A.1) é fácil ver que:

$$II = << [A(t), H], B(t') >_{\eta} >_{T}$$
(A.27)

que subst. na equação (A.26) dará a equação de movimento para a Função de Green retardada:

$$i\frac{d}{dt}G_{r}(t,t') = \delta(t-t') < [A(t), B(t')]_{\eta} >_{T} + << [[A(t), H], B(t') >>_{\eta}>_{T}.$$
(A.28)

Façamos agora para a avançada: A derivada da equação (A.2) é:

$$\frac{d}{dt}G_{a}(t,t') = i\frac{d}{dt}\theta(t'-t) < [A(t); B(t')]_{\eta} >_{T} 
+ i\theta(t'-t) < [\frac{d}{dt}A(t), B(t')] >_{T}$$
(A.29)

$$\frac{d}{dt}G_a(t,t') = -i\delta(t'-t) < [A(t), B(t')]_{\eta} >_T 
+ i\theta(t'-t) < [-i[A(t), H], B(t')]_{\eta} >_T .i$$
(A.30)

$$i\frac{d}{dt}G_{a}(t,t') = \delta(t'-t) < [A(t), B(t')]_{\eta} >_{T} + i\theta(t'-t) < [[A(t), H], B(t')]_{\eta} >_{T}$$
(A.31)

$$i\frac{d}{dt}G_{a}(t',t) = \delta(t'-t) < [A(t), B(t')]_{\eta} >_{T}$$

$$+ i\theta(t'-t) < [[A(t), H], B(t')]_{\eta} >_{T},$$
(A.32)

da equação (A.2) é fácil ver que:

$$III = << [A(t), H], B(t') >_{\eta} >_{T}$$
(A.33)

que subst. na equação (A.32) dará a equação de movimento para a Função de Green avançada:

$$i\frac{d}{dt}G_{a}(t,t') = \delta(t'-t) < [A(t), B(t')]_{\eta} >_{T} + << [[A(t), H], B(t') >>_{\eta}>_{T}.$$
(A.34)

Façamos agora para a causal: A derivada da equação (A.3) é:

$$\frac{d}{dt}G_c(t,t') = -i\left\{\frac{d}{dt}\theta(t-t')A(t)B(t') + \theta(t-t')\frac{d}{dt}\left[A(t)B(t')\right]\right\} + i\left\{+\eta\frac{d}{dt}\theta(t'-t)B(t')A(t) + \eta\theta(t'-t)B(t')\frac{d}{dt}A(t) > \right\}, \quad (A.35)$$

que multiplicando por i e adicionando as equações (A.5) e (A.22) em (A.35)dará:

$$i\frac{d}{dt}G_{c}(t,t') = \langle \delta(t-t')A(t)B(t') - i\theta(t-t')[A(t),H]B(t') - \eta\delta(t'-t)B(t')A(t) - i\eta\theta(t'-t)B(t')[A(t),H] \rangle$$
(A.36)

como  $\delta(t - t') = -\delta(t' - t)$  podemos fazer:

$$i\frac{d}{dt}G_{c}(t,t') = \langle \delta(t-t')A(t)B(t') - i\theta(t-t')[A(t),H]B(t') - \eta\delta(t'-t)B(t')A(t) - i\eta\theta(t'-t)B(t')[A(t),H] \rangle$$
(A.37)

colocando em evidência $~\delta(t-t')$ 

$$i\frac{d}{dt}G_{c}(t,t') = <\delta(t-t')(A(t)B(t') + \eta B(t')A(t))$$
  
- 
$$\underbrace{IV}_{-i\theta(t-t')[A(t),H]B(t') - \eta\delta(t'-t)B(t')[A(t),H]}_{IV} > (A.38)$$

recordando a equação (A.3):

$$G_c(t,t') \equiv \ll A(t); B(t') \gg_c = \overbrace{-i < \theta(t-t')A(t)B(t') + \eta\theta(t'-t)B(t')A(t)}^{V} >$$

veja que (IV) é iqual à (V) e reescrevendo a equação (A.38) teremos:

$$i\frac{d}{dt}G_{c}(t,t') = <\delta(t-t')(A(t)B(t') + \eta B(t')A(t)) + <<<[A(t),H]; B(t') >> A.39)$$
$$i\frac{d}{dt}G_{c}(t,t') = \delta(t-t') < [A(t),B(t')] > + <<<[A(t),H]; B(t') >>>_{c} . (A.40)$$

Que é a equação de movimento para a F.G causal. Mostramos finalmente que as três funções de Green satisfazem a mesma equação de movimento, podendo ser escrita de uma forma geral:

$$i\frac{d}{dt}G_j(t,t') = \delta(t-t') < [A(t), B(t')] > + <<<[A(t), H]; B(t') >>>_j. (A.41)$$

Observe que as funções de Green que aparecem no segundo membro da equação (A.41) envolvem um número maior de operadores que do primeiro membro.

## 3-Transformada de Fourier das Funções de Green

$$G_{(E)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(t - t') e^{iE(t - t')} d(t - t')$$
(A.42)

$$G(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(E)e^{-iE(t-t')}dE,$$
(A.43)

a função delta de Dirac é expressa por:

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t - t')} dE$$
 (A.44)

onde substituindo a eq. (A.43) na eq. (A.41):

$$i\frac{d}{dt}G(t,t') = i\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} G(E)e^{-iE(t-t')}dE = \int_{-\infty}^{\infty} EG(E)e^{-iE(t-t')}dE \quad (A.45)$$

substituindo as equações (A.41) e (A.44) na equação (A.45) dará:

$$\int_{-\infty}^{\infty} EG(E)e^{-iE(t-t')}dE = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')}dE < [A(t), B(t')] > + << [A(t), H]; B(t') >>_j.$$
(A.46)

Aplicando a T.F na segunda parte do segundo membro:

$$\int_{-\infty}^{\infty} EG(E) e^{-iE(t-t')} dE = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} dE < [A(t), B(t')] > \\ + \int_{-\infty}^{\infty} << [A(t), H]; B(t') >>_E e^{-iE(t-t')} dE$$

no segundo membro, colocando a integral em evidência:

$$\int_{-\infty}^{\infty} EG(E)e^{-iE(t-t')}dE =$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} < [A(t), B(t')] > + << [A(t), H]; B(t') >>_E\right]e^{-iE(t-t')}dE.$$
(A.47)

Observando a igualdade vemos que:

$$EG(E) = \frac{1}{2\pi} < [A(t), B(t')] > + << [A(t), H]; B(t') >>_E$$
(A.48)

onde

 $G(E) = \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle_E$  que substituindo na eq. (A.48):

$$E \ll A(t), B(t') \gg_{E} = \frac{1}{2\pi} \ll [A(t), B(t')] > + \ll [A(t), H]; B(t') \gg_{E} (A.49)$$

Da equação acima temos que a F.G.,<<  $A(t), B(t') >>_E$  é dada em termos da F.G.,<<  $[A(t), H]; B(t') >>_E$  superior . Consequentemente, a equação da F.G.,<<  $[A(t), H]; B(t') >>_E$  será dada em termos da F.G superior, e assim sucessivamente.

## 4-Representação Espectral

Considere o espectro de uma Hamiltoniana arbitrária dada por:

$$H\Psi_n >= E_n \mid \Psi_n$$

. Sabemos que a média dos operadores  $A(t) \in B(t')$  é dada por:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \frac{1}{Z} tr e^{-\beta H} \left\{ e^{iHt'}B(0)e^{iHt'}e^{iHt}A(0)e^{-iHt} \right\}.$$
 (A.50)

Sendo | $\Psi_n>$ estado estacionário como vetor na representação de Heisenberg, então:

$$< B(t')A(t) > = \frac{1}{Z} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \left\{ |\Psi_n \rangle < \Psi_n | e^{iE_n t'} |\Psi_n \rangle < \Psi_m | B(0) \right\}$$
  

$$. \left\{ |\Psi_m \rangle < \Psi_m | e^{-iE_m t'} |\Psi_m \rangle < \Psi_m | e^{iE_m t} \right\}$$
  

$$. \left\{ |\Psi_m \rangle < \Psi_n | A(0) | \Psi_n \rangle < \Psi_n | e^{-iE_n t} \right\}$$
(A.51)

como  $\sum_{mn} \mid \Psi_m > < \Psi_m \mid = 1$ a equação acima fica:

$$< B(t')A(t) > = \frac{1}{Z} \sum_{nm} < \Psi_n \mid B(0) \mid \Psi_m > < \Psi_m \mid A(0) \mid \Psi_n > \\ \cdot e^{iE_n t'} e^{-iE_m t'} e^{iE_m t} e^{-iE_n t} e^{-\beta E_n}$$
(A.52)

$$< B(t')A(t) > = \frac{1}{Z} \sum_{nm} < \Psi_n \mid B(0) \mid \Psi_m > < \Psi_m \mid A(0) \mid \Psi_n > \\ \cdot e^{-i[E_n(t-t') - E_m(t-t')]} e^{-\beta E_n}$$
(A.53)

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{nm} \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle$$
  
 $\cdot e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} e^{-\beta E_n}.$  (A.54)

A saber:

$$\implies \langle \Psi_n \mid B(0) \mid \Psi_m > e^{i(E_n - E_m)t'} = \langle \Psi_n \mid B(t') \mid \Psi_m >$$
$$\implies \langle \Psi_m \mid A(0) \mid \Psi_n > e^{i(E_m - E_n)t} = \langle \Psi_m \mid A(t) \mid \Psi_n >$$

com isso:

$$F_{BA}(t-t') = Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle$$
  

$$\cdot e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} e^{-\beta E_n}$$
(A.55)

analogamente:

$$F_{AB}(t-t') = Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle$$
  
.  $e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} e^{-\beta E_m}$  (A.56)

veja que  $E_n - E_m = W$ , logo  $E_m = E_n - w$  que substituindo na equação (A.56) teremos:

$$F_{AB}(t-t') = Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle.$$
  

$$\cdot e^{-\beta E_n} e^{\beta w} e^{-i(E_n - E_m)(t-t')}$$
(A.57)

Introduzimos a Transformada de Fourier J(w) tal que:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w)e^{-iw(t-t')}dw$$
 (A.58)

A função J(w)é chamada intensidade espectral:

$$J_{BA}(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(t-t')e^{iw(t-t')}d(t-t')$$
(A.59)

analogamente temos:

$$< A(t)B(t') >= F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w)e^{\beta w}e^{-iw(t-t')}dw$$
 (A.60)

$$J_{AB}(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(t-t') e^{\beta w} e^{iw(t-t')} d(t-t').$$
(A.61)

As equações (A.58) e (A.60) são as representações espectrais das funções de correlação substituindo (A.55) em (A.59):

$$J_{BA}(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle$$
  
$$\cdot e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} e^{-\beta E_n} e^{iw(t - t')} d(t - t')$$
(A.62)

$$J_{BA}(w) = Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle e^{-\beta E_n}$$
  
$$\cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(E_n - E_m - w)(t - t')} d(t - t'), \qquad (A.63)$$

onde é conhecido que:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(E_n - E_m - w)(t - t')} d(t - t') = \delta(E_n E_m - w) \quad \text{e subst. na eq. A.63:}$$

$$J_{BA}(w) = Z^{-1} \sum_{nm} \langle \Psi_n | B(0) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | A(0) | \Psi_n \rangle e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m - w),$$

J é a intensidade espectral que buscamos e está definida nos pontos W tais que  $E_n - E_m = W$ , ou seja, nas exitações do sistema.

## 5-Transformadas de Fourier das funções de Green em termos das funções de correlação

Reescrevendo a equação (A.10):

$$[G_r(t,t')] \equiv \ll A(t)B(t') \gg_r = -i\theta(t-t') < A(t); B(t') > -\eta < B(t')A(t) >_T$$

tomando a T.F., dessa função:

$$G_r(E) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{iE(t-t')} \theta(t-t') < A(t); B(t') > -\eta < B(t')A(t) >_T$$

Substituindo as representações espectrais (A.58) e (A.60) e fazendo t' = 0, teremos:

$$G_{r}(E) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t)e^{iE(t)}\theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w)e^{\beta w}e^{-iw(t)}dw$$
$$- \eta \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w)e^{-iw(t)}dw}^{A} \cdot \frac{i}{i}$$
(A.64)

Na equação (A.64) colocando A em evidência:

$$G_{r}(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d(t) e^{iE(t)} \theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) e^{-iw(t)} dw (e^{\beta w} - \eta)$$
(A.65)

reagrupando as integrais que w e em t:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) dw \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{-iw(t)} e^{iE(t)} d(t)$$
$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) dw \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{i(E-w)t} d(t).$$
(A.66)

A função desacoplamento é escrita na forma:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t'} \delta(t') dt' \quad \text{com } \varepsilon \to 0^+, \tag{A.67}$$

e a função delta de Dirac:

$$\delta(t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iwt'} dw.$$
 (A.68)

Substituindo (A.68) na (A.67) teremos:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t'} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iwt'} dw dt'$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \int_{-\infty}^{t} e^{-i(w+i\varepsilon)t'} dt'$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \left[ \frac{e^{-i(w+i\varepsilon)t'}}{e^{-i(w+i\varepsilon)}} \right]_{-\infty}^{t}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \left[ \frac{e^{-i(w+i\varepsilon)t}}{-i(w+i\varepsilon)} - \frac{e^{iw\infty}e^{-\varepsilon\infty}}{-i(w+i\varepsilon)} \right]$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-iwt}e^{\varepsilon t}}{-i(w+i\varepsilon)}.$$
(A.69)

Como  $\varepsilon \ll 1 \to e^{\varepsilon t} \simeq 1$ , logo:

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-iwt}}{w + i\varepsilon}$$
(A.70)

Assim substituindo as equações (A.70) na (A.66) dará:

$$G_r(E) = \frac{i}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) dw \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E - w - x)t} d(t) (A.71)$$

a função delta pode ser escrita como:

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

que substituindo na equação (A.71) dará:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) dw \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \delta(\overline{E - w} - x)$$
(A.72)

usaremos a seguinte propriedade de função delta:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(a-x)dx = f(a).$$

A equação (A.72) é reescrita:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) \frac{dw}{E - w + i\varepsilon}$$
(A.73)

Analogamente para a função de Green avançada, temos:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) \frac{dw}{E - w - i\varepsilon}.$$
 (A.74)

Vamos calcular o limite para w real, onde w = E: fazendo  $E^{\pm} = E \pm i\varepsilon$  com E real, pois  $\varepsilon \to 0^+$ .

A equação (A.74) pode ser assim geberalizada:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) \frac{dw}{E \pm -w} \begin{cases} G_r(E) & \text{se } I_m E > 0\\ G_a(E) & \text{se } I_m E < 0 \end{cases}$$
(A.75)

Façamos:

$$G(E^+) - G(E^-) \equiv G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) =$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w) (e^{\beta w} - \eta) \left[ \frac{1}{E - w + i\varepsilon} - \frac{1}{E - w - i\varepsilon} \right] dw$$
(A.76)

usaremos mais uma propriedade do  $\delta$ :

$$2\pi i \delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left( \frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) \quad \text{que aplicando na eq. A.76:} \\ \lim_{\varepsilon \to 0} G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) =$$

$$\frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta w} - \eta) J_{BA}(w) \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left( \frac{1}{\underbrace{E - w}_{x} - i\varepsilon} - \frac{1}{\underbrace{E - w}_{x} + i\varepsilon} \right) dw$$
$$\lim_{\varepsilon \to 0} G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta w} - \eta) J_{BA}(w) 2\pi i \delta(\underbrace{E - w}_{x}) dw$$
$$\lim_{\varepsilon \to 0} G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) = -i \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta w} - \eta) J_{BA}(w) \delta(\underbrace{E - w}_{x}) dw$$

usaremos a propriedade:  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(a-x)dx = f(x)$ 

$$\lim_{\varepsilon \to 0} G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) = -iJ_{BA}(E)(e^{\beta E} - \eta)$$

multiplicando tudo por i e colocando  $J_{BA}$  em evidência:

$$J_{BA}(E) = i \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon)}{(e^{\beta E} - \eta)}$$
(A.77)

substituindo a equação anterior na equação (A.58), que é:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(w)e^{-iw(t-t')}dw$$
$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} i \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{G(E+i\varepsilon) - G(E-i\varepsilon)}{(e^{\beta E} - \eta)}e^{-iw(t-t')}dw.$$
(A.78)

Desta forma, com J(E) escrita em função de G(E), estamos aptos a calcular as médias estatísticas de quaisquer operadores de nosso interesse.

## 6-Aplicação a um Ferromagneto

Consideremos um sistema com N spins  $\vec{S}_i$  nos sítios i de uma rede cúbica. A interação entre esses spins é observada através da hamiltoniana de Heisenberg:

$$H = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i . \vec{S}_j - h \sum_i S_i^z,$$
(A.79)

onde  $h = g\mu_B H$  é a energia associada com o campo magnético e  $\mu_B$  o magneton de Bohr. **Objetivo:** Cálculo da magnetização ao longo da direção do campo

externo, o que implica calcular  $S^z$ . É conhecido que:  $\vec{S_i} = S_i^x \mathbf{i} + S_j^y \mathbf{j} + S_i^z \mathbf{k}$ e ainda  $\vec{S_j} = S_j^x \mathbf{i} + S_j^y \mathbf{j} + S_j^z \mathbf{k}$  fazendo o produto escalar da equação (A.78):

$$\vec{S}_i.\vec{S}_j = \underbrace{S_i^x S_j^x}_I + \underbrace{S_i^y S_j^y}_{II} + \underbrace{S_i^z S_j^z}_{III}.$$
(A.80)

Sabe-se também que:  $S_i^+ = S_i^x + iS_i^y$  e  $S_i^- = S_i^x - iS_i^y$  colocando  $S_i^x$  em evidência:  $S_i^x = S_i^+ - iS_i^y$  e  $S_i^x = S_i^- + iS_i^y$  agora somando os  $S_i^x$  teremos:

$$2S_{i}^{x} = S_{i}^{+} + S_{i}^{-}$$
$$S_{i}^{x} = \frac{1}{2} \left( S_{i}^{+} + S_{i}^{-} \right)$$

Analogamente façamos para  $S_i^y,$  colocando em evidência:

$$S_i^y = \frac{S_i^+ - S_i^y}{i} \qquad \text{e também} \qquad S_i^y = \frac{S_i^x - S_i^-}{i}$$
  
anda dará: 
$$S_i^y = \frac{1}{i} \left( S_i^+ - S_i^- \right)$$

que somando, dará:  $S_i^y = \frac{1}{2i} \left( S_i^+ - S_i^- \right)$ multiplicando por  $\frac{i}{i}$ :  $S_i^y = \frac{-i}{2} \left( S_i^+ - S_i^- \right)$  resolvendo I separadamente:

$$I = S_i^x S_j^x = \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ + S_i^-\right)\right] \left[\frac{1}{2} \left(S_j^+ + S_j^-\right)\right]$$
$$I = \frac{1}{4} \left(S_i^+ S_j^+ + S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ + S_i^- S_j^-\right)$$

resolvendo II:

$$II = S_i^y S_j^y = \left[\frac{-i}{2} \left(S_i^+ - S_i^-\right)\right] \left[\frac{-i}{2} \left(S_j^+ - S_j^-\right)\right]$$
$$II = -\frac{1}{4} \left(S_i^+ S_j^+ - S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+ + S_i^- S_j^-\right).$$

Substituindo  $I \in II$  na equação (A.80) teremos:

$$\vec{S}_{i}.\vec{S}_{j} = \left[\frac{1}{4} \left(S_{i}^{+}S_{j}^{+} + S_{i}^{+}S_{j}^{-} + S_{i}^{-}S_{j}^{+} + S_{i}^{-}S_{j}^{-}\right)\right] - \left[-\frac{1}{4} \left(S_{i}^{+}S_{j}^{+} - S_{i}^{+}S_{j}^{-} - S_{i}^{-}S_{j}^{+} + S_{i}^{-}S_{j}^{-}\right) + S_{i}^{z}S_{j}^{z}\right]$$
(A.81)

fazendo o produto chegamos à:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2} \left( S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) + S_i^z S_j^z$$
(A.82)

para o caso:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_i = \underbrace{S_i^x S_i^x}_I + \underbrace{S_i^y S_i^y}_{II} + \underbrace{S_i^z S_i^z}_{III} \tag{A.83}$$

e como  $S_i^x = \frac{1}{2} \left( S_i^+ + S_i^- \right)$  e também  $S_i^y = \frac{1}{2i} \left( S_i^+ - S_i^- \right)$ 

resolvendo I separadamente:

$$I = S_i^x S_i^x = \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ + S_i^-\right)\right] \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ + S_i^-\right)\right]$$
$$I = \frac{1}{4} \left(S_i^+ S_i^+ + S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+ + S_i^- S_i^-\right)$$

 $\textbf{resolvendo} \ II:$ 

$$II = S_i^y S_i^y = \left[\frac{1}{2i} \left(S_i^+ - S_i^-\right)\right] \left[\frac{1}{2i} \left(S_i^+ - S_i^-\right)\right]$$
$$II = -\frac{1}{4} \left(S_i^+ S_i^+ - S_i^+ S_i^- - S_i^- S_i^+ + S_i^- S_i^-\right)$$

Substituindo  $I \in II$  na equação (A.83) teremos:

$$\vec{S}_{i}.\vec{S}_{i} = \frac{1}{4} \left( S_{i}^{+}S_{i}^{+} + S_{i}^{+}S_{i}^{-} + S_{i}^{-}S_{i}^{+} + S_{i}^{-}S_{i}^{-} \right) - \frac{1}{4} \left( S_{i}^{+}S_{i}^{+} - S_{i}^{+}S_{i}^{-} - S_{i}^{-}S_{i}^{+} + S_{i}^{-}S_{i}^{-} \right) + S_{i}^{z}S_{i}^{z}$$
(A.84)

$$\vec{S}_{i}.\vec{S}_{i} = \frac{1}{4} \left( 2S_{i}^{+}S_{i}^{-} + 2S_{i}^{-}S_{i}^{+} \right) + (S_{i}^{z})^{2}$$
$$\vec{S}_{i}.\vec{S}_{i} = \frac{1}{2} \left( S_{i}^{+}S_{i}^{-} + S_{i}^{-}S_{i}^{+} \right) + (S_{i}^{z})^{2}.$$
(A.85)

Para o caso de  $S^2$ , basta lembrar que:

$$S^{2} = (S^{x})^{2} + (S_{i}^{y})^{2} + (S_{i}^{z})^{2}$$

$$S^{2} = \left[\frac{1}{2}\left(S_{i}^{+} + S_{i}^{-}\right)\right]^{2} + \left[-\frac{i}{2}\left(S_{i}^{+} - S_{i}^{-}\right)\right]^{2} + (S_{i}^{z})^{2}$$

$$S^{2} = \frac{1}{2}\left(S_{i}^{+}S_{i}^{-} + S_{i}^{+}S_{i}^{-}\right) + (S_{i}^{z})^{2}$$
(A.86)

Consideremos agora a T.F temporal da equação de movimento da função de Green equação (A.49):

$$E << A(t), B(t') >>_E = \frac{1}{2\pi} < [A(t), B(t')] > + << [A(t), H]; B(t') >>_E$$

que pode ser reescrita para o caso de spin, como:

$$E\langle\langle S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\langle [S_l^+; S_m^-]\rangle + \langle\langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle\rangle_E \tag{A.87}$$

observe que na equação acima aparece a Hamiltoniana H, que agora podemos reescrevê-la (A.49)substituindo a equação (A.82):

$$H = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] - h \sum_i S_i^z.$$
(A.88)

Lembrando das relações de comutação temos:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} S_i^+, S_j^- \end{bmatrix}}_{I} = 2S_i^z \delta_{ij} \quad e \quad \underbrace{\begin{bmatrix} S_i^\pm, S_j^z \end{bmatrix}}_{II} = \mp S_i^\pm \delta_{ij}$$

para que possamos escrever completamente a T.F da equação de movimento da função de Green, calculamos separadamente o comutador  $[S_l^+; H]$ :

$$\left[S_{l}^{+};H\right] = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \frac{1}{2} \left\{ \left[S_{l}^{+}, S_{i}^{+}S_{j}^{-}\right] + \left[S_{l}^{+}, S_{i}^{-}S_{j}^{+}\right] \right\} + \left[S_{l}^{+}, S_{i}^{z}S_{j}^{z}\right] - h\sum_{i} \left[S_{l}^{+}, S_{i}^{z}\right] \right\}$$

calculando separadamente o **primeiro comutador:** 

$$\begin{bmatrix} S_{l}^{+}, S_{i}^{+}S_{j}^{-} \end{bmatrix} = S_{i}^{+}\underbrace{\begin{bmatrix} S_{l}^{+}, S_{j}^{-} \end{bmatrix}}_{I} + \begin{bmatrix} S_{l}^{+}, S_{i}^{+} \end{bmatrix} S_{j}^{-}$$
$$\begin{bmatrix} S_{l}^{+}, S_{i}^{+}S_{j}^{-} \end{bmatrix} = 2S_{i}^{+}S_{j}^{z}\delta_{ji}$$

para o cálculo do **segundo comutador:** 

$$\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^- S_j^+ \end{bmatrix} = S_i^- \begin{bmatrix} S_l^+, S_j^+ \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^- \end{bmatrix}}_I S_j^+$$
$$\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^- S_j^+ \end{bmatrix} = 2S_i^z S_j^+ \delta_{il}$$

para o terceiro comutador:

$$\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^z S_j^z \end{bmatrix} = S_i^z \underbrace{\begin{bmatrix} S_l^+, S_j^z \end{bmatrix}}_{II} + \underbrace{\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^z \end{bmatrix}}_{II} S_j^z$$
$$\begin{bmatrix} S_l^+, S_i^z S_j^z \end{bmatrix} = -S_i^z S_j^+ \delta_{jl} - S_i^+ S_j^z \delta_{il}$$

para o quarto comutador:

$$\left[S_l^+, S_i^z\right] = -S_i^+ \delta_{il}$$

reescrevendo o comutador  $[S_l^+, H]$ :

$$\left[S_{l}^{+};H\right] = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \left\{S_{i}^{+}S_{j}^{z}\delta_{ji} + S_{i}^{z}S_{j}^{+}\delta_{il} - S_{i}^{z}S_{j}^{+}\delta_{jl} - S_{i}^{+}S_{j}^{z}\delta_{il}\right\} + h\sum_{i} S_{i}^{+}\delta_{il}$$

fazendo primeiramente a soma em j:

$$\begin{bmatrix} S_l^+; H \end{bmatrix} = -\sum_i J_{ij} S_i^+ S_l^z - \sum_i \sum_j J_{ij} S_i^z S_j^+ \delta_{il} + \sum_i J_{ij} S_i^z S_l^+ + \sum_i \sum_j J_{ij} S_i^+ S_j^z \delta_{il} + h \sum_i S_i^+ \delta_{il}$$

fazendo primeiramente a soma em i:

$$[S_l^+;H] = -\sum_i J_{ij}S_i^+S_l^z - \sum_j J_{ij}S_l^zS_j^+ + \sum_i J_{ij}S_i^zS_l^+ + \sum_j J_{ij}S_l^+S_j^z + h\sum_i S_l^+$$

agrupamos os termos que tem $\sum_i$ e $\sum_j:$ 

$$\left[S_{l}^{+};H\right] = -\sum_{j} J_{lj} \left(S_{l}^{z}S_{j}^{+} - S_{l}^{+}S_{j}^{z}\right) \sum_{i} J_{il} \left(S_{i}^{+}S_{l}^{z} - S_{i}^{z}S_{l}^{+}\right) + ij + h\sum_{i} S_{l}^{+}$$

façamos  $\sum_i = \sum_j,$  corre todos os sítios da rede. Portantoi=j

$$[S_l^+;H] = -\sum_j J_{lj} \left( \underbrace{S_l^z S_j^+ + S_j^+ S_l^z}_{I} \underbrace{-S_l^+ S_j^z - S_j^z S_l^+}_{I} \right) + h \sum_i S_l^+ \quad (A.89)$$

reescrevendo as relações de comutação, lembrando que os sítios são diferentes, logo $\delta=0,\, {\rm assim}:$ 

$$\left[S_j^+, S_l^z\right] = -S_l \delta_{lj} = 0$$

$$S_j^+ S_l^z - S_l^z S_j^+ = 0 \implies S_j^+ S_l^z = S_l^z S_j^+$$
$$\begin{bmatrix} S_l^+, S_j^z \end{bmatrix} = -S_j \delta_{jl} = 0$$
$$S_l^+ S_j^z - S_j^z S_l^+ = 0 \implies S_l^+ S_z^z = S_j^z S_l^+$$

reescrevendo a equação (A.89)

$$[S_{l}^{+};H] = -2\sum_{j} J_{lj} \left(S_{l}^{z}S_{j}^{+} - S_{j}^{z}S_{l}^{+}\right) + h\sum_{i} S_{l}^{+} \text{ ou ainda:}$$
$$[S_{l}^{+};H] = 2\sum_{j} J_{lj} \left(S_{j}^{z}S_{l}^{+} - S_{l}^{z}S_{j}^{+}\right) + h\sum_{i} S_{l}^{+}$$
(A.90)

recordando a equação (A.87), aplicando a relação de comutação:

$$E\langle\langle S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \underbrace{\langle [S_l^+; S_m^-] \rangle}_I + \langle\langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle\rangle_E \tag{A.91}$$
$$E\langle\langle S_l^+; S_m^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} 2 < S_l^z > \delta_{lm} + \langle [S_l^+, H]; S_m^- \rangle\rangle_E$$

a equação anterior pode ser reescrita substituindo o comutador da equação (A.90):

$$E\langle\langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} = \frac{1}{\pi} \langle S_{l}^{z} \rangle \delta_{lm} + 2\sum_{j \neq l} J_{lj} \langle S_{j}^{z} S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} - 2\sum_{j \neq l} J_{lj} \langle S_{l}^{z} S_{j}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} + h \langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E}$$
$$(E - h)\langle\langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} = \frac{1}{\pi} \langle S_{l}^{z} \rangle \delta_{lm} + 2\sum_{j \neq l} J_{lj} \left( \langle S_{j}^{z} S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} - \langle S_{l}^{z} S_{j}^{+}; S_{m}^{-} \rangle\rangle_{E} \right).$$
(A.92)

Essa equação é exata e representa um sistema de equações acopladas. O segundo membro apresenta F.G., de ordem superior ao do primeiro, devemos introduzir uma aproximação para baixar a ordem das funções e assim torná-las solúveis. Usaremos uma aproximação para o caso  $S = \frac{1}{2}$ , a chamada Aproximação das Fases Aleatórias (RPA). A RPA consiste em desprezar as correções entre as fases das componentes longitudinais  $S_i^z$  e transversais  $S_j^+$  para spins em sítios diferentes  $(i \neq j)$ , substituindo a componente  $S_i^z$  pela sua média estatística  $\langle S_i^z \rangle$ :

$$<< S_i^+ S_j^z; S_m^- >> \approx < S_j^z ><< S_i^+; S_m^- >>$$

assim:

$$\begin{cases} << S_j^z S_l^+; S_m^- >>_E \approx < S_j^z > << S_l^+; S_m^- >> \\ << S_j^z S_l^+; S_m^- >>_E \approx < S_j^z > G_{lm}^{+-}(E) \\ \\ << S_l^z S_j^+; S_m^- >>_E \approx < S_l^z > << S_j^+; S_m^- >> \\ << S_l^z S_j^+; S_m^- >>_E \approx < S_l^z > G_{jm}^{+-}(E) \end{cases}$$

é fácil ver que  $G_{lm}^{+-}(E) = << S_l^+; S_m^- >>$  e  $G_{jm}^{+-}(E) = << S_j^+; S_m^- >>$  podemos agora reescrever a equação (A.92):

$$(E-h)\langle\langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-}\rangle\rangle_{E} = \frac{1}{\pi} \langle S_{l}^{z} \rangle_{lm} + 2\sum_{j \neq l} J_{lj} \left( \langle S_{j}^{z} \rangle \langle S_{l}^{+}; S_{m}^{-} \rangle \rangle - \langle S_{l}^{z} \rangle \langle S_{j}^{+}; S_{m}^{-} \rangle \rangle \right)$$
(A.93)

fazendo a distributiva, temos:

$$(E-h)\langle\langle S_l^+; S_m^-\rangle\rangle_E = \frac{1}{\pi} < S_l^z > \delta_{lm} + 2\sum_{j\neq l} J_{lj} < S_j^z > << S_l^+; S_m^- >> -2\sum_{j\neq l} J_{lj} < S_l^z > << S_j^+; S_m^- >> . \quad (A.94)$$

A equação (A.93) é uma aproximação da equação (A.92). As F.G., são todas de primeira ordem , mas ainda acopladas a diferentes sítios da rede. Saindo do espaço real e indo para a rede recíproca, fazendo a Transformada de Fourier:

$$<< S_l^+, S_m^- >>_E = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}$$
 (A.95)

onde a transformada inversa é dada por:

$$G_{\vec{K}}(E) = \sum_{l-m} << S_l^+, S_m^- >>_E e^{-i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}$$

podemos escrever a função delta de Kronecker do seguinte modo:

$$\delta_{\vec{l}\vec{m}} = \frac{1}{N} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}$$
(A.96)

onde N é o número de células unitárias do cristal e  $\vec{k}$  são vetores de onda da primeira zona de Brillouim. Devido à simetria translacional  $\langle S_l^z \rangle = \langle S^z \rangle$ , independente do ponto da rede. Substituindo as equações (A.95) e (A.96) em (A.94):

$$(E-h)\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}G_{\vec{k}}(E)e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} = \frac{1}{\pi} < S_l^z > \frac{1}{N}e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} + 2\sum_{j\neq l}J_{lj} < S_j^z > \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}G_{\vec{k}}(E)e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} - 2\sum_{j\neq l}J_{lj} < S_l^z > \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}G_{\vec{k}}(E)e^{i\vec{k}(\vec{j}-\vec{m})}$$
(A.97)

$$(E - h - 2\sum_{j \neq l} J_{lj} < S_j^z >) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{m})} + 2\sum_{j \neq l} J_{lj} < S_l^z > \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{m})} e^{i\vec{k}(\vec{j} - \vec{l})} = \frac{1}{\pi} < S_l^z > \frac{1}{N} e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{m})}.$$
(A.98)

Nos dois lados da equação acima, as somas são iguais, sobra que:

$$(E - h - 2\sum_{j \neq l} J_{lj} < S_j^z >) G_{\vec{k}}(E) = \frac{1}{\pi} < S_l^z > -2\sum_{j \neq l} J_{lj} < S_l^z > G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}(\vec{j} - \vec{k}.99)}$$

onde  $J_{(0)}=\sum_{j\neq l}J_{lj}$ e $J_{(k)}=\sum_{j\neq l}J_{lj}e^{-i\vec{k}(\vec{l}-\vec{j})}$ que substituindo acima, dará:

$$(E - h - 2J_{(0)} < S_j^z >)G_{\vec{k}}(E) = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi} - 2J_{(k)} < S_l^z > G_{\vec{k}}(E)$$

$$\begin{split} (E - h - 2J_{(0)} < S_j^z >) G_{\vec{k}}(E) + 2J_{(k)} < S_l^z > G_{\vec{k}}(E) = \frac{< S_l^z >}{\pi} \\ G_{\vec{k}}(E)(E - h - 2J_{(0)} < S_j^z > + 2J_{(k)} < S_l^z >) = \frac{< S_l^z >}{\pi} \\ G_{\vec{k}}(E)(E - h - 2 < S_j^z > (J_{(0)} - J_{(k)}) = \frac{< S_l^z >}{\pi} \end{split}$$

onde  $E_{(\vec{k})} = h + 2 < S_j^z > (J_{(0)} - J_{(k)})$  ou  $-E_{(\vec{k})} = -h - 2 < S_j^z > (J_{(0)} - J_{(k)})$  assim:

$$G_{\vec{k}}(E)(E-E_{\vec{k}}) = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi}$$

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}.$$
 (A.100)

Para obter a magnetização é necessário conhecer  $\langle S_l^+, S_m^- \rangle >_E$  e a correspondente densidade espectral, assim substituímos a equação anterior na equação (A.95), que é:

$$<< S_l^+, S_m^- >>_E = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}$$
$$<< S_l^+, S_m^- >>_E = \frac{1}{N\pi} \sum_{\vec{k}} < S^z > \frac{e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}}{E - E_{\vec{k}}}$$

. A densidade espectral é dada pela substituição da equação (A.77) na equação acima, reescrevendo assim a equação (A.77):

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

$$J_{(E)} = \frac{i}{(e^{\beta E} - \eta)} \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left( \langle \langle S_l^+, S_m^- \rangle \rangle_{E=w+i\varepsilon} - \langle \langle S_l^+, S_m^- \rangle \rangle_{E=w-i\varepsilon} \right)$$

$$J_{(E)} = \frac{i}{(e^{\beta E} - \eta)} \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left[ \frac{\langle S^z \rangle}{N\pi} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{m})} \left( \frac{1}{E - E_{(\vec{k})} + i\varepsilon} - \frac{1}{E - E_{(\vec{k})} - i\varepsilon} \right) \right]$$
we like a ground as a magnitude day.

aplicando a propriedade:

$$-2\pi i\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left(\frac{1}{x+i\varepsilon} - \frac{1}{x-i\varepsilon}\right)$$
$$J_{(E)} = \frac{-2i\pi i\delta(E-E_{(\vec{k})})}{e^{\beta E} - \eta} \frac{\langle S^z \rangle}{N\pi} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}$$

que escrevendo melhor:

$$J_{(E)} = \frac{2}{N} \frac{\langle S^z \rangle}{(e^{\beta E} - \eta)} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{m})} \delta(E - E_{(\vec{k})}).$$
(A.101)

A densidade espectral está ligada a função de correlação por:

$$\langle S_l^+ S_m^- \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(E) e^{-iE(t-t')} dE$$

substituindo a equação anterior na equação (A.101):

$$< S_l^+ S_m^- >= \frac{2}{N} < S^z > \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(E - E_{(\vec{k})})e^{-iE(t-t')}}{(e^{\beta E} - \eta)} dE \quad (A.102)$$

aplicando na equação anterior a seguinte propriedade da função delta:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(a-x)dx = f(a)$$

$$\langle S_l^+ S_m^- \rangle = \frac{2}{N} \langle S^z \rangle \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} \frac{e^{-iE(t-t')}}{(e^{\beta E} - \eta)}$$
 (A.103)

considerando  $t=t^\prime$  e l=m , reescrevemos a equação anterior:

$$\langle S_l^+ S_l^- \rangle = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\langle S^z \rangle}{(e^{\beta E} - \eta)}.$$
 (A.104)

Para o caso especial de spin  $\frac{1}{2}$  reescrevemos a equação (A.85):

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_i = \frac{1}{2} \left( S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+ \right) + (S_i^z)^2$$
(A.105)

considere a propriedade:  $S_i^+ S_i^- - S_i^- S_i^+ = 2S_i^z$ 

$$S_i^+ S_i^- = 2S_i^z + S_i^- S_i^+$$

que substituindo na equação (A.105):

$$\vec{S}_{i} \cdot \vec{S}_{i} = \frac{1}{2} \left( 2S_{i}^{z} + S_{i}^{-}S_{i}^{+} + S_{i}^{-}S_{i}^{+} \right) + (S_{i}^{z})^{2}$$

$$(S_{i})^{2} = S_{i}^{z} + S_{i}^{-}S_{i}^{+} + (S_{i}^{z})^{2}$$

$$S_{i}^{z} = (S_{i})^{2} - S_{i}^{-}S_{i}^{+} + (S_{i}^{z})^{2}$$
(A.106)

considere outra propriedade:  $S_i^2 = {\cal S}({\cal S}+1)$  que substituindo acima dará:

$$S_i^z = S(S+1) - S_i^- S_i^+ + (S_i^z)^2$$

substituindo $S=\frac{1}{2}$ 

$$S_i^z = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - S_i^- S_i^+ + \left( \frac{1}{2} \right)^2$$
$$S_i^- S_i^+ = \frac{1}{2} - S_i^z$$

pode ser reescrito como:  $< S_i^- S_i^+ > = \frac{1}{2} - < S_i^z >$ 

recordando a equação (A.104):

$$\langle S_l^+ S_l^- \rangle = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\langle S^z \rangle}{(e^{\beta E} - \eta)}$$
 (A.107)

chamaremos

$$\Phi(T) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{(e^{\beta E_{(\vec{k})}} - 1)} \quad com \ E_{(\vec{k})} \ge 0 \tag{A.108}$$

reescrevendo a equação (A.107):

$$< S_l^+ S_l^- >= 2 < S^z > \Phi(T)$$

$$\frac{1}{2} - < S_i^z >= 2 < S^z > \Phi(T)$$

$$< S^z > +2 < S^z > \Phi(T) = \frac{1}{2}$$

que finalmente dá a magnetização:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1/2}{1+2\Phi(T)}.$$
 (A.109)

O estado fundamental é obtido quando  $\Phi(T)=0,$  onde teremos:  $< S^z >= \frac{1}{2}$ 

Limite  $T \ll T_c$ 

O objetivo agora consiste em expandir  $\Phi(T)$ . Para  $T \ll 1$ ,  $\Phi(T)$  será muito pequeno e assim podemos expandir a expressão (A.109) da seguinte maneira:

Consideramos a seguinte expansão:

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

então:

$$< S^{z>} = rac{1}{2} rac{1}{1 + 2\Phi(T)}$$

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

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

Reescrevendo a equação A.108 considerando a primeira zona de Brillouim:

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

 $\operatorname{com}$ 

$$d^{3}k = \sin(\Phi)d\theta d\phi \quad \text{isto } \acute{e}:$$

$$\Phi(T) = \frac{a^{3}}{8\pi^{3}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k^{2} dk \sin(\theta) d\theta d\phi \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1}$$

$$\Phi(T) = \frac{a^{3}}{8\pi^{3}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} k^{2} dk \sin(\theta) d\theta \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1} \phi \mid_{0}^{2\pi}$$

$$\Phi(T) = \frac{a^{3}}{4\pi^{2}} \int_{0}^{\infty} k^{2} dk \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1} (-\cos\theta) \mid_{0}^{\pi}$$

$$\Phi(T) = \frac{a^{3}}{4\pi^{2}} \int_{0}^{\infty} k^{2} dk \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1} (1 + 1)$$

$$\Phi(T) = \frac{a^{3}}{2\pi^{2}} \int_{0}^{\infty} k^{2} dk \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1}.$$
(A.110)

Expandindo o denominador em série de potências, onde  $\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots$ :

$$\frac{1}{e^{\beta E_{(K)}} - 1} = \frac{e^{-\beta E_k} 1}{1 \underbrace{-e^{-\beta E_{(k)}}}_x} = e^{-\beta E_{(k)}} \left[ 1 + e^{-\beta E_{(k)}} + e^{-2\beta E_{(k)}} + \dots \right]$$
$$\frac{1}{e^{\beta E_{(K)}} - 1} = e^{-\beta E_{(k)}} + e^{-2\beta E_{(k)}} + e^{-3\beta E_{(k)}} + \dots = \sum_{l=1}^{\infty} e^{-l\beta E_{(K)}},$$

reescrevemos agora a equação (A.110):

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

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

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

$$\Phi(T) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^\infty dq q^2 e^{-l\beta E_{(k)}}$$
(A.111)

O próximo passo é expandir E(k) para valores pequenos de K. Como já definido anteriormente, temos para uma rede cubica simples:

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

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

Para k = 0, J(0) = 6J. A expansão de J(k) para  $ka \ll 1$  é dada pela expansão do |cos:

$$\begin{split} J(k) &= 2J \left[ 1 - \frac{kx^2a^2}{2!} + \frac{kx^4a^4}{4!} - \frac{kx^6a^6}{6!} + \ldots \right] \\ & \left[ 1 - \frac{ky^2a^2}{2!} + \frac{ky^4a^4}{4!} - \frac{ky^6a^6}{6!} + \ldots \right] \\ & \left[ 1 - \frac{kz^2a^2}{2!} + \frac{kz^4a^4}{4!} - \frac{kz^6a^6}{6!} + \ldots \right] \end{split}$$

$$J(k) = 2J \left[ 3 - \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4!} \left( q_x^4 + q_y^4 + q_z^4 \right) - \frac{1}{6!} \left( q_y^6 + q_z^6 + q_x^6 \right) \right]$$
$$J(k) = J \left[ 6 - q^2 + \frac{1}{12} \left( q_x^4 + q_y^4 + q_z^4 \right) - \frac{1}{360} \left( q_y^6 + q_z^6 + q_x^6 \right) \right]$$

onde  $q^2 = (K_x a)^2 + (K_y a)^2 + (K_z a)^2$  Podemos então reescrever J(k):

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

como já mostrado anteriormente, consideraremos um campo magnético externo nulo:

$$\begin{split} E_{(\vec{k})} &= h + 2(J_{(0)} - J_{(k)}) \frac{1}{2} \\ E_{(\vec{k})} &= (6J - 6J + Jq^2 - \frac{J}{12}Q_1^4 + \frac{J}{360}Q_2^6 + \dots \\ E_{(\vec{k})} &= Jq^2 - \frac{J}{12}Q_1^4 + \frac{J}{360}Q_2^6 + \dots \end{split}$$

Podemos reescrever a equação (A.111):

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

que pode ser escrita como:

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

que resolvendo a integral da equação anterior, obtemos:

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

os coeficientes são:

$$a = \left(\frac{k_B}{4\pi J}\right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3/2)$$
$$b = \frac{3}{128\pi^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{k_B}{J}\right)^{\frac{5}{2}} \zeta(5/2)$$
$$c = \frac{33\pi^2}{32} \left(\frac{k_B}{4\pi J}\right)^{\frac{7}{2}} \zeta(7/2).$$

## 6-Limite $T \to T_c$

A temperatura crítica  $(T_c)$  indica o limite em que a magnetização vai a zero ( $< S^z > \rightarrow 0$ ). Portanto,  $\sigma \Phi(T)$  é muito grande, e assim, através de uma expansão em  $< S^z >$  determinaremos uma expressão para  $T_c$ . Assim, reescrevemos a equação (A.108) na forma de integral:

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} d^3k \frac{1}{e^{\beta E_{(k)}} - 1}$$
(A.112)

lembrando que:

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

Substituindo E(k) em (A.112), dará:

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} d^3k \frac{1}{e^{\beta 2 \langle S^z \rangle (J_{(0)} - J_{(k)})} - 1}$$
(A.113)

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

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

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

com isso podemos reescrever a equação (A.113):

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

$$\Phi(T) = \frac{V_0}{16\pi^3\beta < S^z >} \int_{ZB} \frac{d^3k}{[J(0) - J(k)]} + \Theta(1).$$
(A.114)

Recordando a equação (A.109),

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

vemos que ela pode ser escrita como: < S<sup>z</sup> >=  $\frac{1}{2+4\Phi(T)}$ , mas próximo de  $T_c$  nota-se que  $\Phi(T) \gg 1$  então podemos reescrevê-la:

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

$$1 = 4 \langle S^{z} \rangle \Phi(T)$$
(A.115)

em seguida, substituímos a equação (A.114) na (A.115):

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

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3k}{J(0) - J(k)}.$$
 (A.116)

Podemos reescrever a equação anterior da seguinte forma:

$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2V_0}{8\pi^3 J(0)} \int_{ZB} \frac{d^3 k}{[J(0) - J(k)]/J(0)}$$
$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2}{J(0)} \underbrace{\frac{V_0}{8\pi^3} \int_{ZB} \frac{d^3 k}{1 - \frac{J(k)}{J(0)}}}_{F(-1)}$$
$$\frac{1}{k_B T_c} = \frac{2}{6J} F(-1) \implies \frac{K_B T_c}{J} = \frac{6}{2F(-1)}$$

## **Referências Bibliográficas**

- A.K. Salem, P.C. Searson, e K.W. Leong. Multifunctional nanorods for gene delivery. Nature Mater., 2:668–671, 2003.
- [2] HINCHEY, L. L., MILLS, D. L., *Phys. Rev. B* 33, 3329 (1986).
- [3] K.de Bell, A.B. Maclsaac, e J.P. Whitehead, Rev. Mod. Phys 72, (2000).
- [4] S.V.Maleev, e H. Wagner, Sov. Phys. JETP 43, 1240-1246, (1976).
- [5] M.H.Cohen e F. Keffer, *Phys. Rev.* **99**,1128, (1955).
- [6] D.P.Papas, K.P.Kamper e H.Hopster, *Phys. Rev.***64**, 3179, (1990).
- [7] Arllett, J., J.P. Whitehead, A.B Maclsaac, e K. De'Bell, Phys. Rev. B 54, 3394-3402, (1996).
- [8] W.K., J. Heisenberg, *Phys* **49**, 619, (1928).
- [9] J.dos S. C. Neto, Tese de doutoramento, UFSCar, (2004).
- [10] N.D.Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133, (1966).
- [11] Eisberg, Robert, Física Quântica, Rio de Janeiro: Campus, (1979).
- [12] C.Kittel, Introdução à Física do Estado Sólido, Editora Guanabara, 5 ed., (1978).
- [13] M.P.P.Fonseca, Magister Scientiae, UFV-Minas Gerais, (2003).

- [14] F.Keffer, Handbuch der Physik, 18, pt. 2, New York: Springer-Verlag, (1966).
- [15] P.Heller, Rep. Progr. Phys., 30, (pt II), 731, (1967).
- [16] G.J.B.Rodríguez, Rev. Bras. de Ens. de Física, vol. 20, n 4, (1998).
- [17] A.M.C. de Castro, Dissertação de mestrado, Centro Brasileiro de Pesquisas
   Físicas, CBPF (2007)
- [18] A.S.Arruda, N Majilis e S. Selzer, *Phys. Rev. B* 51, 3933, (1995).
- [19] A.S.Arruda, Tese de doutoramento, UFF, (1995).
- [20] H.N.Nazareno, Mecânica Estatística e Funções de Green, Editora UNB (1986).
- [21] D.N.Zubarev, Sov. Phys. Uspekhi 3, 320, (1960).
- [22] N.N. Bogolyubov e S.V. Tyablikov, Sov. Phys. Dokl. 4, 604, (1959).
- [23] R.A.Tahir-Kheli, 1963, *Phys. Rev* **132**, 689, (1963).
- [24] A.C.Hewson e D. Ter Haar, *Physica* **30**, 890, (1964).
- [25] S. Selzer e N. Majlis, Phys. Rev.26, 404, (1981).

# Livros Grátis

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

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 Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo