

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

MAGNETISMO DE SUPERFÍCIE PARA MODELOS FERROMAGNÉTICOS ANISOTRÓPICOS

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA A UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS.

JOAQUIM NESTOR BRAGA DE MORAES

FLORIANÓPOLIS
SANTA CATARINA - BRASIL
JULHO - 1990

MAGNETISMO DE SUPERFICIE PARA MODELOS FERROMAGNETICOS
ANISOTRÓPICOS

JOAQUIM NESTOR BRAGA DE MORAES

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

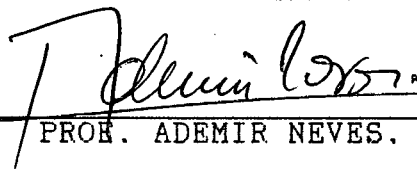
"MESTRE EM CIENCIAS"

ESPECIALIDADE EM FÍSICO-QUÍMICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO



PROF. WAGNER FIGUEIREDO, DR.

ORIENTADOR



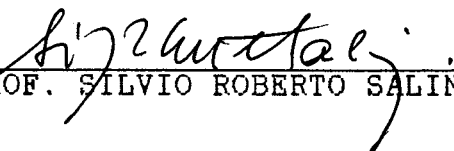
PROF. ADEMIR NEVES, DR.

COORDENADOR

BANCA EXAMINADORA



PROF. WAGNER FIGUEIREDO, DR.



PROF. SILVIO ROBERTO SALINAS, DR.



PROF. NILTON DA SILVA BRANCO, DR.

AGRADECIMENTOS

Ao Departamento de Física da UFSC.

Ao Professor Wagner Figueiredo pelo paciente e minucioso trabalho de orientação e pelo incentivo constante.

A Marilena pelo apoio e incentivo.

Ao Norberto Majlis pelas valiosas discussões.

Aos funcionários do NPD/UFSC pelo apoio no trabalho de computação.

RESUMO

Consideramos neste trabalho um modelo de Heisenberg anisotrópico em uma rede cúbica semi-infinita dentro do formalismo das funções de Green na Aproximação de Fases Aleatórias (Random Phase Approximation). Analisamos as diferentes possíveis configurações para os parâmetros de anisotropia da superfície e do volume. Por simplicidade consideramos em nossos cálculos que a magnetização do terceiro plano já é igual à do volume. Obtivemos o perfil da magnetização de superfície e o espectro de energia das ondas de spin para diferentes configurações dos parâmetros de anisotropia. Em particular comparamos nossos resultados para os pontos multicríticos, obtidos via funções de Green, com os obtidos por Mariz, Costa e Tsallis⁽¹⁰⁾ através de cálculos de Grupo de Renormalização.

ABSTRACT

In this work we consider an anisotropic Heisenberg model on a semi-infinite cubic lattice within the Green's function formalism and Random Phase Approximation. We analyse the different possible configurations for the surface and bulk anisotropy parameters. In our calculations we have assumed for simplicity that the magnetization of the third plane equals the bulk value. For the different configurations of the anisotropy parameters we have obtained the profile of the surface magnetization and the energy spectrum for the spin-waves. In particular we have compared our Green's functions results for the multicritical points with the Renormalization Group calculations performed by Mariz, Costa and Tsallis⁽¹⁰⁾.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

	PAG.
FIGURA 1 - Temperatura crítica reduzida (τ_c) em função do parâmetro de anisotropia (ε).	20
FIGURA 2 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para diferentes valores do parâmetro de anisotropia (ε).	20
FIGURA 3 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{//})$ para $\varepsilon=0.50$ e $\frac{T}{T_c} = 0.179$	21
FIGURA 4 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{//})$ para $\varepsilon=0.50$ e $\frac{T}{T_c} = 0.774$	21
FIGURA 5 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{//})$ para $\varepsilon=0.50$ e $\frac{T}{T_c} = 0.976$	22
FIGURA 6 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{//})$ para $\varepsilon=0.30$ e vários valores de T/T_c : $\frac{T}{T_c}=0.213$; $\frac{T}{T_c}=0.870$; e $\frac{T}{T_c}=0.994$	22

FIGURA 7	- Esquema das interações de intercâmbio	24
FIGURA 8	- Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\varepsilon_s=0.50$; $\varepsilon_v=0.50$; RJ=2.00 ...	48
FIGURA 9	- Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\varepsilon_s=0.50$; $\varepsilon_v=0.10$; RJ=5.00	48
FIGURA 10	- Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\varepsilon_s=0.30$; $\varepsilon_v=0.50$; RJ=2.00	51
FIGURA 11	- Temperatura crítica de superfície (τ_c^s) em função do parâmetro RJ para $\varepsilon_s=0.50$; $\varepsilon_v=0.10$	51
FIGURA 12	- Temperatura crítica de superfície (τ_c^s) em função do parâmetro RJ para $\varepsilon_s=0.30$; $\varepsilon_v=0.50$	52
FIGURA 13	- Temperatura crítica de superfície relativa (τ_c^s/τ_c^v) em função do parâmetro de anisotropia de superfície (ε_s) para: $\varepsilon_v=0.10$; RJ _c = 4.09 ..	52
FIGURA 14	- Parâmetro de acoplamento de superfície (RJ) em função dos parâmetros de anisotropia de superfície (ε_s) e de volume (ε_v)	54

FIGURA 15 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s=0.50$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=1.00 e diferentes valores do parâmetro de intercâmbio entre a superfície e o 2^o plano (J_{\perp}) 59

FIGURA 16 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{\parallel})$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=1,12 $\tau = 0.0189$; $\tau_c^v = 0.0839$ 61

FIGURA 17 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{\parallel})$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=1.12; $\tau = 0.0837$; $\tau_c^v = 0.0839$ 61

FIGURA 18 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{\parallel})$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=0.56; $\tau = 0.0837$; $\tau_c^v = 0.0839$ 63

FIGURA 19 - Energia das ondas de spin ($E_{\vec{k}_{\parallel}}$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=1.96 ; $\vec{k}_{\parallel}(0,0,0)$ 63

FIGURA 20 - Energia das ondas de spin ($E_{\vec{k}_{\parallel}}$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; RJ=1.96 ; $\vec{k}_{\parallel}(\pi/a,0,\pi/a)$ 64

SUMARIO

	PAG.
Agradecimentos.....	iii
Resumo.....	iv
Abstract.....	v
Lista de Figuras.....	vi
CAPITULO 1 - Introdução.....	01
CAPITULO 2 - Função de Green para um Sistema Ferromagnético de Heisenberg Anisotrópico.....	06
CAPITULO 3 - Função de Green para um Sistema Ferromagnético de Heisenberg Semi-Infinito.....	23
CAPITULO 4 - Resultados.....	47
CAPITULO 5 - Conclusões.....	66
APÊNDICE.....	70
BIBLIOGRAFIA.....	76

CAPITULO 1

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos tem havido um grande interesse teórico⁽¹⁻¹⁵⁾ e experimental⁽¹⁶⁻²¹⁾ nos problemas relativos ao ordenamento magnético de superfícies. Do ponto de vista teórico, diversas técnicas têm sido utilizadas no estudo do magnetismo de superfície: Teorias de Campo Efetivo⁽¹⁻¹⁵⁾, Expansões em Séries de Altas Temperaturas⁽⁶⁾, Simulação de Monte Carlo⁽⁷⁾, Grupo de Renormalização⁽⁸⁻¹¹⁾, Método das Funções de Green⁽¹²⁻¹⁵⁾. Do ponto de vista experimental diversas técnicas têm sido empregadas que permitem analisar a magnetização das primeiras camadas de uma amostra magnética. Entre as técnicas mais usadas destacamos a difração de elétrons polarizados de baixa energia, espectroscopia de captura de elétrons, ressonância de spins eletrônicos, etc.. Uma revisão destes métodos pode ser encontrada nos trabalhos de N.Majlis⁽²²⁾ e Celotta e Pierce⁽²³⁾. Uma revisão sobre os diversos tratamentos teóricos com ênfase particular para o modelo de Ising, pode ser encontrado no trabalho de Binder⁽²⁴⁾, volume 8 da coleção Domb e Lebowitz.

Um dos problemas mais interessantes no magnetismo de superfícies é o aparecimento de uma fase ferromagnética acima da temperatura crítica de volume. Por exemplo, considerando-se uma rede semi-infinita de átomos magnéticos, é possível obter, a partir de uma dada temperatura, uma configuração do sistema, na qual apenas os planos próximos à superfície estão ordenados, enquanto

que os planos mais internos estão numa fase paramagnética. Esse comportamento tem sido observado em diferentes experimentos realizados nos últimos anos. Por exemplo, para o íon terra rara gadolínio, observou-se⁽¹⁹⁾ que a temperatura crítica desse cristal é de 293K, enquanto que o ordenamento magnético de superfície persiste até uma temperatura de 307K. Esse tipo de comportamento também tem sido observado em outros elementos, como por exemplo, no terbio (Tb).

Devemos ressaltar que embora já exista uma considerável quantidade de informações sobre este tipo de ordenamento, os mecanismos básicos que levam a essas transições não são suficientemente conhecidos. Por exemplo, informações acerca do tipo de ordenamento (ferro ou antiferromagnético), magnitude dos diferentes acoplamentos de intercâmbio e se o mecanismo de ordenamento é devido a spins localizados ou itinerantes, não são ainda suficientemente conhecidos.

Por isso, a maioria dos cálculos realizados até o presente nessa área fornecem apenas informações qualitativas sobre o comportamento experimental. Na maioria das situações consideradas, o modelo de spins localizados tem sido o mais estudado, com ênfase particular nas propriedades do modelo de Ising em sistemas semi-infinitos⁽²⁴⁾. O estudo do modelo de Heisenberg em sistemas semi-infinitos é muito interessante, pois além de podermos estudar os aspectos relativos ao ordenamento de superfície, podemos também obter informações sobre o espectro de energia das ondas de spin. Neste caso, a análise é um pouco mais complexa, pois devido à quebra da simetria translacional em três dimensões, poderemos agora ter ondas de spin cujas amplitudes decrescem rapidamente a partir

da superfície. Isso nos permite distinguir modos de excitação localizados daqueles que se estendem por sobre todo o volume cristalino.

Neste trabalho consideramos um modelo de Heisenberg anisotrópico numa rede cúbica semi infinita. O modelo que estudamos permite que, através de uma escolha conveniente dos parâmetros de anisotropia de intercâmbio na superfície e no volume, possamos determinar diferentes configurações para os ordenamentos da superfície e do volume. Algumas situações são discutidas em detalhe, como por exemplo, quando a superfície e o volume são descritos por modelos de Heisenberg, devido às consequências teóricas relativas à aplicação do teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾ a sistemas semi-infinitos.

Em nossa análise utilizamos o método das Funções de Green⁽²⁶⁾, com o desacoplamento RPA ("Random Phase Approximation")

Além disso, consideramos que a magnetização é uniforme dentro de cada plano e que o terceiro plano a partir da superfície se comporta como se pertencesse ao volume^(12,14). Como parâmetros variáveis em nosso modelo, tomamos os graus de anisotropia da superfície e do volume e as relações entre os acoplamentos de intercâmbio da superfície e do volume.

No capítulo 2 deste trabalho estudamos o comportamento da magnetização em função da temperatura para um modelo de Heisenberg anisotrópico em função do parâmetro de anisotropia, para uma rede cúbica simples sem superfícies delimitadoras. Além disso, obtivemos os correspondentes espectros de energia. Isso se faz necessário, pois para se estudar as excitações na superfície devemos conhecer o valor da magnetização para cada temperatura considerada. Isso é

devido à nossa aproximação de que o terceiro plano já está integrado ao volume do sistema.

No capítulo 3, desenvolvemos detalhadamente todo o formalismo das Funções de Green aplicado ao estudo das excitações de ondas de spin no sistema semi-infinito. Em particular derivamos expressões para as magnetizações dos dois primeiros planos em função da temperatura, e calculamos o espectro de energia dos magnons localizados próximo à superfície cristalina. O formalismo deve ser aplicado com muito cuidado, separando-se convenientemente as regiões abaixo e acima da temperatura crítica de volume. As expressões obtidas formam um conjunto de equações integrais, não lineares e acopladas que deve ser resolvido autoconsistentemente para cada valor de temperatura e dos parâmetros da Hamiltoniana.

No capítulo 4, apresentamos os primeiros resultados obtidos a partir da análise das equações derivadas no capítulo 3. Mostramos que através de uma escolha conveniente dos parâmetros é possível obter uma magnetização de superfície acima de um volume paramagnético. Discutimos as singularidades obtidas para a magnetização de superfície na temperatura crítica de volume, no contexto de teorias efetivas de Campo Médio e do Grupo de Renormalização⁽¹¹⁾. Também obtivemos um diagrama para os acoplamentos críticos de superfície em função dos graus de anisotropia do volume e da superfície. Surpreendentemente, nossos resultados, baseados no método das Funções de Green, são comparáveis àqueles obtidos através de Grupo de Renormalização. Mostramos ainda que através da análise dos espectros de energia para os modos localizados, podemos também inferir sobre o ordenamento magnético de superfície. No capítulo 5, apresentamos

as principais conclusões deste trabalho e as perspectivas de desenvolvimento de futuros trabalhos empregando o formalismo das Funções de Green. Finalmente, apresentamos no apêndice uma discussão sobre a aplicação do teorema de Mermin e Wagner para sistemas semi-infinitos.

CAPÍTULO 2

FUNÇÃO DE GREEN PARA UM SISTEMA FERROMAGNÉTICO DE HEISENBERG
ANISOTRÓPICO

Neste capítulo apresentamos o cálculo da magnetização de um cristal ferromagnético infinito para o caso de spin=1/2 através do método da Função de Green.

Inicialmente é estabelecida uma relação entre a magnetização e a descontinuidade da Função de Green. Em seguida, a partir da Hamiltoniana adotada e da equação de movimento da Função de Green obtemos a Função de Green de interesse utilizando a aproximação das fases aleatórias, RPA ("Random Phase Approximation"). Fazemos uma comparação entre os valores das temperaturas críticas obtidas com os apresentados na literatura. Determinamos as curvas de magnetização, a temperatura crítica e a relação de dispersão das ondas de spin para diferentes graus de anisotropia cristalina.

A magnetização, definida como sendo a média térmica do operador de spin S^z (29), isto é,

$$\langle S^z \rangle = \text{Tr} \left\{ \frac{e^{-\beta \mathcal{H}} S^z}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} \right\} \quad , \quad (2-1)$$

onde $\beta = (K_B T)^{-1}$, K_B sendo a constante de Boltzmann, T a temperatura absoluta e \mathcal{H} a Hamiltoniana de spins do sistema, pode ser calculada através do uso das Funções de Green se considerarmos que o operador

S_i^z pode ser expresso em função dos operadores S_i^+ e S_i^- , definidos como

$$S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y \quad (2-2)$$

Lembrando que :

$$(S_i)^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = \frac{1}{2} (S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+) + (S_i^z)^2, \quad (2-3)$$

e que

$$[S_i^+, S_j^-] = 2 S_i^z \delta_{ij}, \quad S_i^+ S_i^- = 2 S_i^z + S_i^- S_i^+, \quad (2-4)$$

podemos escrever que

$$S_i^z = (S_i)^2 - (S_i^z)^2 - S_i^- S_i^+ \quad (2-5)$$

e,

$$\langle S_i^z \rangle = \langle (S_i)^2 \rangle - \langle (S_i^z)^2 \rangle - \langle S_i^- S_i^+ \rangle = s(s+1) - \langle (S_i^z)^2 \rangle - \langle S_i^- S_i^+ \rangle, \quad (2-6)$$

Em particular, para $s = 1/2$, obtemos

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_i^- S_i^+ \rangle \quad (2-7)$$

Para que possamos usar a técnica da Função de Green devemos considerar os operadores S_i^+ e S_i^- na representação de Heisenberg

$$S_i^+(t) = e^{i\mathcal{H}t} S_i^+(0) e^{-i\mathcal{H}t} \quad , \quad (2-8)$$

$$S_i^-(t') = e^{i\mathcal{H}t'} S_i^-(0) e^{-i\mathcal{H}t'}$$

As Funções de Green retardada (G_r) e avançada (G_a) , dependentes do tempo e da temperatura , são definidas para os operadores S_i^+ e S_i^- na seguinte forma⁽²⁹⁾:

$$G_r^{\bar{i}\bar{j}}(t,t') = -i\theta(t-t') \langle [S_i^+(t), S_j^-(t')] \rangle = -i\theta(t-t') \times \\ \times \{ \langle S_i^+(t) S_j^-(t') \rangle - \langle S_j^-(t') S_i^+(t) \rangle \} = \langle\langle S_i^+(t); S_j^-(t') \rangle\rangle_r \quad , \quad (2-9)$$

$$G_a^{\bar{i}\bar{j}}(t,t') = i\theta(t'-t) \langle [S_i^+(t), S_j^-(t')] \rangle = i\theta(t'-t) \times \\ \times \{ \langle S_i^+(t) S_j^-(t') \rangle - \langle S_j^-(t') S_i^+(t) \rangle \} = \langle\langle S_i^+(t); S_j^-(t') \rangle\rangle_a \quad , \quad (2-10)$$

onde $\theta(t)$ é a função de Heaviside e as funções $F^+(t,t') = \langle S_i^+(t) S_j^-(t') \rangle$ e $F^-(t,t') = \langle S_j^-(t') S_i^+(t) \rangle$ são as funções de correlação ou as médias térmicas do produto dos operadores $S_i^+(t)$ e $S_j^-(t')$. Ou seja,

$$\langle S_i^+(t) S_j^-(t') \rangle = Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} S_i^+(0) e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} S_j^-(0) e^{-i\mathcal{H}t'} \right\} \quad , \quad (2-11)$$

onde $Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta\mathcal{H}} \right]$ é a função de partição.

Lembrando que o traço do produto de operadores é invariante sob permutação cíclica desses operadores, vemos que:

$$F^{+-}(t, t') = F^{+-}(t - t') \quad , \quad (2-12)$$

$$F^{-+}(t, t') = F^{-+}(t - t') \quad ,$$

e que, conseqüentemente

$$G_r(t, t') = G_r(t - t') \quad , \quad (2-13)$$

$$G_a(t, t') = G_a(t - t') \quad .$$

Este fato nos permite introduzir a transformada de Fourier temporal para as Funções de Green e para as funções de correlação:

$$G(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t - t') e^{i\epsilon(t - t')} d(t - t') \quad , \quad (2-14)$$

$$G(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\epsilon) e^{-i\epsilon(t - t')} d\epsilon \quad ,$$

onde $G(t - t')$ pode representar as Funções de Green avançada e retardada. Temos ainda que:

$$F^{-+}(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t - t')} d\omega \quad , \quad (2-15)$$

$$F^{+-}(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t - t')} d\omega \quad .$$

Nas equações acima, $J(\omega)$ é a chamada função densidade espectral e pode ser expressa como:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F^{+-}(t-t') e^{i\omega(t-t')} d(t-t') \quad (2-16)$$

Considerando as definições de F^{+-} , F^{-+} e de $G(t-t')$, e fazendo $t'=0$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} -i\Theta(t) \{F^{+-} - F^{-+}\} e^{iEt} dt = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) \int_0^{\infty} \frac{e^{i(E-\omega+i\varepsilon)t} d[i(E-\omega+i\varepsilon)t]}{i(E-\omega+i\varepsilon)} \end{aligned} \quad (2-17)$$

onde o fator $e^{-\varepsilon t}$ ($\varepsilon \rightarrow 0^+$) é introduzido para garantir a convergência da integral quando $t \rightarrow \infty$. portanto temos:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{(E - \omega + i\varepsilon)} d\omega \quad (2-18)$$

Para a Função de Green avançada teremos:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} i\Theta(-t) \{F^{+-} - F^{-+}\} e^{iEt} dt \quad (2-19)$$

e, por um procedimento análogo ao caso anterior chegamos a:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{(E - \omega - i\varepsilon)} d\omega \quad (2-20)$$

A descontinuidade da Função de Green pode ser relacionada com a função densidade espectral $J(\omega)$ por meio da seguinte representação para a função $\delta(x)$:

$$2\pi i \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) \quad (2-21)$$

Teremos

$$\begin{aligned} & \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon)] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} - \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} \right\} d\omega = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) 2\pi i \delta(E - \omega) d\omega \end{aligned} \quad (2-22)$$

ou seja ,

$$J(E) = \frac{i}{e^{\beta E} - 1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) \right\} \quad (2-23)$$

A partir das equações (2.7) , (2.15) e (2.23) tomadas para $t=t'$, podemos determinar a magnetização de equilíbrio por spin para o sistema:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{e^{\beta E} - 1} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G(E+i\epsilon) - G(E-i\epsilon) \right\} dE . \quad (2-24)$$

A determinação da magnetização depende agora unicamente do cálculo das Funções de Green $G(E)$, o que será feito através de suas respectivas equações de movimento. Temos portanto:

$$i \frac{d}{dt} G_r^{\vec{l}\vec{m}}(t, t') = i \frac{d}{dt} \left\{ -i \theta(t-t') \langle [S_l^+(t), S_m^-(t')] \rangle \right\} \\ e \quad (2-25) \\ i \frac{d}{dt} G_a^{\vec{l}\vec{m}}(t, t') = i \frac{d}{dt} \left\{ i \theta(t'-t) \langle [S_l^+(t), S_m^-(t')] \rangle \right\} ,$$

onde consideramos que os operadores $S_l^+(t)$ e $S_m^-(t')$ podem estar associados a diferentes pontos da rede.

Lembrando que $\theta(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t-t') dt$, e que $i \frac{dS_l^+}{dt} = [S_l^+(t), \mathcal{H}]$ é fácil verificar que

$$i \frac{d}{dt} G_r(t, t') = i \frac{d}{dt} G_a(t, t') = i \frac{d}{dt} G(t, t') \quad (2-26)$$

Obtemos assim a seguinte equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} G^{\vec{l}\vec{m}}(t, t') = \delta(t-t') \langle [S_l^+(t), S_m^-(t')] \rangle + \langle \langle [S_l^+(t), \mathcal{H}], S_m^-(t') \rangle \rangle . \quad (2-27)$$

Após efetuarmos a transformada de Fourier temporal obtemos:

$$E \ll S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \gg_{\epsilon} = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{l}}^+(t'), S_{\vec{m}}^-(t')] \rangle + \ll [S_{\vec{l}}^+, \mathcal{H}] ; S_{\vec{m}}^- \gg_{\epsilon} . \quad (2-28)$$

Neste trabalho consideraremos a seguinte Hamiltoniana, numa rede cúbica simples, para valores de spin $s=1/2$:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{(\vec{i}, \vec{j})} [J_{\vec{i}, \vec{j}} \epsilon (S_{\vec{i}}^x S_{\vec{j}}^x + S_{\vec{i}}^y S_{\vec{j}}^y) + (1-\epsilon) J_{\vec{i}, \vec{j}} S_{\vec{i}}^z S_{\vec{j}}^z] - h \sum_{\vec{i}} S_{\vec{i}}^z , \quad (2-29)$$

onde a soma é considerada para todos os pares de spins vizinhos mais próximos localizados nos pontos \vec{i} e \vec{j} da rede, $J_{\vec{i}, \vec{j}}$ é o parâmetro de troca, h é a energia associada ao campo magnético externo e ϵ é um parâmetro que permite controlar a anisotropia de nosso modelo. Em particular, se $\epsilon=0.5$ obtemos o modelo de Heisenberg, e se $\epsilon \rightarrow 0$, obtemos o modelo de Ising.

Deve-se ressaltar que o valor $\epsilon=0$, que em nosso caso representaria um modelo de Ising puro, deverá ser evitado uma vez que o cálculo da magnetização, via Função de Green, se baseia na determinação das funções de correlação $\langle S^+(t), S^-(t') \rangle$ e $\langle S^-(t), S^+(t') \rangle$, e que $\epsilon=0$ elimina de nossa Hamiltoniana justamente os operadores S^+ e S^- ; por essa razão, em nossos cálculos subsequentes, tomaremos o valor de $\epsilon=0.01$ como sendo o limite para o modelo de Ising.

Exprimindo a Hamiltoniana em termos dos operadores S^+ e S^- teremos:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{(\vec{i}, \vec{j})} [J_{\vec{i}, \vec{j}} \frac{\epsilon}{2} (S_{\vec{i}}^+ S_{\vec{j}}^- + S_{\vec{i}}^- S_{\vec{j}}^+) + J_{\vec{i}, \vec{j}} (1-\epsilon) S_{\vec{i}}^z S_{\vec{j}}^z] - h \sum_{\vec{i}} S_{\vec{i}}^z . \quad (2-30)$$

Introduzindo esta Hamiltoniana na equação (2.28) e efetuando-se um desacoplamento através da aproximação RPA ("Random Phase Approximation") obtemos:

$$\begin{aligned} & \left[E - \sum_{\vec{l}} J_{\vec{l}\vec{l}} (1-\varepsilon) \langle S_{\vec{l}}^z \rangle - h \right] \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E = \\ & = \frac{1}{\pi} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle \delta_{\vec{l}\vec{m}} - \sum_{\vec{l}} J_{\vec{l}\vec{l}} \varepsilon \langle S_{\vec{l}}^z \rangle \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E \end{aligned} \quad (2-31)$$

A existência de simetria translacional no cristal infinito permite introduzir a transformada de Fourier para a Função de Green ($G_{\vec{k}}(E)$) na forma:

$$G_{\vec{l}\vec{m}}(E) = \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{\vec{K}} G_{\vec{K}}(E) e^{i\vec{K}\cdot(\vec{l}-\vec{m})}, \quad (2-32)$$

onde N é o número de células unitárias do cristal e os vetores \vec{K} são os vetores de onda da 1ª zona de Brillouin. Devido à simetria translacional, $\langle S_{\vec{l}}^z \rangle = \langle S^z \rangle$, independentemente do ponto da rede.

Considerando que a função $\delta_{\vec{l}\vec{m}}$ pode ser expressa na forma:

$$\delta_{\vec{l}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot(\vec{l}-\vec{m})}, \quad (2-33)$$

poderemos escrever a Função de Green $G_{\vec{k}}(E)$ como:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{\langle S^z \rangle}{\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}, \quad (2-34)$$

onde

$$E_{\vec{k}} = z J \langle S^z \rangle \left[1 - \varepsilon - \varepsilon \gamma_{\vec{k}} \right] + h \quad , \quad (2-35)$$

e $\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{l}-\vec{l}') \cdot \vec{k}}$ é o fator de estrutura da rede, sendo z o número de vizinhos mais próximos de um dado spin. A equação (2.35) dá os polos da Função de Green, que são identificados com as energias de excitação das ondas de spin do sistema (12,26).

Introduzindo-se a expressão de $G_{\vec{k}}(\varepsilon)$ na equação (2.32), e fazendo-se $\vec{m}=\vec{l}$ teremos a Função de Green que necessitamos:

$$\langle\langle S^+, S^- \rangle\rangle_{\varepsilon} = G(\varepsilon) = \frac{1}{N\pi} \sum_{\vec{k}} \frac{\langle S^z \rangle}{E - E_{\vec{k}}} \quad , \quad (2-36)$$

e que permite, portanto, a obtenção de uma expressão para a magnetização $\langle S^z \rangle$ por meio da equação (2.24):

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{e^{\beta E} - 1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{1}{N\pi} \sum_{\vec{k}} \langle S^z \rangle \frac{1}{E - E_{\vec{k}} + i\varepsilon} - \frac{1}{E - E_{\vec{k}} - i\varepsilon} \right\} \quad , \quad (2-37)$$

ou seja ,

$$\langle S^z \rangle = \frac{1/2}{1 + 2\phi} \quad , \quad (2-38)$$

onde definimos que

$$\phi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(e^{\beta E_{\vec{k}}} - 1 \right)^{-1} \quad . \quad (2-39)$$

Colocando-se $h=0$, na equação (2.35), podemos determinar a magnetização espontânea como função da temperatura.

A determinação de $\langle S^z \rangle$ em função da temperatura pode ser realizada através do cálculo autoconsistente das equações (2.38) e (2.35). A soma sobre os vetores de onda \vec{k} foi efetuada usando-se o MÉTODO DOS PONTOS ESPECIAIS^(14,27).

A expressão da temperatura crítica de volume em função do parâmetro ϵ é obtida impondo-se a condição de que para $h=0$, $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_c$.

Podemos escrever que:

$$1 + 2\phi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \coth \left(\frac{\beta E_{\vec{k}}}{2} \right) \quad (2-40)$$

Lembrando que, quando $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$, $E_{\vec{k}} \rightarrow 0$, podemos expandir $\coth \left[\frac{\beta E_{\vec{k}}}{2} \right]$ e tomar o primeiro termo da expansão:

$$\begin{aligned} 1 + 2\phi &\approx \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{2}{\beta E_{\vec{k}}} \right) = \\ &= \frac{2 K_B T_c}{z J \langle S^z \rangle} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (1 - \epsilon - \epsilon \gamma_{\vec{k}})^{-1} \quad (2-41) \end{aligned}$$

Portanto, obtemos para $s = 1/2$:

$$T_c = \frac{1}{4} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (1 - \epsilon - \epsilon \gamma_{\vec{k}})^{-1}} \quad (2-42)$$

onde $\tau_c = \frac{K_B T_c}{zJ}$ e a temperatura crítica reduzida.

Para o uso do método dos pontos especiais devemos fazer a aproximação:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) \approx \sum_{i=1}^n \alpha_i f(\vec{k}_i) \quad (2-43)$$

onde os \vec{k}_i são os pontos especiais determinados através das propriedades de simetria da rede, pertencentes à primeira zona de Brillouin e α_i são os pesos associados aos pontos \vec{k}_i .

Para uma rede cúbica simples os pontos \vec{k}_i podem ser escritos na forma $\vec{k}_i = \frac{\pi}{32a} (x,y,z)$ onde x,y,z são os 16 primeiros números ímpares positivos, compondo assim um conjunto de 816 vetores irredutíveis dentro da primeira zona de Brillouin.

Temos 16 vetores do tipo (a,a,a) com peso $\alpha_i = \frac{1}{4096} \cdot 240$ do tipo (a,a,b) com peso $\alpha_i = \frac{3}{4096}$ e 560 do tipo (a,b,c) com peso $\alpha_i = \frac{6}{4096}$

No quadro abaixo apresentamos os valores obtidos através do método das Funções de Green e por outros métodos para a temperatura crítica ($K_B T_c / zJ$) do modelo de Heisenberg ($\mathcal{H} = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$) e do modelo de Ising ($\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$) numa rede cúbica simples.

	Aproximação de Campo Medio	Expansão em Series de Altas Temperaturas (A)	Grupo de Renormalização-Migdal Kadanoff (B)	Função de Green (C)
Heisenberg	0.5	0.28	0.26	0.33
Ising	1.0	0.75	0.75	0.99 $\varepsilon=0.01$

- (A) : M.F. Sykes , D.S.Gaunt and M.Glen. J.Phys. A 9 , 97 (1976)
 (B) : F.Lie, H.H.Chen and H.C.Tseng , Phys.Rev. B 38 , 508 (1988)
 (C) : Resultados obtidos neste trabalho

Na figura 1 apresentamos o gráfico da magnetização espontânea em função da temperatura para diversos valores do parâmetro de anisotropia ε . A temperatura crítica decresce monotonicamente desde $\varepsilon \rightarrow 0$ (modelo de Ising) até $\varepsilon = 0.5$ (modelo de Heisenberg). Observe que os valores de T_c são quatro vezes menores que aqueles apresentados na tabela 1, devido a forma como escrevemos a nossa Hamiltoniana de partida. Na figura 2, exibimos o comportamento da magnetização espontânea, como uma função da temperatura para diferentes valores do parâmetro de anisotropia ε . A curva A foi determinada também utilizando o método das Funções de Green, porém evitamos tomar explicitamente $\varepsilon = 0$ em nossos cálculos, pois as equações de movimento para as Funções de Green não estariam definidas. Devido a isso tomamos explicitamente o valor $\varepsilon = 0.01$ como sendo o limite para o modelo de Ising.

Nas figuras 3.4 e 5 representamos a relação de dispersão das ondas de spin para o modelo de Heisenberg ($\varepsilon = 0.5$). Esse gráfico é uma representação da equação (2.35) para $h=0$. Note que a abcissa é escrita em função de $\Lambda(\vec{k}_y) = 1 - \frac{1}{2}(\cos a\kappa_x + \cos a\kappa_z)$, por isso os dois limites correspondem aos valores de $\kappa_y = 0$ e $\kappa_y = \pm \frac{\pi}{a}$. Esse

tipo de representação é conveniente para se comparar posteriormente as excitações de ondas de spin no volume com aquelas dos modos de superfície. Podemos verificar que à medida que nos aproximamos da temperatura crítica, as energias de excitação vão progressivamente diminuindo. Isto é de certa forma esperado, pois as energias de excitação são proporcionais à magnetização dentro da aproximação de fases aleatórias que estamos considerando. Finalmente na figura 6 é exibido o comportamento da relação de dispersão para o modelo de Heisenberg anisotrópico ($\epsilon = 0.3$) para três valores diferentes da temperatura. O comportamento observado é semelhante ao caso do modelo de Heisenberg. Nos próximos capítulos esses resultados serão utilizados para descrever o comportamento da magnetização de superfície bem como as respectivas relações de dispersão dos modos de superfície.

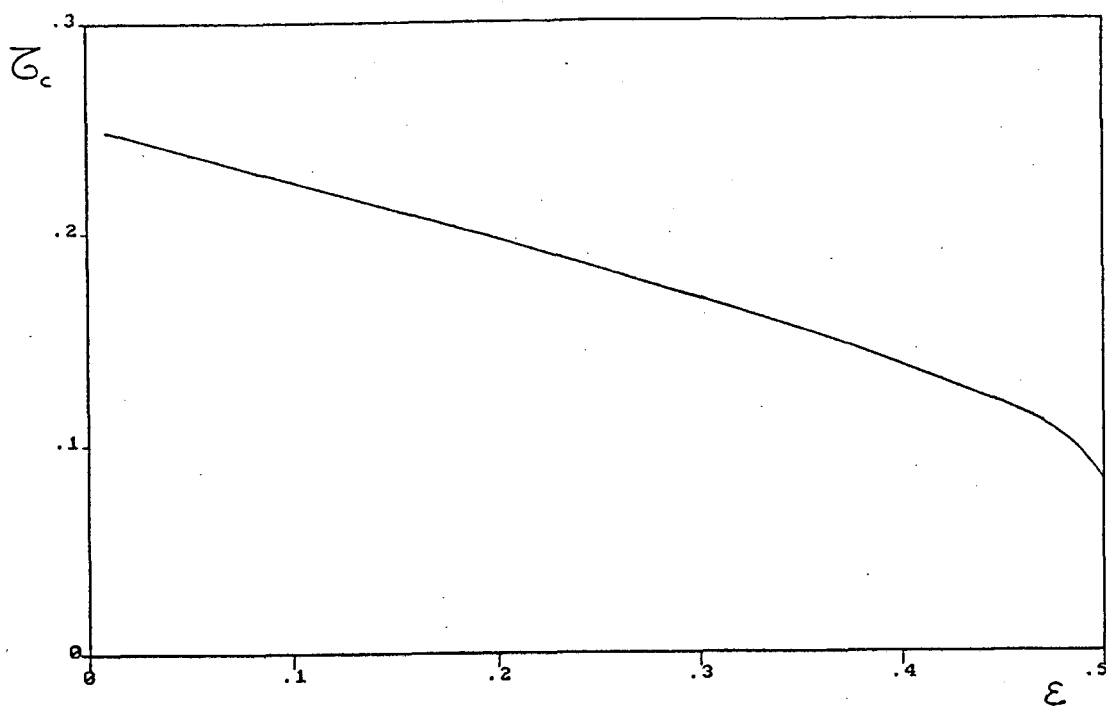


FIGURA 1 - Temperatura crítica reduzida (τ_c) em função do parâmetro de anisotropia (ϵ). $\tau_c = \frac{K_B T}{z J}$

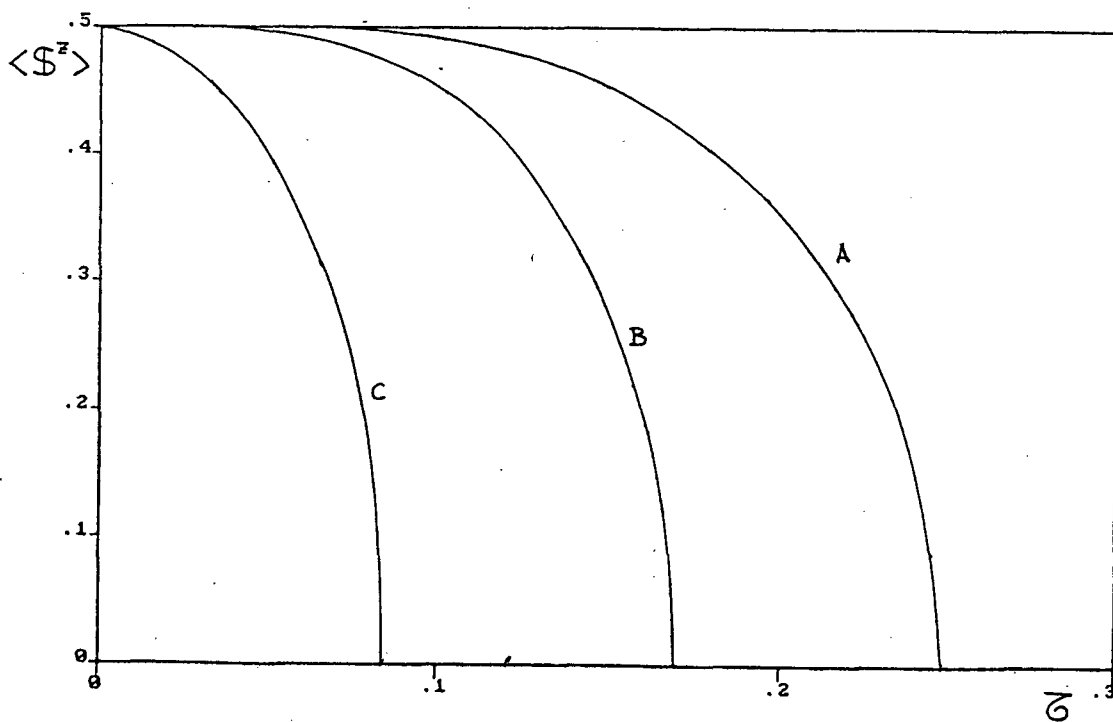


FIGURA 2 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para diferentes valores do parâmetro de anisotropia (ϵ), $\tau = \frac{K_B T}{z J}$.

CURVAS: A - $\epsilon = 0.01$ (Ising); B - $\epsilon = 0.30$; C - $\epsilon = 0.50$ (Heisenberg)

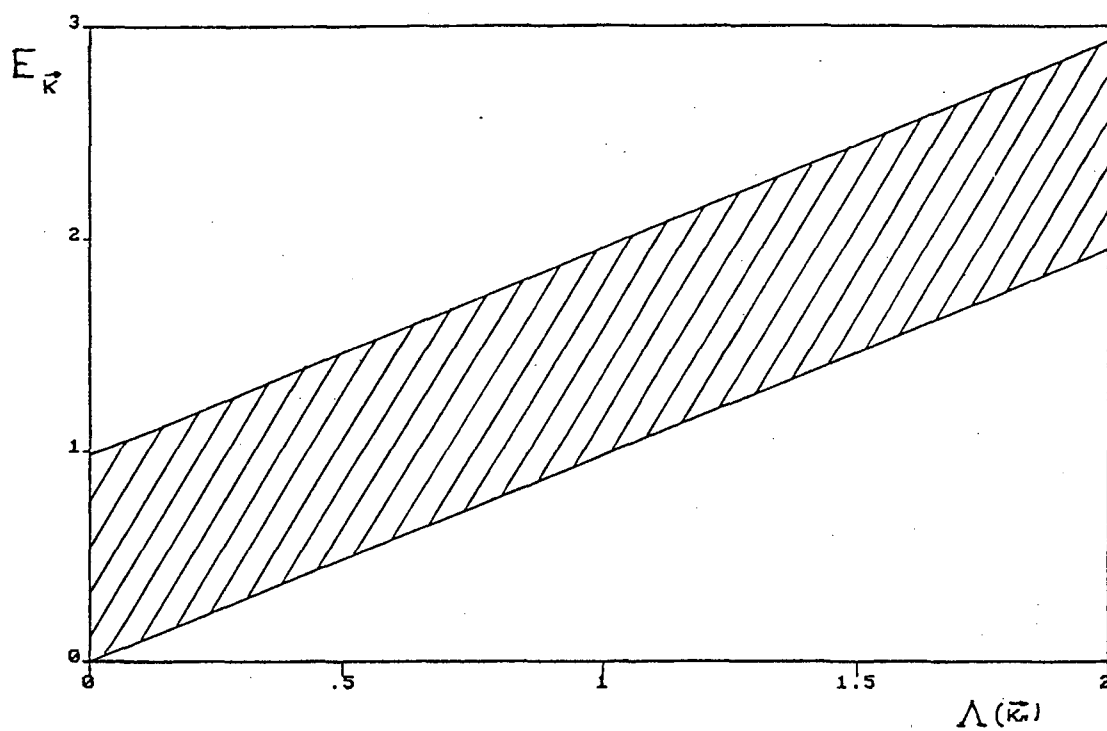


FIGURA 3 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_1) = [1 - \frac{1}{2}(\cos \alpha K_x + \cos \alpha K_z)]$. Na figura, $\epsilon=0.50$ (Heisenberg) , $\frac{T}{T_c} = 0.179$.

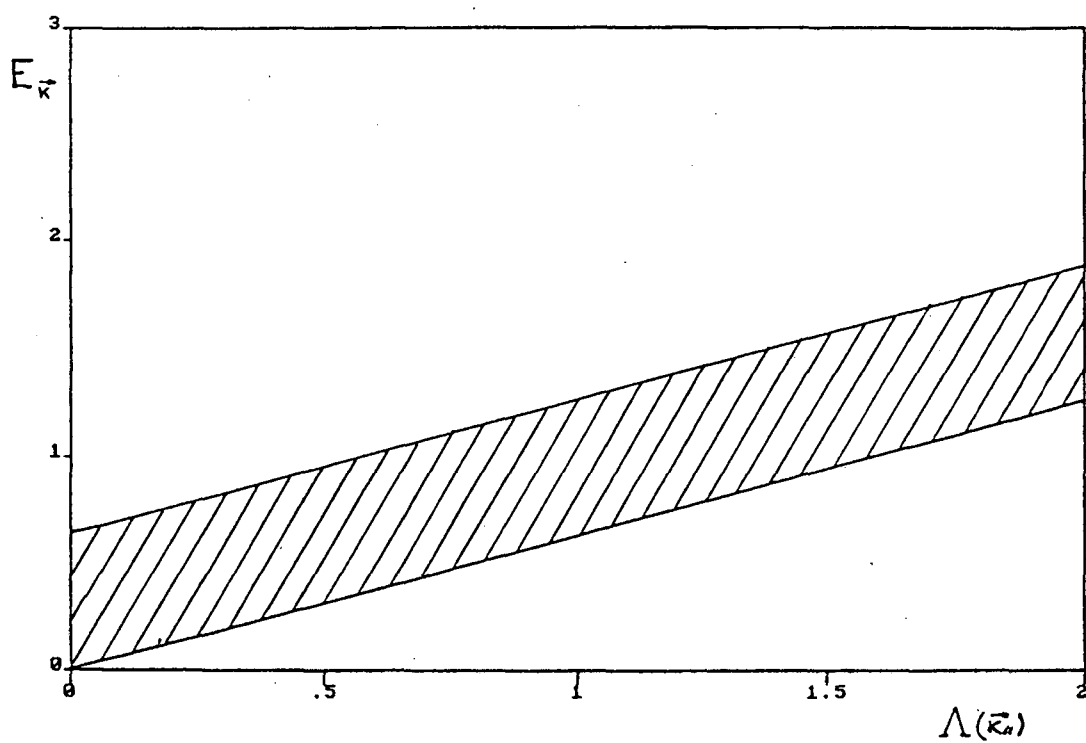


FIGURA 4 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_1) = [1 - \frac{1}{2}(\cos \alpha K_x + \cos \alpha K_z)]$. Na figura, $\epsilon=0.50$ (Heisenberg) , $\frac{T}{T_c} = 0.774$.

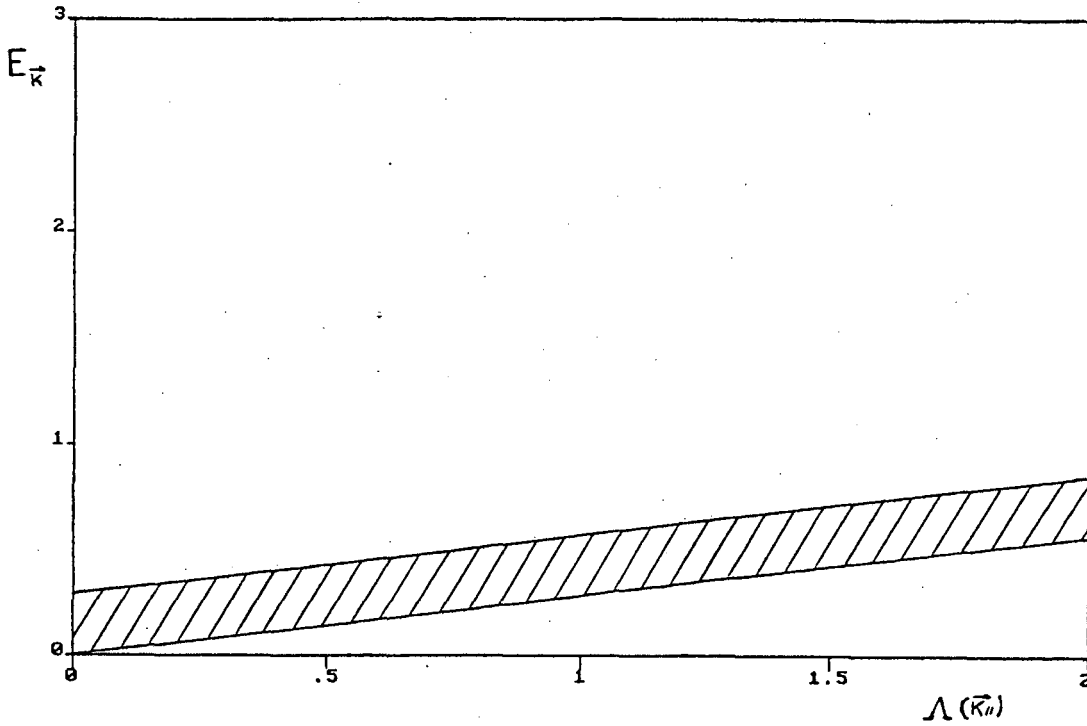


FIGURA 5 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_n) = [1 - \frac{1}{2}(\cos \alpha K_x + \cos \alpha K_z)]$. Na figura, $\epsilon=0.50$ (Heisenberg) , $\frac{T}{T_c} = 0.976$.

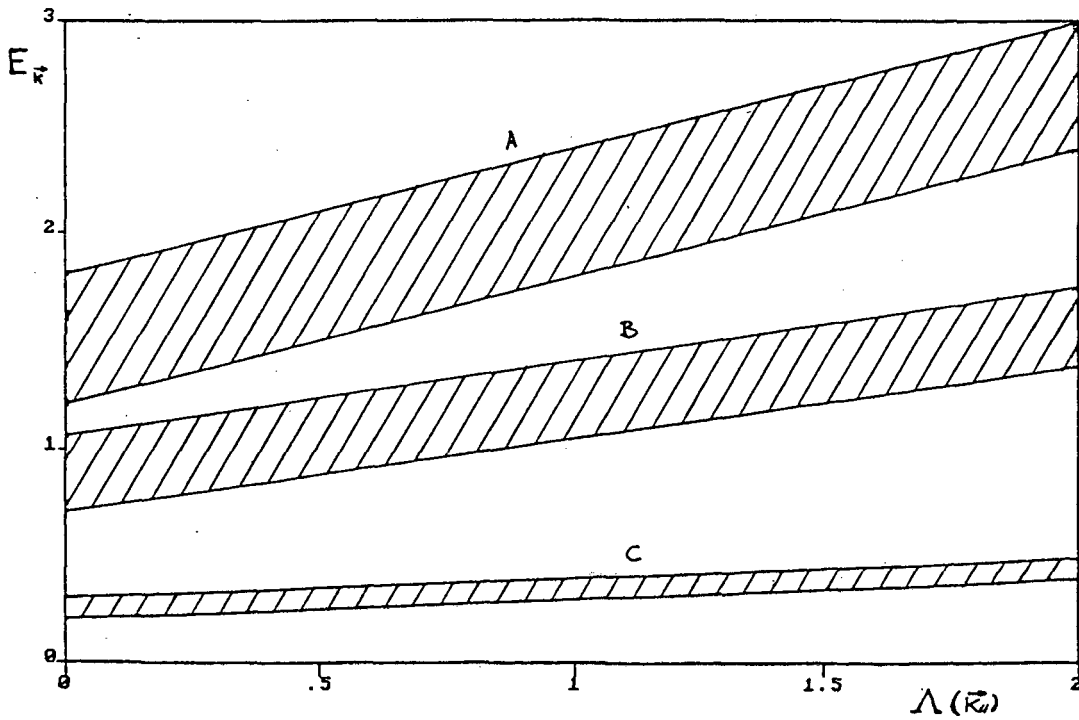


FIGURA 6 - Relação de dispersão para as ondas de spin em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_n) = [1 - \frac{1}{2}(\cos \alpha K_x + \cos \alpha K_z)]$. Na figura, $\epsilon=0.30$ (Heisenberg anisotrópico) , $r_c = \frac{K_B T}{2J} = 0.169$.
 Região A $\left[\frac{T}{T_c} = 0.213 \right]$, Região B $\left[\frac{T}{T_c} = 0.870 \right]$ e
 Região C $\left[\frac{T}{T_c} = 0.994 \right]$

CAPÍTULO 3

FUNÇÃO DE GREEN PARA UM SISTEMA FERROMAGNÉTICO DE HEISENBERG
SEMI-INFINITO

Neste capítulo são apresentados os cálculos que permitem a determinação da magnetização do primeiro plano (superfície) e do segundo plano de um cristal ferromagnético semi-infinito, tendo sido considerado que a partir do terceiro plano do cristal a magnetização é a mesma que a do cristal infinito calculada anteriormente. Os cálculos foram feitos para o caso de spin = 1/2 através do método da Função de Green com desacoplamento RPA .

Em função de que para determinados valores dos parâmetros empregados se obtém magnetização diferente de zero para o primeiro e para o segundo plano, mesmo para temperaturas acima da temperatura crítica de volume ($\tau > \tau_c^v$), os cálculos feitos foram específicos para cada região de temperaturas: para $\tau < \tau_c^v$ quando se considera que a partir do terceiro plano a magnetização é igual à de um volume infinito e para $\tau > \tau_c^v$ quando se considera, já no início dos cálculos, que a magnetização do volume é nula. Foram também obtidas as relações de dispersão das ondas de spin para cada uma das regiões de temperatura.

Nosso sistema semi-infinito será representado por um conjunto de planos, o primeiro dos quais, a superfície, será localizado pelo parâmetro $l=0$ (fig. 7.1) . O segundo plano corresponderá a $l=1$ e, a partir do terceiro plano ($l=2$) inclusive, consideraremos as interações entre os spins do cristal como sendo idênticas às de

um volume infinito.

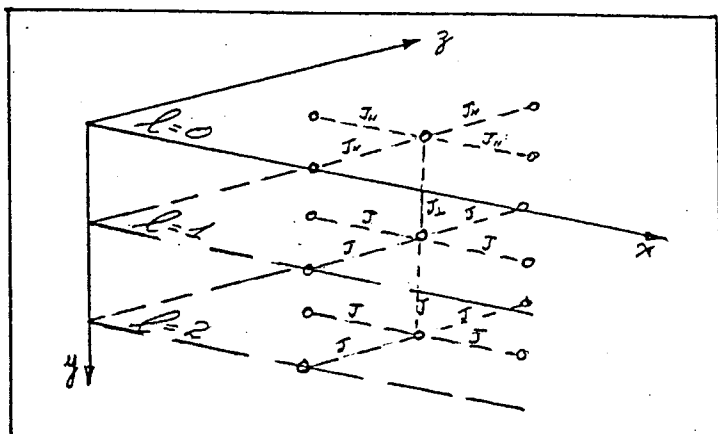


FIGURA 7

- Esquema das interações de intercâmbio: $J_{||}$ na superfície (plano xz), J_{\perp} entre a superfície e o segundo plano e J no restante da rede.

A Hamiltoniana que utilizaremos agora é a mesma que usamos para o cristal infinito:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} [J' \epsilon' (\mathcal{S}_i^x \mathcal{S}_j^x + \mathcal{S}_i^y \mathcal{S}_j^y) + J' (1 - \epsilon') (\mathcal{S}_i^z \mathcal{S}_j^z)] - h \sum_i \mathcal{S}_i^z \quad (3-1)$$

sendo que agora o parâmetro de troca J' e o parâmetro ϵ' , que dá o grau de anisotropia no modelo, terão respectivamente as seguintes formas: no primeiro plano ($l = 0$) tomaremos $J_{||}$ e $\epsilon_{||}$; entre a superfície ($l = 0$) e o segundo plano ($l = 1$), usaremos J_{\perp} e ϵ_{\perp} ; a partir do terceiro plano ($l = 2$), usaremos J e ϵ .

Analogamente ao procedimento adotado no caso do cristal infinito, substituindo a Hamiltoniana, expressa em termos dos operadores \mathcal{S}_l^+ e \mathcal{S}_m^- , na equação de movimento da transformada de Fourier da Função de Green, e efetuando o desacoplamento R.P.A. obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
& [E - (1 - \epsilon') \sum_{\vec{l}} J'_{\vec{l}\vec{l}'} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle - h] \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E = \\
& = \frac{1}{\pi} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle \delta_{\vec{l}\vec{m}} - \epsilon' \sum_{\vec{l}} J'_{\vec{l}\vec{l}'} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E
\end{aligned} \tag{3-2}$$

Levando-se em conta a simetria translacional dentro de cada plano do cristal, introduziremos a transformada de Fourier da Função de Green na seguinte forma^(12,14):

$$G_{\vec{l}\vec{m}}(\epsilon) = \langle\langle S_{\vec{l}}^+ ; S_{\vec{m}}^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_\parallel} \tilde{G}_{\vec{l}\vec{m}}(\vec{k}_\parallel, \epsilon) e^{i\vec{k}_\parallel \cdot (\vec{l}_\parallel - \vec{m}_\parallel)} \tag{3-3}$$

onde N_s é o número de pontos da rede na superfície; \vec{l}_\parallel e \vec{m}_\parallel são as componentes dos vetores \vec{l} e \vec{m} paralelas aos planos do cristal, enquanto l e m são as componentes perpendiculares aos planos e, conseqüentemente, localizam os planos do cristal. Os vetores \vec{k}_\parallel são os vetores de onda associados à primeira zona de Brillouin da rede quadrada.

Usando ainda a representação para a função $\delta_{\vec{l}\vec{m}}$ dada por:

$$\delta_{\vec{l}\vec{m}} = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_\parallel} e^{i\vec{k}_\parallel \cdot (\vec{l}_\parallel - \vec{m}_\parallel)} \delta_{lm} \tag{3-4}$$

e considerando ainda que a magnetização seja homogênea ao longo de cada plano:

$$\langle S_{\vec{l}}^z \rangle = \langle S_l^z \rangle \tag{3-5}$$

poderemos reescrever a equação (3.2) para cada \vec{k}_\parallel como:

$$\begin{aligned}
& \left[E - (1 - \varepsilon') \sum_{\vec{l}} J'_{\vec{l}\vec{i}} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle - h \right] \tilde{G}_{\vec{l}m}(\vec{K}_{\parallel}, E) + \\
& + \sum_{\vec{l}} \varepsilon' J'_{\vec{l}\vec{i}} \langle S_{\vec{l}}^z \rangle \tilde{G}_{\vec{l}m}(\vec{K}_{\parallel}, E) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot (\vec{i} - \vec{l})} = \frac{\langle S_{\vec{l}}^z \rangle}{\pi} \delta_{\vec{l}m} .
\end{aligned} \tag{3-6}$$

O cristal semi-infinito será representado por um conjunto de equações obtido através da aplicação da equação (3.6) a cada plano do cristal, a partir da superfície ($l=0$). Teremos portanto:

$$\begin{aligned}
l=0 & \left\{ E + [\varepsilon_{\parallel} J_{\parallel} z \delta_{\vec{K}_{\parallel}} - z(1 - \varepsilon_{\parallel}) J_{\parallel}] \langle S_0^z \rangle - (1 - \varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_1^z \rangle - h \right\} \tilde{G}_{0m}^+ \\
& + \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_0^z \rangle \tilde{G}_{1m} = \frac{\langle S_0^z \rangle}{\pi} \delta_{0m} ,
\end{aligned} \tag{3-7}$$

$$\begin{aligned}
l=1 & \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_1^z \rangle \tilde{G}_{0m} + \left\{ E - (1 - \varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_0^z \rangle + [\varepsilon J z \delta_{\vec{K}_{\parallel}} - z(1 - \varepsilon) J] \times \right. \\
& \times \langle S_1^z \rangle - (1 - \varepsilon) J \langle S_2^z \rangle - h \left. \right\} \tilde{G}_{1m} + \varepsilon J \langle S_1^z \rangle \tilde{G}_{2m} = \frac{\langle S_1^z \rangle}{\pi} \delta_{1m} ,
\end{aligned} \tag{3-8}$$

$$\begin{aligned}
l=2 & \varepsilon J \langle S_2^z \rangle \tilde{G}_{1m} + \left\{ E - (1 - \varepsilon) J \langle S_1^z \rangle + [\varepsilon J z \delta_{\vec{K}_{\parallel}} - (z+1)(1 - \varepsilon)] \times \right. \\
& \times \langle S_2^z \rangle - h \left. \right\} \tilde{G}_{2m} + \varepsilon J \langle S_2^z \rangle \tilde{G}_{3m} = \frac{\langle S_2^z \rangle}{\pi} \delta_{2m} ,
\end{aligned} \tag{3-9}$$

$$\begin{aligned}
l \geq 3 & \varepsilon J \langle S_2^z \rangle \tilde{G}_{(l-1)m} + \left\{ E + [\varepsilon J z \delta_{\vec{K}_{\parallel}} - (z+2)(1 - \varepsilon) J] \langle S_2^z \rangle - \right. \\
& \left. - h \right\} \tilde{G}_{lm} + \varepsilon J \langle S_2^z \rangle \tilde{G}_{(l+1)m} = \frac{\langle S_2^z \rangle}{\pi} \delta_{lm} ,
\end{aligned} \tag{3-10}$$

onde consideramos que a partir do terceiro plano ($l=2$) a magnetização será a mesma para todos os pontos da rede sendo seu valor, $\langle S_2^z \rangle$, aquele obtido no cálculo que realizamos anteriormente para o volume infinito. Nas equações anteriores z representa o número de vizinhos mais próximos de um dado spin, e $\gamma_{\vec{k}''}$ é o fator de estrutura referente aos planos cristalinos dado por :

$$\gamma_{\vec{k}''} = \frac{1}{2} (\cos a k_x + \cos a k_z) \quad (3-11)$$

O acoplamento entre as equações (3-7) a (3-10) não permite que o cálculo da magnetização da superfície ou do segundo plano seja feito da mesma forma que foi realizado para o volume infinito, uma vez que agora não é possível exprimir as Funções de Green de cada plano na forma de uma função delta. Utilizando a equação (2-23) que dá a função densidade espectral em função do salto da Função de Green ao cruzar o eixo real, temos:

$$J(\omega) = \frac{i}{(e^{\beta\omega} - 1)} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\{ G_{\vec{l}\vec{m}}^r(\omega + i\epsilon) - G_{\vec{l}\vec{m}}^a(\omega - i\epsilon) \right\}.$$

Consideraremos ainda a seguinte identidade

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{E - \omega \pm i\epsilon} \right] = \mathcal{P} \left(\frac{1}{E - \omega} \right) \pm i\pi \delta(E - \omega) \quad (3-12)$$

onde \mathcal{P} indica a parte principal de Cauchy⁽²⁶⁾

Usando esta identidade nas equações (2-18) e (2-20) que relacionam as Funções de Green retardada e avançada com a função

densidade espectral obtemos:

$$\begin{aligned}
 G_{\vec{l}\vec{m}}^r(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) \left[\mathcal{P} \frac{1}{E - \omega} - i\pi \delta(E - \omega) \right] d\omega = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{(E - \omega)} d\omega - \frac{i}{2} J(E) (e^{\beta E} - 1), \quad (3-13)
 \end{aligned}$$

e

$$G_{\vec{l}\vec{m}}^a(E) = \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - 1)}{(E - \omega)} d\omega + \frac{i}{2} J(E) (e^{\beta E} - 1). \quad (3-14)$$

Temos então que:

$$G_{\vec{l}\vec{m}}^r(E) - G_{\vec{l}\vec{m}}^a(E) = -i J(E) (e^{\beta E} - 1) = 2i \text{Im} G_{\vec{l}\vec{m}}^r(E). \quad (3-15)$$

A função densidade espectral pode então ser escrita como:

$$J(E) = -2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\text{Im} G_{\vec{l}\vec{m}}^r(E + i\epsilon)}{(e^{\beta E} - 1)}. \quad (3-16)$$

Utilizando esta expressão de $J(E)$ na equação (2-15) com $t=t'$, levando-se em conta a simetria de translação bidimensional do cristal e considerando-se $m=1$, teremos a função de correlação escrita como:

$$\langle S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^+ \rangle = -2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im} \left[\frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_n} \tilde{G}_{\vec{l}m}^r(\vec{K}_n, E + i\epsilon) \right]}{(e^{\beta E} - 1)} dE. \quad (3-17)$$

Substituindo esta expressão da função de correlação na equação (2-7) e escrevendo

$$\frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_{ll}} \tilde{G}_{lm}^r(\vec{K}_{ll}, E+i\epsilon) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \vec{K}_{ll} \tilde{G}_{lm}^r(\vec{K}_{ll}, E+i\epsilon), \quad (3-18)$$

onde estamos considerando que o cristal está sendo representado por uma rede cúbica simples com parâmetro de rede a , obtemos a seguinte relação entre a transformada de Fourier da Função de Green e a magnetização:

$$\langle S_l^z \rangle = \frac{1}{2} + 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \frac{\text{Im} [\tilde{G}_{ll}^r(\vec{K}_{ll}, E+i\epsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)} d^2 \vec{K}_{ll}, \quad (3-19)$$

onde novamente consideramos que a magnetização é homogênea dentro de cada plano.

Para se obter uma expressão para a transformada de Fourier da Função de Green, \tilde{G}_{ll}^r , em função dos parâmetros associados ao cristal, devemos resolver o sistema de equações (3-7) a (3-10). Esse sistema de equações pode ser representado por um produto de matrizes na forma:

$$[\Omega \tilde{G}^r]_{lm} = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi} \delta_{lm}, \quad (3-20)$$

e, conseqüentemente, para $l=m$ podemos escrever:

$$\tilde{G}_{ll}^r = \Omega_{ll}^{-1} \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi}. \quad (3-21)$$

Desta forma, podemos escrever a magnetização em cada plano do cristal como:

$$\langle S_{\ell}^z \rangle = \frac{1/2}{1 + 2 \phi_{\ell}}, \quad (3-22)$$

onde

$$\phi_{\ell} = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \frac{\text{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{k}_{\parallel}, E + i\epsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)} d^2 \vec{k}_{\perp}. \quad (3-23)$$

A determinação da magnetização depende agora de se encontrar uma expressão para $\Omega_{\ell\ell}^{-1}$ o que pode ser feito se lembrarmos que:

$$\Omega_{\ell\ell}^{-1} = \frac{C_{\ell\ell}}{D_0} \quad (3-24)$$

onde $C_{\ell\ell}$ é o cofator de $\Omega_{\ell\ell}$ e D_0 é o determinante da matriz Ω

Para determinar os $\Omega_{\ell\ell}^{-1}$ vamos escrever a matriz Ω , que por conveniência será expressa na forma:

$$\Omega = \begin{pmatrix} 2t + \alpha_{00} & \Omega_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \Omega_{10} & 2t + \alpha_{11} & \Omega_{12} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \alpha & 2t + \alpha_{22} & \alpha & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \alpha & 2t & \alpha & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \alpha & 2t & \cdot \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (3-25)$$

Comparando os elementos de matriz acima com as equações (3-7)

a (3-10) podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \alpha_{00} = & \left[\varepsilon_{\parallel} J_{\parallel} z \chi_{\vec{k}_{\parallel}} - z(1-\varepsilon_{\parallel}) J_{\parallel} \right] \langle \mathcal{S}_0^z \rangle - (1-\varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle \mathcal{S}_1^z \rangle - \\ & - \left[\varepsilon J z \chi_{\vec{k}_{\parallel}} - (z+2)(1-\varepsilon) J \right] \langle \mathcal{S}_2^z \rangle , \end{aligned} \quad (3-26)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{11} = & -(1-\varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle \mathcal{S}_0^z \rangle + \left[\varepsilon J z \chi_{\vec{k}_{\parallel}} - z(1-\varepsilon) J \right] \langle \mathcal{S}_1^z \rangle - \\ & - \left[\varepsilon J z \chi_{\vec{k}_{\parallel}} - (z+1)(1-\varepsilon) J \right] \langle \mathcal{S}_2^z \rangle , \end{aligned} \quad (3-27)$$

$$\alpha_{22} = -(1-\varepsilon) J \langle \mathcal{S}_1^z \rangle + (1-\varepsilon) J \langle \mathcal{S}_2^z \rangle , \quad (3-28)$$

$$\Omega_{01} = \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle \mathcal{S}_0^z \rangle , \quad (3-29)$$

$$\Omega_{10} = \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle \mathcal{S}_1^z \rangle , \quad (3-30)$$

$$\Omega_{12} = \varepsilon J \langle \mathcal{S}_1^z \rangle , \quad (3-31)$$

$$\alpha = \varepsilon J \langle \mathcal{S}_2^z \rangle , \quad (3-32)$$

$$2t = \left\{ E + \left[\varepsilon J z \chi_{\vec{k}_{\parallel}} - (z+2)(1-\varepsilon) J \right] \langle \mathcal{S}_2^z \rangle - h \right\} . \quad (3-33)$$

Utilizando o desenvolvimento de Laplace para representar o determinante da matriz Ω teremos:

$$D_0 = (2t + \alpha_{00}) D_1 - \Omega_{01} \Omega_{10} D_2 , \quad (3-34)$$

$$D_1 = (2t + \alpha_{11}) D_2 - \alpha \Omega_{12} D_3 , \quad (3-35)$$

$$D_2 = (2t + \alpha_{22}) D_3 - \alpha^2 D_4 \quad (3-36)$$

e

$$D_N = 2t D_{N+1} - \alpha^2 D_{N+2} \quad \text{para } N \geq 3, \quad (3-37)$$

sendo que D_N representa o determinante da matriz Ω , de onde foram retiradas as primeiras N linhas e colunas.

Considerando que $C_{00} = D_1$ teremos para Ω_{00}^{-1} a seguinte expressão:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{D_1}{D_0} = \frac{1}{\frac{D_0}{D_1}} \quad (3-38)$$

Utilizando a equação (3-34) teremos:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{1}{2t + \alpha_{00} - \frac{\Omega_{01} \Omega_{10}}{\frac{D_1}{D_2}}} \quad (3-39)$$

Repetindo sucessivamente o processo de substituição dos D_N através das equações (3-34) a (3-37), chegaremos a:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{1}{2t + \alpha_{00} - \frac{\Omega_{01} \Omega_{10}}{2t + \alpha_{11} - \frac{\alpha \Omega_{12}}{2t + \alpha_{22} - \frac{\alpha^2}{\frac{D_3}{D_4}}}}} \quad (3-40)$$

Para $N \geq 3$ vemos pela equação (3-37) que:

$$\frac{D_N}{D_{N+1}} = 2t - \frac{\alpha^2}{\frac{D_{N+1}}{D_{N+2}}} \quad (3-41)$$

Consequentemente, à medida que N cresce, a fração $\frac{D_N}{D_{N+1}}$ tem sua forma repetida indefinidamente:

$$\frac{D_N}{D_{N+1}} = \frac{\alpha^2}{2t - \frac{\alpha^2}{2t - \frac{\alpha^2}{\vdots \frac{D_{N+K}}{D_{N+K+1}}}}} \quad (3-42)$$

Definindo o parâmetro $\xi(t)$ como:

$$\xi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \alpha^2 \frac{D_{N+1}}{D_N} \quad \text{para } N \geq 3, \quad (3-43)$$

poderemos escrever Ω_{00}^{-1} na forma:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{1}{2t + \alpha_{00} - \frac{\Omega_{01} \Omega_{10}}{2t + \alpha_{11} - \frac{\alpha \Omega_{12}}{2t + \alpha_{22} - \xi}}} \quad (3-44)$$

Procedendo de forma análoga obtemos a seguinte expressão para Ω_{11}^{-1} :

$$\Omega_{11}^{-1} = \frac{1}{2t + \alpha_{11} - \frac{\Omega_{01}\Omega_{10}}{2t + \alpha_{00}} - \frac{\alpha\Omega_{12}}{2t + \alpha_{22} - \xi}} \quad (3-45)$$

Podemos reescrever Ω_{00}^{-1} e Ω_{11}^{-1} na seguinte forma geral:

$$\Omega_{ll}^{-1} = \frac{N_l(\xi)}{D(\xi)} \quad , \quad (3-46)$$

onde

$$N_0(\xi) = \xi \left[\alpha_{22} \xi^3 + (\alpha^2 - \alpha\Omega_{12} + \alpha_{11}\alpha_{22}) \xi^2 + \alpha^2(\alpha_{11} + \alpha_{22}) \xi + \alpha^4 \right] \quad , \quad (3-47)$$

$$N_1(\xi) = \xi \left[\alpha_{22} \xi^3 + (\alpha^2 + \alpha_{00}\alpha_{22}) \xi^2 + \alpha^2(\alpha_{00} + \alpha_{22}) \xi + \alpha^4 \right] \quad , \quad (3-48)$$

$$D(\xi) = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + a_3 \xi^3 + a_4 \xi^4 + a_5 \xi^5 \quad , \quad (3-49)$$

onde os coeficientes a_i são dados por:

$$a_0 = \alpha^6 \quad , \quad (3-50)$$

$$a_1 = \alpha^4 (\alpha_{00} + \alpha_{11} + \alpha_{22}) \quad , \quad (3-51)$$

$$a_2 = 2\alpha^4 - \Omega_{12}\alpha^3 + (\alpha_{11} + \alpha_{22})\alpha_{00} + \alpha_{11}\alpha_{22} - \Omega_{01}\Omega_{10}, \quad (3-52)$$

$$a_3 = (\alpha_{00} + \alpha_{11} + \alpha_{22})\alpha^2 - \alpha_{00}\Omega_{12}\alpha - \alpha_{22}\Omega_{01}\Omega_{10} + \alpha_{00}\alpha_{11}\alpha_{22}, \quad (3-53)$$

$$a_4 = \alpha^2 - \Omega_{12}\alpha + (\alpha_{00} + \alpha_{11})\alpha_{22}, \quad (3-54)$$

$$a_5 = \alpha_{22}. \quad (3-55)$$

A determinação da magnetização depende agora do parâmetro $\xi(t)$; vamos portanto retornar à equação (3-43) para explicitar a relação entre ξ e t :

$$\xi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \alpha^2 \frac{D_{N+1}}{D_N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\alpha^2}{2t - \alpha^2 \frac{D_{N+2}}{D_{N+1}}}, \quad (3-56)$$

ou ainda,

$$\xi(t) = \frac{\alpha^2}{2t - \lim_{N \rightarrow \infty} \alpha^2 \frac{D_{N+2}}{D_{N+1}}} = \frac{\alpha^2}{2t - \xi(t)}. \quad (3-57)$$

Resolvendo esta equação em $\xi(t)$, obtemos:

$$\xi(t) = t \pm \sqrt{t^2 - \alpha^2} \quad \text{para } |t| \geq \alpha$$

e

$$\xi(t) = t \pm i\sqrt{\alpha^2 - t^2} \quad \text{para } |t| < \alpha$$

Teremos, portanto, em cada região ($|t| < \alpha$ e $|t| \geq \alpha$) duas possíveis soluções para $\xi(t)$ e, conseqüentemente, dois valores para a magnetização. A escolha de qual valor de $\xi(t)$ é o adequado como solução física do problema é feita da seguinte forma:

Na região na qual $|t| < \alpha$, e considerando que a função de correlação $\langle S_1^- S_1^+ \rangle$ deve apresentar valores positivos ou nulos, as equações (3-17), (3-21) e (3-46) implicam em que:

$$\text{Im} \frac{N_2(\xi)}{D(\xi)} < 0. \quad (3-58)$$

Para que esta condição seja satisfeita, a solução que deve ser escolhida é (12,31):

$$\xi = t - i(\alpha^2 - t^2)^{1/2}. \quad (3-59)$$

Na região em que $|t| \geq \alpha$ pode-se mostrar que a fração continuada definida pela equação (3-43) converge à raiz real que tem o menor valor absoluto^(30,3) e, portanto, deveremos escolher a solução:

$$\xi = t - (t^2 - \alpha^2)^{1/2}. \quad (3-60)$$

Devido a essa mudança no comportamento de $\xi(t)$ em função da região em que se toma t deveremos, para o cálculo da magnetização, dividir a integral da equação (3-23), que define a função Φ_1 , em três regiões. Após efetuarmos uma mudança da variável de integração de E para t , através da equação (3-33),

obtemos:

$$\phi_{\ell} = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{2}{\pi} \int d^2 \vec{K}'' \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^{-\infty} \frac{dt \operatorname{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{K}'', t+i\varepsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)} + \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \operatorname{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{K}'', t+i\varepsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)} + \int_{+\infty}^{+\infty} \frac{dt \operatorname{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{K}'', t+i\varepsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)} \right].$$

(3-61)

Pode-se mostrar que:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \operatorname{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\xi(t+i\varepsilon))] = \pi \sum_{\gamma} \frac{N_{\ell}(\xi_{\gamma})}{D'(\xi_{\gamma})} \delta(\xi - \xi_{\gamma}), \quad (3-62)$$

onde ξ_{γ} são as raízes do polinômio $D(\xi)$ e $D'(\xi_{\gamma})$ é a derivada do polinômio $D(\xi)$ calculada no ponto ξ_{γ} . Fica evidente agora a conveniência de se efetuar uma nova mudança na variável de integração na primeira e na terceira integrais dentro do colchete da equação (3-61). Com base na equação (3-57) e, levando-se em conta que quando $t \rightarrow \pm\infty$, $\xi \rightarrow 0$ e que para $t \rightarrow \pm a$, $\xi \rightarrow \pm a$, obtemos:

$$\begin{aligned}
\phi_l = & -\left(\frac{2}{\pi}\right)\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \left\{ \int d^2 \vec{k}_{\parallel} \left[\frac{\pi}{2} \sum_{\gamma} \int_0^{\alpha} d\xi \left(\frac{\alpha^2 - \xi^2}{\xi^2} \right) \frac{N_l(\xi_{\gamma})}{D'(\xi_{\gamma})} \frac{\delta(\xi - \xi_{\gamma})}{(e^{\beta E} - 1)} + \right. \right. \\
& + \frac{\pi}{2} \sum_{\gamma} \int_{-\alpha}^0 d\xi \left(\frac{\alpha^2 - \xi^2}{\xi^2} \right) \frac{N_l(\xi_{\gamma})}{D'(\xi_{\gamma})} \frac{\delta(\xi - \xi_{\gamma})}{(e^{\beta E} - 1)} + \\
& \left. \left. + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\alpha}^{+\alpha} dt \frac{\text{Im} \left[\Omega_{ll}^{-1}(\vec{k}_{\parallel}, t + i\varepsilon) \right]}{(e^{\beta E} - 1)} \right] \right\} \quad (3-63)
\end{aligned}$$

Fazendo-se uso da equação (3-46), teremos:

$$\begin{aligned}
\phi_l = & -\left(\frac{2}{\pi}\right)\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \vec{k}_{\parallel} \left[\int_{-\alpha}^{+\alpha} dt \frac{\text{Im} \left(\frac{N_l(\xi)}{D(\xi)} \right)}{(e^{\beta E} - 1)} + \right. \\
& \left. + \frac{\pi}{2} \sum_{\gamma} \frac{N_l(\xi_{\gamma})}{D'(\xi_{\gamma})} \frac{(\alpha^2 - \xi_{\gamma}^2)}{\xi_{\gamma}^2 (e^{\beta E} - 1)} \right] \quad (3-64)
\end{aligned}$$

O cálculo da integral nos vetores de onda \vec{k}_{\parallel} é feito utilizando-se o método dos pontos especiais em duas dimensões para uma rede quadrada⁽²⁸⁾, ficando a equação (3-64) na seguinte forma final, dada por:

$$\phi_\ell = -\left(\frac{2}{\pi}\right) \sum_{i=1}^n \omega_i \left[\int_{-\alpha}^{+\alpha} dt \frac{I_m\left(\frac{N_\ell(\xi)}{D(\xi)}\right)}{(e^{\beta E} - 1)} + \right. \\ \left. + \frac{\pi}{2} \sum_{\gamma} \frac{N_\ell(\xi_\gamma)}{D'(\xi_\gamma)} \frac{(\alpha^2 - \xi_\gamma^2)}{\xi_\gamma^2 (e^{\beta E} - 1)} \right] , \quad (3-65)$$

onde ω_i são os pesos associados aos pontos especiais e n é o número de pontos especiais considerados.

Com esta expressão para a função Φ_1 , e adotando o valor anteriormente encontrado para a magnetização do volume infinito como sendo o valor da magnetização a partir do terceiro plano, poderemos calcular a magnetização para o primeiro plano (superfície), e para o segundo plano resolvendo autoconsistentemente o sistema de equações:

$$\langle S_0^z \rangle = \frac{1/2}{1 + 2\phi_0} , \quad (3-66)$$

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1/2}{1 + 2\phi_1} . \quad (3-67)$$

Além dos valores de magnetização, dados pelas equações (3-66) e (3-67), podemos obter também as energias de excitação das ondas de spin do sistema a partir das equações (3-33) e (3-57):

$$E_{\vec{k}''} = (\xi_\gamma - \alpha^2 \xi_\gamma^{-1}) - [\epsilon J_z \gamma_{\vec{k}''} - (z+2)(1-\epsilon)J] \langle S_2^z \rangle , \quad (3-68)$$

onde ξ_γ são as raízes do polinômio $D(\xi)$, dado pela equação (3-49), e onde consideramos o campo externo igual a zero.

Assim como no volume infinito, aqui também os polos da Função de Green, que, como podemos ver através das equações (3-21) e (3-46), correspondem às raízes do polinômio $D(\xi)$, são identificados com as energias de excitação das ondas de spin do sistema. Entretanto neste caso estas ondas de spin são localizadas próximo à superfície livre do cristal. Isto pode ser visto se considerarmos que a amplitude de excitação destas ondas é proporcional aos elementos de matriz não diagonais $\tilde{G}_{lm}^{(32)}$, definidos pela equação (3-3), que, por sua vez, podem ser escritos na forma:

$$\tilde{G}_{lm} = b(\xi)^l, \quad (3-69)$$

onde l indica o plano cristalino a partir da superfície ($l=0$) e b é uma constante independente de l .

Se lembrarmos que em nosso caso quando $|t| > \alpha$, teremos $|\xi| < 1$, fica fácil ver que à medida que se adentra o cristal, a amplitude das ondas de spin vai diminuindo, o que implica em uma localização próximo à superfície, ou seja, teremos os chamados modos localizados.

Se na região onde $|t| \leq \alpha$, escrevermos $t = \alpha \cos(\alpha k)$ a relação de dispersão dada pela equação (3-33) se torna igual à relação de dispersão encontrada para o volume infinito, dada pela equação (2-59). Neste caso, a amplitude das ondas de spin é uniforme, independente do índice de plano, e as ondas podem ser encontradas com igual probabilidade em qualquer plano do cristal. Os modos de volume são portanto estendidos.

Deve-se notar que a solução das equações (3-66) e (3-67) dá os valores da magnetização apenas para a região de temperaturas abaixo da temperatura crítica de volume ($\tau < \tau_c^v$). Quando a temperatura do cristal alcança um valor maior que o da temperatura crítica de volume ($\tau > \tau_c^v$) a magnetização do volume cai a zero; entretanto, dependendo dos valores dos parâmetros (ϵ e J) poderemos obter ainda magnetização diferente de zero na superfície.

Com o objetivo de estudar o comportamento da magnetização na superfície para $\tau > \tau_c^v$, determinaremos as expressões para $\langle S_0^z \rangle$ e $\langle S_1^z \rangle$ quando a magnetização de volume ($\langle S_2^z \rangle$) é igual a zero.

A diferença com relação à região onde $\tau < \tau_c^v$ começa a aparecer a partir do cálculo, para cada plano, da expressão dada pela equação (3-6).

Teremos agora, com $\langle S_2^z \rangle = 0$ o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \epsilon=0 \quad \left\{ E + \left[\epsilon_{||} J_{||} z \delta_{K_{||}} - z(1-\epsilon_{||}) J_{||} \right] \langle S_0^z \rangle - (1-\epsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_1^z \rangle - h \right\} \tilde{G}_{0m} + \\ + \epsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_0^z \rangle \tilde{G}_{1m} = \frac{\langle S_0^z \rangle}{\pi} \delta_{0m} \quad , \quad (3-70) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon=1 \quad \epsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_1^z \rangle \tilde{G}_{0m} + \left\{ E - (1-\epsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_0^z \rangle + \left[\epsilon J z \delta_{K_{||}} - \right. \right. \\ \left. \left. - z(1-\epsilon) J \right] \langle S_1^z \rangle - h \right\} \tilde{G}_{1m} + \epsilon J \langle S_1^z \rangle \tilde{G}_{2m} = \frac{\langle S_1^z \rangle}{\pi} \delta_{1m} \quad , \quad (3-71) \end{aligned}$$

$$\epsilon=2 \quad \left[E - (1-\epsilon) J \langle S_1^z \rangle - h \right] \tilde{G}_{2m} = 0 \quad , \quad (3-72)$$

$$\epsilon=3 \quad (E - h) \tilde{G}_{lm} = 0 \quad . \quad (3-73)$$

Estas equações podem ser escritas como o produto de duas matrizes na forma:

$$[\Omega \tilde{G}]_{lm} = \frac{\langle S_l^z \rangle}{\pi} \delta_{lm} , \quad (3-74)$$

onde $\langle S_l^z \rangle = 0$ para $l \geq 2$, e a matriz Ω é dada por:

$$\Omega = \begin{pmatrix} t - \alpha_{00} & \Omega_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \Omega_{10} & t - \alpha_{11} & \Omega_{12} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & t - \alpha_{22} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & \cdot \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} , \quad (3-75)$$

sendo:

$$\alpha_{00} = - \left\{ [\varepsilon_{||} J_{||} z \delta_{\vec{r}''} - z(1 - \varepsilon_{||}) J_{||}] \langle S_0^z \rangle - (1 - \varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_1^z \rangle \right\} , \quad (3-76)$$

$$\alpha_{11} = (1 - \varepsilon_{\perp}) J_{\perp} \langle S_0^z \rangle - [\varepsilon J z \delta_{\vec{r}''} - z(1 - \varepsilon) J] \langle S_1^z \rangle , \quad (3-77)$$

$$\alpha_{22} = (1 - \varepsilon) J \langle S_1^z \rangle , \quad (3-78)$$

$$\Omega_{01} = \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_0^z \rangle , \quad (3-79)$$

$$\Omega_{10} = \varepsilon_{\perp} J_{\perp} \langle S_1^z \rangle , \quad (3-80)$$

$$\Omega_{12} = \varepsilon J \langle S_1^z \rangle \quad (3-81)$$

$$e \quad t = (E - h) \quad (3-82)$$

Da mesma forma que foi feito na região onde $\tau < \tau_c^v$, precisaremos calcular os elementos de matriz Ω_{ll}^{-1} para a determinação da magnetização $\langle S_l^z \rangle$.

Lembrando que:

$$\Omega_{ll}^{-1} = \frac{C_{ll}}{D_0} \quad , \quad (3-83)$$

onde C_{ll} é o cofator do elemento Ω_{ll} da matriz Ω , e D_0 , é o determinante da matriz Ω , vamos determinar D_0 , C_{00} e C_{11} .

Utilizando o desenvolvimento de Laplace para representar o determinante D_0 da matriz Ω teremos:

$$D_0 = (t - \alpha_{00}) D_1 - \Omega_{01} \Omega_{10} D_2 \quad , \quad (3-84)$$

$$D_1 = (t - \alpha_{11}) D_2 \quad , \quad (3-85)$$

$$D_2 = (t - \alpha_{22}) D_3 \quad , \quad (3-86)$$

$$D_N = t D_{N+1} \quad \text{para } N \geq 3 \quad . \quad (3-87)$$

sendo que D_N está representando o determinante da matriz Ω de onde foram retiradas as primeiras N linhas e colunas

Considerando que $C_{00} = D_1$, teremos para Ω_{00}^{-1} a seguinte expressão:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{D_1}{D_0} = \frac{1}{\frac{D_0}{D_1}}, \quad (3-88)$$

e utilizando as equações (3-84) a (3-87) teremos:

$$\Omega_{00}^{-1} = \frac{(t - \alpha_{11})}{(t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \Omega_{01}\Omega_{10}} \quad (3-89)$$

Considerando que $C_{11} = (t - \alpha_{00})D_2$, e procedendo da mesma forma que para a determinação de Ω_{00}^{-1} , obtemos:

$$\Omega_{11}^{-1} = \frac{(t - \alpha_{00})}{(t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \Omega_{01}\Omega_{10}} \quad (3-90)$$

As equações (3-89) e (3-90) podem ser escritas na forma:

$$\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{R}_{\ell}, E) = \frac{N_{\ell}(t)}{D(t)}, \quad (3-91)$$

onde

$$N_0(t) = (t - \alpha_{11}), \quad (3-92)$$

$$N_1(t) = (t - \alpha_{00}), \quad (3-93)$$

$$D(t) = (t - \alpha_{00})(t - \alpha_{11}) - \Omega_{01}\Omega_{10} \quad (3-94)$$

Para encontrar o valor da magnetização na superfície ($\langle S_0^z \rangle$)

e no segundo plano ($\langle S_1^z \rangle$) precisamos resolver a integral dada pela equação (3-23):

$$\phi_\ell = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int d^2 \vec{k}'' \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\text{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{k}'', t+i\varepsilon)]}{(e^{\beta E} - 1)}, \quad (3-95)$$

onde foi feita a mudança da variável de integração com base na equação (3-82).

Considerando ainda que se pode mostrar que⁽³²⁾:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} [\Omega_{\ell\ell}^{-1}(\vec{k}'', t+i\varepsilon)] = -\pi \sum_{\gamma} \frac{N_\ell(t_\gamma)}{D'(t_\gamma)} \delta(t - t_\gamma), \quad (3-96)$$

onde t_γ são as raízes do polinômio $D(t)$ e $D'(t)$ é a derivada de $D(t)$ calculada no ponto t_γ , podemos escrever que:

$$\phi_\ell = \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int d^2 \vec{k}'' \sum_{\gamma} \frac{N_\ell(t_\gamma)}{D'(t_\gamma)} \frac{1}{e^{\beta t_\gamma} - 1}. \quad (3-97)$$

Chamando de t_1 e t_2 as raízes do polinômio $D(t)$, e calculando $D'(t)$ a partir da equação (3-94) teremos:

$$\phi_0 = \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int d^2 \vec{k}'' \frac{1}{(t_1 - t_2)} \left[\frac{(t_1 - \alpha_{11})}{(e^{\beta t_1} - 1)} - \frac{(t_2 - \alpha_{11})}{(e^{\beta t_2} - 1)} \right], \quad (3-98)$$

e

$$\phi_1 = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2\vec{k}'' \frac{1}{(t_1 - t_2)} \left[\frac{(t_1 - \alpha_{00})}{(e^{\beta t_1} - 1)} - \frac{(t_2 - \alpha_{00})}{(e^{\beta t_2} - 1)} \right] \quad (3-99)$$

As equações (3-22) , (3-98) e (3-99) permitem o cálculo da magnetização na superfície e no segundo plano na região de temperatura $\tau > \tau_c^v$.

As energias de excitação das ondas de spin são obtidas de forma semelhante à usada na região de temperaturas onde $\tau < \tau_c^v$. As equações (3-74) , (3-82) e (3-91) implicam em que os polos da Função de Green, que são identificados com as energias de excitação das ondas de spin, sejam dados pelas raízes do polinômio $D(t)$, dado pela equação (3-92) e, conseqüentemente, que a relação de dispersão seja dada por:

$$E_1 = \frac{(\alpha_{11} + \alpha_{00}) + \sqrt{(\alpha_{11} - \alpha_{00})^2 + 4 \Omega_{01} \Omega_{10}}}{2} \quad (3-100)$$

e

$$E_2 = \frac{(\alpha_{11} + \alpha_{00}) - \sqrt{(\alpha_{11} - \alpha_{00})^2 + 4 \Omega_{01} \Omega_{10}}}{2} \quad (3-101)$$

Teremos portanto, em geral, dois ramos para o espectro de ondas de spin de superfície na região $\tau > \tau_c^v$. No próximo capítulo, apresentaremos os principais resultados obtidos para os acoplamentos críticos de superfície, magnetização e relações de dispersão para todo o intervalo de temperaturas.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

Neste capítulo apresentamos os principais resultados obtidos para as propriedades críticas do sistema semi-infinito de spins considerado no capítulo anterior. Em particular, apresentamos as curvas de magnetização em função da temperatura para diversos valores da anisotropia de superfície e do volume. A temperatura crítica de superfície também é apresentada em função do acoplamento de intercâmbio de superfície, como também em função da anisotropia de superfície.

Construímos também um diagrama de fases no espaço de parâmetros de anisotropia de superfície e de volume, e do acoplamento de superfície. Mostramos as respectivas linhas críticas e discutimos os resultados obtidos através da técnica das Funções de Green, comparando com outros resultados encontrados na literatura. Em particular, reservamos uma discussão mais detalhada para a situação na qual a superfície e o volume são descritos por modelos de Heisenberg. Discutimos os resultados obtidos dentro do contexto do teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾. Finalmente, apresentamos os espectros de energia das ondas de spin que se propagam no volume e próximo à superfície para diferentes valores da temperatura e dos parâmetros de nosso modelo.

Na figura 8 apresentamos as curvas de magnetização da superfície, do segundo plano e do volume. Lembramos que em nossa aproximação, o terceiro plano já é considerado como volume. Nesta

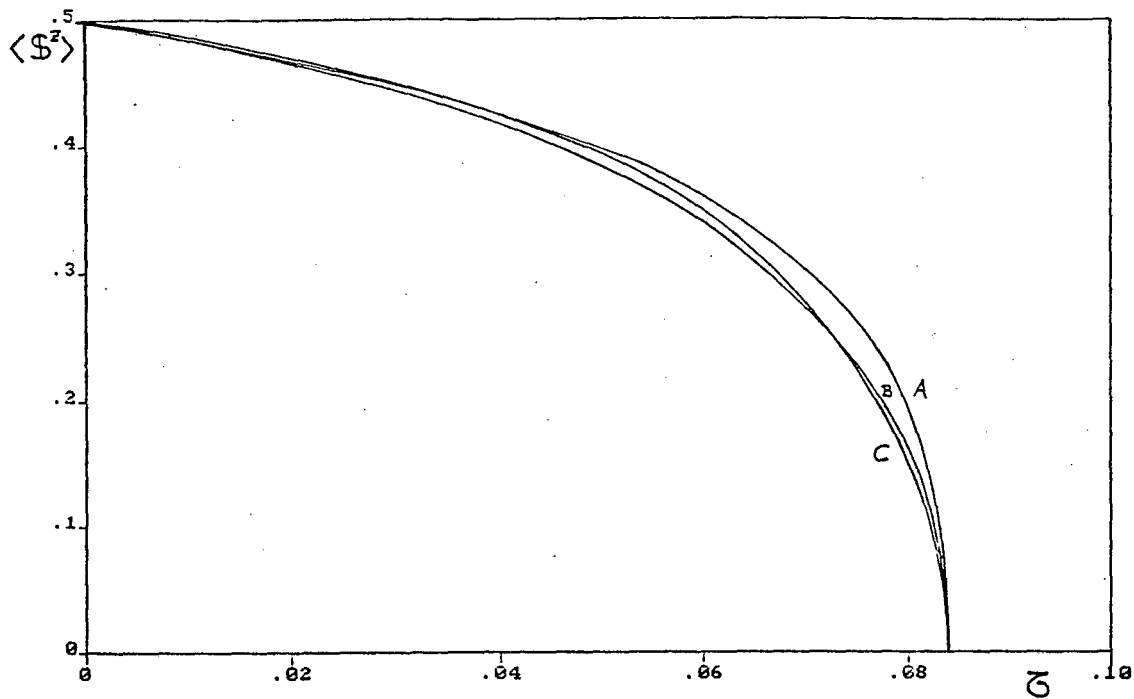


FIGURA 8 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida $\bar{\tau}$ para $\epsilon_s=0.50$; $\epsilon_v=0.50$; $RJ=2.00$; $\tau=\frac{K_B T}{6J}$; $J_L=1$
 CURVAS: A - superfície ; B - 2^{a} plano ; C - volume

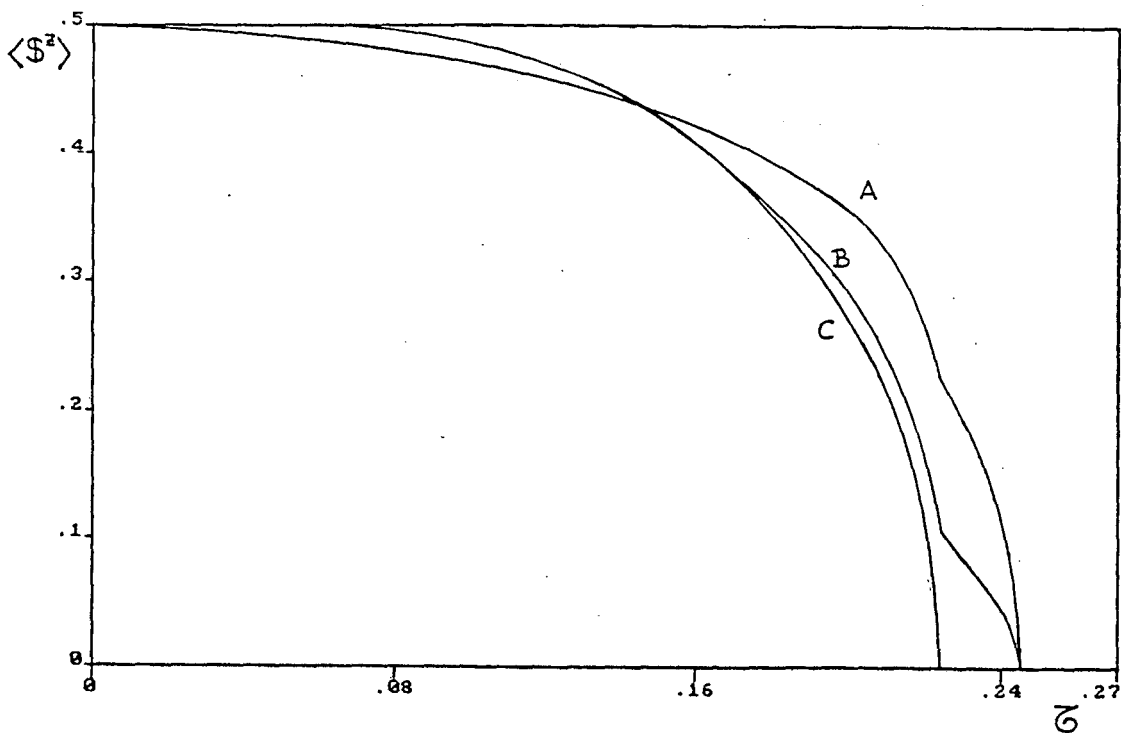


FIGURA 9 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida $\bar{\tau}$ para $\epsilon_s=0.50$; $\epsilon_v=0.10$; $RJ=5.00$; $\tau=\frac{K_B T}{6J}$; $J_L=1$
 CURVAS: A - superfície ; B - 2^{a} plano ; C - volume

figura tanto a superfície quanto o volume são descritos por modelos de Heisenberg ($\epsilon_s = \epsilon_v = 0.5$). Notamos que a temperatura crítica de superfície é igual àquela do volume, para o parâmetro relativo de superfície ($RJ = \frac{J_s}{J}$) igual a 2.0. Entretanto, como veremos adiante, acreditamos que esse comportamento característico deverá ser observado para qualquer valor de RJ , o que parece confirmar o teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾ mesmo para sistemas semi-infinitos.

Entretanto, podemos observar na figura 9, que no caso de o volume ser descrito por um modelo de Heisenberg anisotrópico, é possível observar uma magnetização de superfície, acima da temperatura crítica de volume. Adiante, mostraremos qual deve ser o valor mínimo do parâmetro RJ , para que observemos este comportamento. Um outro aspecto que chama a atenção nessas curvas é o comportamento das derivadas das magnetizações do primeiro e segundo planos na temperatura crítica de volume. Aparece uma ligeira descontinuidade nessa derivada, que é prevista também por cálculos de grupo de renormalização no espaço real⁽¹¹⁾. Entretanto, do ponto de vista experimental, experiências recentes sobre a transição de fase no gadolínio⁽²⁰⁾ indicam que a magnetização de superfície não apresenta nenhuma descontinuidade na sua derivada na temperatura crítica de volume. Mais recentemente, Morán-López e Sanchez⁽⁵⁾ mostraram, dentro da aproximação de campo médio, que essa descontinuidade na derivada é devida ao reduzido número de planos independentes que são considerados. Por exemplo, tomando-se o décimo plano, como o volume, essa descontinuidade desaparece. Portanto, acreditamos que a descontinuidade observada para a derivada da magnetização dos primeiros dois planos é devida à nossa aproximação de que o terceiro plano já é considerado como

volume.

Na figura 10, é exibido o comportamento da magnetização dos dois primeiros planos em função da temperatura, no caso em que a superfície apresenta anisotropia. O comportamento é semelhante ao apresentado na figura 9.

Observamos na figura 11, o diagrama de fases, no plano temperatura versus $RJ \left(\frac{J_s}{J} \right)$ quando a superfície é dada por um modelo de Heisenberg ($\epsilon_s = 0.5$) e o volume por um modelo de Heisenberg anisotrópico ($\epsilon_v = 0.10$). Notamos a presença de um valor crítico, $RJ = 4.09$, que divide o diagrama em três fases distintas. Se $RJ \leq 4.09$, temos as fases volume ferromagnético (VF) e a fase paramagnética (P). Entretanto, para valores maiores que $RJ_c = 4.09$, o volume está desordenado, enquanto a superfície pode estar ordenada, esta é a chamada fase superfície ferromagnética (SF). Acima da linha crítica, atingimos novamente a fase paramagnética. Na figura 12 observamos o mesmo comportamento que na figura anterior, onde agora $\epsilon_s = 0.30$, $\epsilon_v = 0.50$ e o valor de RJ crítico é 0.66 .

Na figura 13, apresentamos o gráfico da temperatura crítica relativa de superfície em função da anisotropia de superfície para diversos valores de RJ , quando $\epsilon_v = 0.10$. Para valores de RJ maiores que 4.09 , a superfície sempre se ordenará antes do volume para qualquer valor de ϵ_s . Entretanto, caso $RJ \leq 4.09$, sempre obtemos um valor da anisotropia de superfície acima da qual a superfície e o volume se ordenam simultaneamente.

Representamos na figura 14 a localização dos pontos multicríticos onde todas as três linhas críticas (VF-P, VF-SF e SF-P) se encontram. Neste diagrama tridimensional, dois eixos

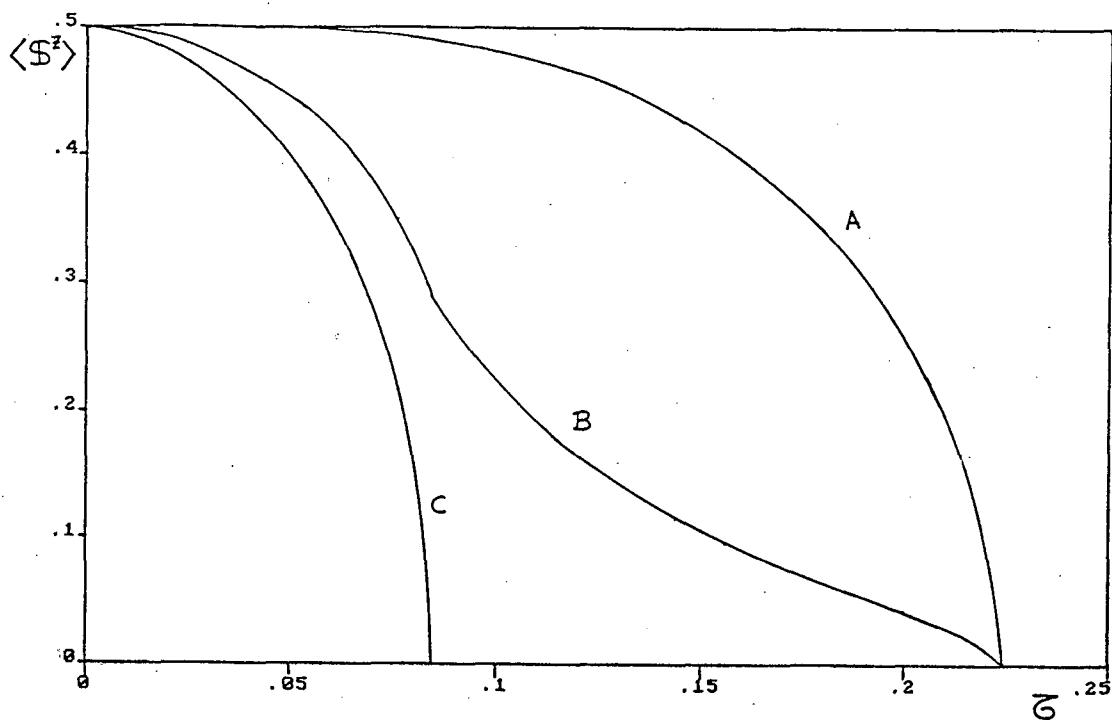


FIGURA 10 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s = 0.30$; $\epsilon_v = 0.50$; $RJ = 2.00$; $\tau = \frac{K_B T}{6J}$; $J_L = 1$
 CURVAS: A - superfície ; B - 2^o plano ; C - volume

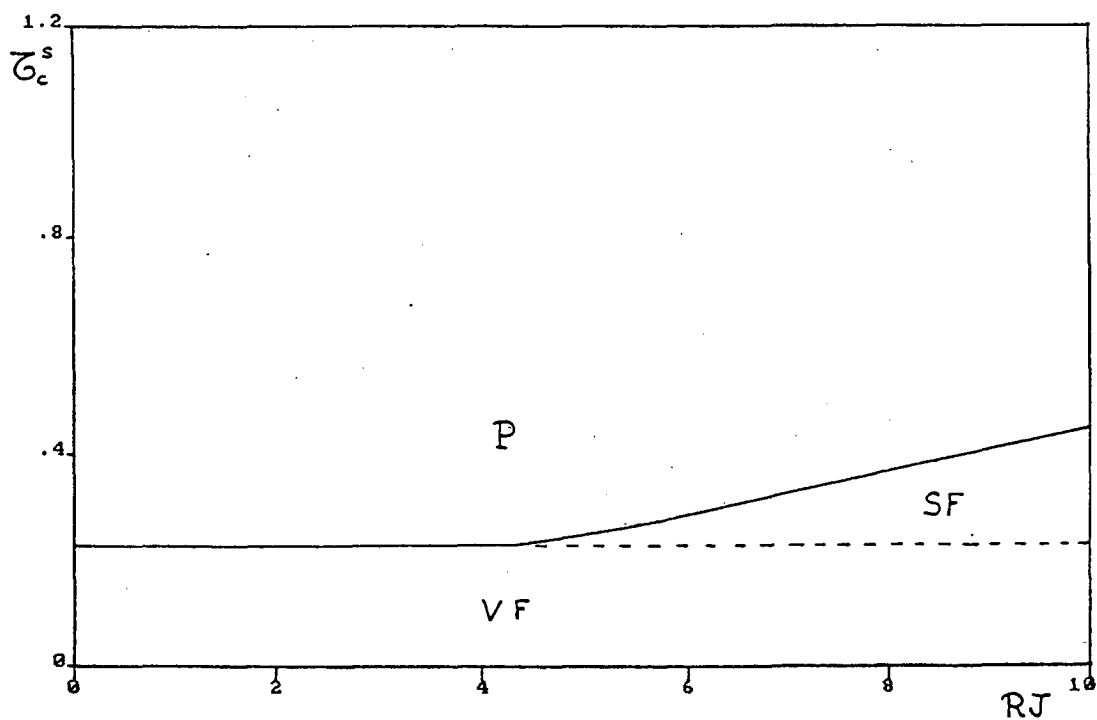


FIGURA 11 - Temperatura crítica de superfície (τ_c^s) em função do parâmetro RJ para $\epsilon_s = 0.50$; $\epsilon_v = 0.10$; $\tau_c^s = \frac{K_B T_c^s}{6J}$; $RJ = \frac{J^s}{J}$; $RJ_c = 4.09$; $J_L = 1$
 REGIÕES: VF - volume ferromagnético ; SF - superfície ferromagnética ; P - volume e superfície paramagnéticos

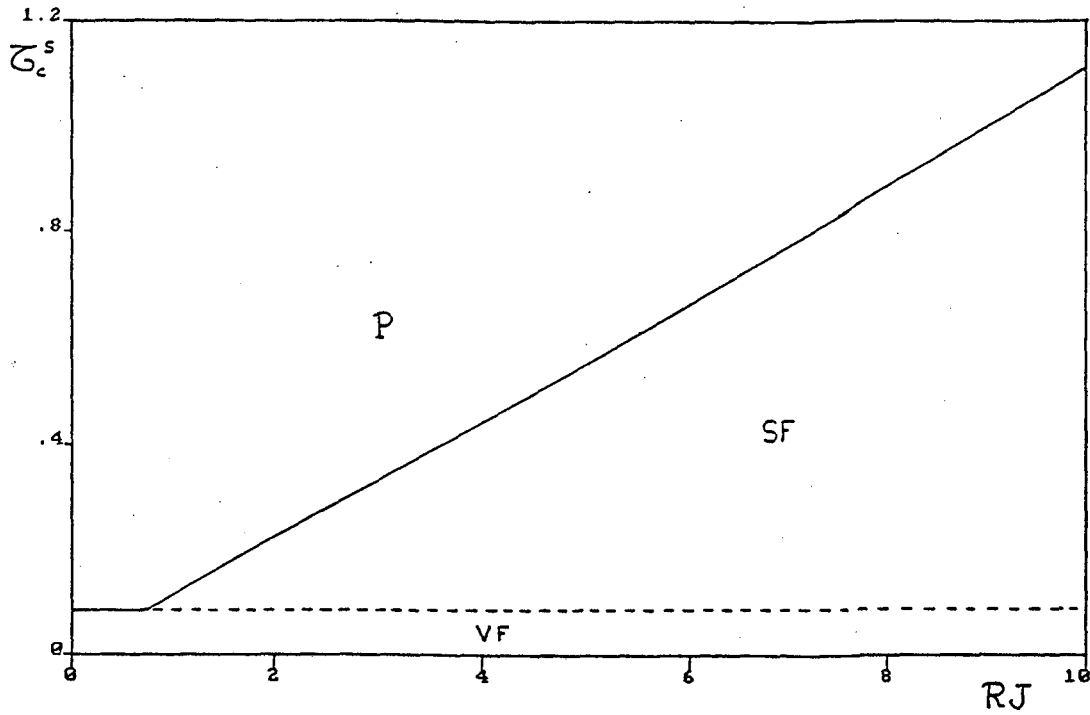


FIGURA 12 - Temperatura crítica de superfície (τ_c^s) em função do parâmetro RJ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; $\tau_c^s = \frac{K_B T_c}{6J}$; $RJ = \frac{J_s}{J}$; $RJ_c = 0.66$; $J_L = 1$
 REGIÕES: VF - volume ferromagnético ; SF - superfície ferromagnética ; P - volume e superfície paramagnéticos

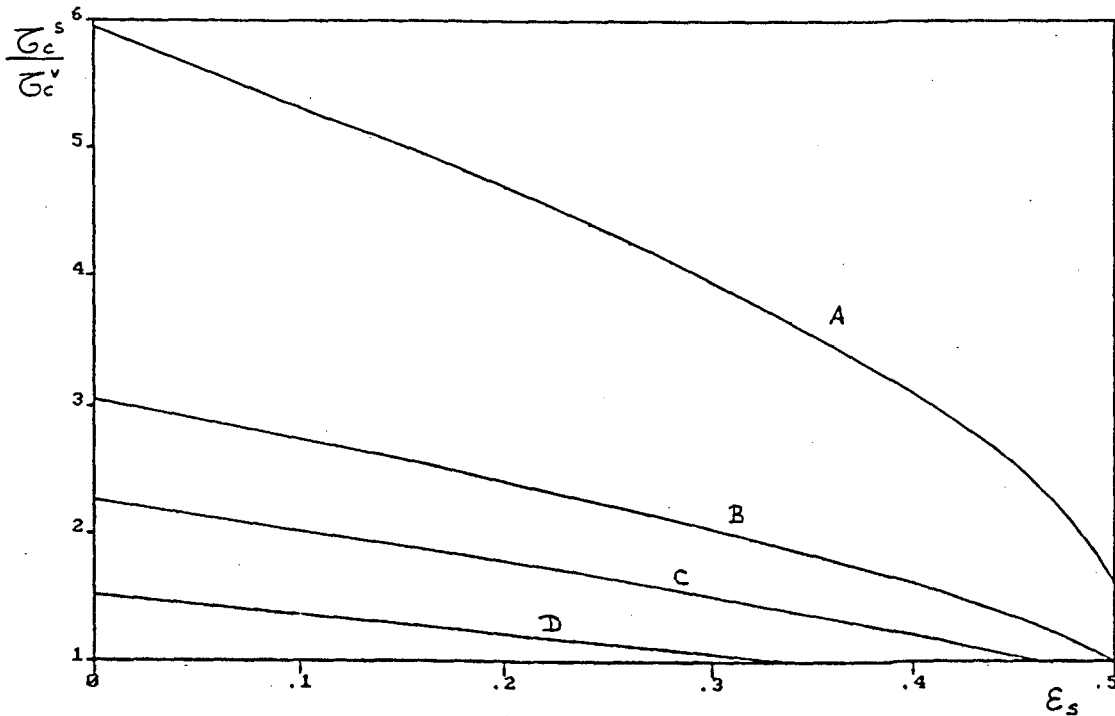


FIGURA 13 - Temperatura crítica de superfície relativa (τ_c^s / τ_c^v) em função do parâmetro de anisotropia de superfície (ϵ_s) para: $\epsilon_v=0.10$; $RJ_c=4.09$; $J_L=1$
 CURVAS: A - $RJ=8.00$; B - $RJ=4.09$; C - $RJ=3.00$;
 D - $RJ=2.00$

representam os valores possíveis da anisotropia da superfície e do volume, ϵ_s e ϵ_v , enquanto o terceiro eixo, representa o acoplamento RJ de superfície. Nosso diagrama, obtido com o auxílio das Funções de Green é qualitativamente semelhante ao obtido por Mariz, Costa e Tsallis⁽¹⁰⁾ utilizando o esquema do grupo de renormalização no espaço real. Com a finalidade de podermos comparar nossos resultados com os do trabalho acima, os valores do acoplamento RJ foram redefinidos, de tal forma que as Hamiltonianas nos dois trabalhos ficassem idênticas. Consequentemente, o valor de RJ que utilizamos na construção do diagrama é dado por:

$$RJ = \frac{1 - \epsilon_s}{1 - \epsilon_v} \left(\frac{J_s}{J_v} \right) .$$

Nesta forma, os nossos valores de RJ, podem agora ser imediatamente comparados com aqueles do trabalho acima citado.

Devemos notar que utilizando a técnica das Funções de Green não é possível obter exatamente a condição ϵ_s (ou ϵ_v) = 0, que representaria o modelo de Ising. Em nossos cálculos tomamos o valor ϵ_s (ou ϵ_v) = 0.01 como representando a tendência para o comportamento Ising. Em particular, obtivemos para a situação $\epsilon_s = \epsilon_v = 0.01$ (superfície e volume quase Ising), um valor crítico de RJ igual a 1.37. O valor encontrado por Mariz, Costa e Tsallis⁽¹⁰⁾ foi 1.74. Resultados de campo médio fornecem o valor 1.25, enquanto expansões em séries⁽⁶⁾ dão 1.6 e o método Monte Carlo⁽⁷⁾ o valor 1.5. Aproximações de campo médio que tratam algumas interações exatamente fornecem os valores $RJ_c = 1.44$ ⁽³³⁾ e $RJ_c = 1.30$ ⁽³⁴⁾.

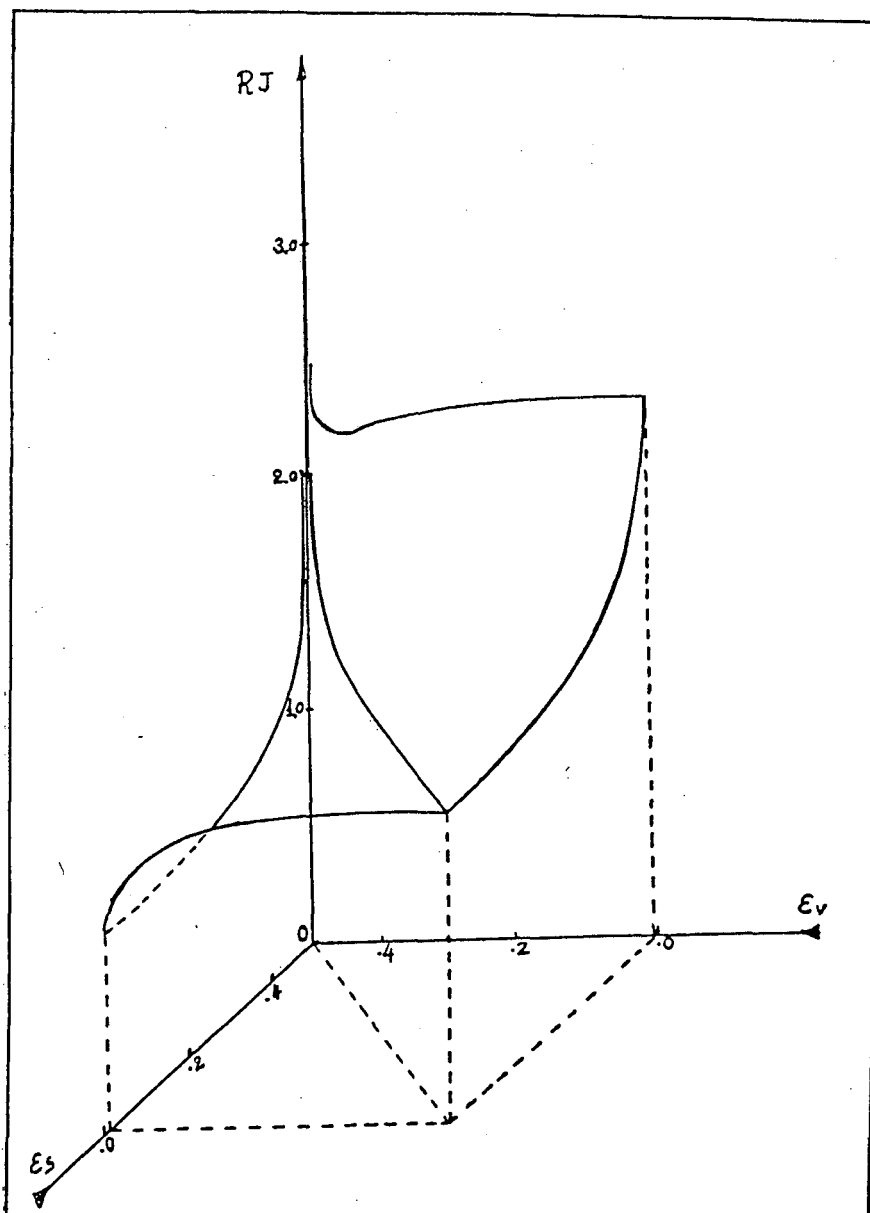


FIGURA 14 - Parâmetro de acoplamento de superfície (RJ) em função dos parâmetros de anisotropia de superfície (ϵ_s) e de volume (ϵ_v). $RJ = \left[\frac{1 - \epsilon_s}{1 - \epsilon_v} \right] \left[\frac{J_s}{J_v} \right]; J_1 = 1$

Embora o nosso cálculo não seja relativo à superfície e volume verdadeiramente Ising, no limite considerado, obtivemos resultados que são comparáveis a outros encontrados na literatura.

Quando $\varepsilon_s = 0.50$ (superfície Heisenberg) observamos que a linha crítica decresce suavemente, apresenta um ligeiro mínimo para $\varepsilon_v = 0.44$ ($RJ = 2.21$) e depois volta a crescer apresentando um comportamento divergente quando $\varepsilon_v = 0.50$, esse comportamento poderia ser atribuído a um balanço delicado entre as tendências de decrescer a temperatura crítica do volume e da superfície⁽¹⁰⁾. Por outro lado, quando $\varepsilon_s \rightarrow 0$ (superfície Ising), os valores críticos de RJ decrescem monotonicamente desde $\varepsilon_v = 0.01$ (volume quase Ising) até $\varepsilon_v = 0.50$ (volume Heisenberg). Neste caso, como os valores encontrados para RJ são relativamente pequenos, se a superfície é do tipo Ising e o volume é do tipo Heisenberg, este tipo de sistema é de certa forma privilegiado para observações experimentais.

Devemos dedicar uma atenção especial à região do diagrama na qual tanto a superfície, como o volume são descritos por modelos de Heisenberg. Podemos notar que todas as linhas críticas apresentam um comportamento divergente quando nos aproximamos dessa região. É interessante notar que esse comportamento, obtido utilizando-se o método das Funções de Green na aproximação RPA, é qualitativamente semelhante ao obtido quando se utiliza o grupo de renormalização⁽¹⁰⁾. Conforme é discutido no trabalho de Mariz, Costa e Tsallis esse tipo de comportamento não deveria ser obtido se se utilizasse Função de Green com desacoplamento RPA.

Frequentemente, quando trabalhamos com Funções de Green devemos realizar somas na primeira zona de Brillouin de uma rede

quadrada. Em geral, utilizamos o método dos pontos especiais⁽²⁸⁾, que são pontos de alta simetria e que permitem reduzir consideravelmente o trabalho computacional. Entretanto, devemos ser muito cautelosos na utilização destes pontos, quando a superfície é descrita por um modelo de Heisenberg. Neste caso o espectro varia com K^2 nas vizinhanças de $\vec{K}=0$, e, em duas dimensões, as integrais do tipo (3-65) devem levar em conta essas contribuições. Entretanto, usando o método dos pontos especiais, o ponto mais próximo de $\vec{K}=0$ é $(\frac{\pi}{8a}, \frac{\pi}{8a})$ e a contribuição resultante para a integral em \vec{k} não é muito significativa. Isso faz com que a superfície possa apresentar um valor crítico finito de RJ , tornando desta forma possível um ordenamento de superfície acima da temperatura crítica de volume, no caso do volume e da superfície serem descritos por modelos de Heisenberg. Para contornar essa dificuldade, resolvemos dividir a zona de Brillouin em uma malha bastante fina, de tal forma que as contribuições em torno da origem pudessem ser consideradas mais realisticamente. Dentro das limitações computacionais pudemos investigar até o limite de 16.777.216 pontos na primeira zona de Brillouin. Surpreendentemente, os valores de RJ crítico se tornam cada vez maiores à medida que aumentamos o número de pontos considerados na primeira zona de Brillouin. Os nossos resultados parecem indicar, de fato, que RJ crítico diverge quando o número de pontos considerados na primeira zona de Brillouin tende a infinito. Portanto, acreditamos que não é possível um ordenamento de superfície acima da temperatura crítica de volume quando a superfície e o volume são ambos descritos por modelos de Heisenberg. Esse resultado também parece claro a partir das

análises de grupo de renormalização⁽¹⁰⁾.

Devemos também ser cuidadosos em justificar esse comportamento com base no teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾ que é válido, de fato, exclusivamente para modelos bidimensionais. Esse teorema nos diz que é impossível a existência de ordem de longo alcance para um modelo de Heisenberg bidimensional, no limite de campos infinitamente pequenos, para qualquer temperatura finita. Como o modelo que estamos utilizando não é de fato bidimensional, pois a superfície está acoplada ao volume, através de uma interação de intercâmbio não nula, não podemos utilizar esse teorema imediatamente. No apêndice deste trabalho mostramos que a magnetização de superfície de um modelo de Heisenberg isotrópico em uma rede semi-infinita tem um limite superior que é finito para campos magnéticos suficientemente pequenos aplicados à superfície. De fato mostramos que:

$$\langle S_0^z \rangle \leq \frac{C}{K_B T} \frac{1}{\ln \left[1 + \frac{D}{2 \sum_{\vec{R}} J(\vec{R}) S^2 + h \langle S_0^z \rangle} \right]}$$

onde C e D são constantes e a soma em \vec{R} é sobre todas as interações entre os spins de superfície e aqueles localizados nos demais planos. É claro que se $h \rightarrow 0$ (campo magnético externo na superfície), a magnetização de superfície tem um limite superior, diferente de zero, para temperaturas finitas. Apenas se $J(\vec{R})=0$, ou seja, a superfície está isolada dos demais planos é que $\langle S_0^z \rangle \rightarrow 0$, de acordo com o teorema de Mermin e Wagner.

Evidentemente, esses argumentos não invalidam o resultado que

obtivemos anteriormente, pois a magnetização de superfície que determinamos na temperatura crítica de volume, satisfaz o limite superior acima referido.

Calculamos também a dependência da magnetização de superfície em função da temperatura para diversos valores do acoplamento de intercâmbio da superfície com o segundo plano. Ao invés de utilizar os pontos especiais de Cunningham, dividimos a primeira zona de Brillouin em um grande número de pontos (40.000 pontos). Observamos na figura 15, que à medida que esse acoplamento (J_{\perp}) diminui, a magnetização da superfície diminui sensivelmente, quando a superfície e o volume são descritos por modelos de Heisenberg.

Em particular, verifica-se que a tendência da magnetização de superfície é aquela exibida por um sistema bidimensional, ou seja, magnetização espontânea zero para qualquer temperatura, como previsto pelo teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾. Enfatizamos que devido a limitações computacionais não pudemos utilizar um número maior de pontos e valores ainda menores de J_{\perp} , mas a tendência para o comportamento bidimensional parece evidente. Cálculos utilizando os pontos especiais de Cunningham são mais fáceis de se realizar, porém, devido a não levarmos em conta as contribuições próximo da origem ($\vec{k}=0$) os resultados não convergem tão bem para a situação bidimensional⁽¹²⁾.

Finalmente apresentamos alguns resultados obtidos para o espectro de energia das ondas de spin neste sistema semi-infinito. Na figura 16 apresentamos o espectro de energia dos magnons para os valores de $\epsilon_s=0.30$, $\epsilon_v=0.50$ e $RJ=1.12$. A ordenada, normalizada, representa a energia das ondas de spin dividida por $\langle S_v^z \rangle$ ($F=E_{\vec{k}} / \langle S_v^z \rangle$). A abcissa é escrita na forma

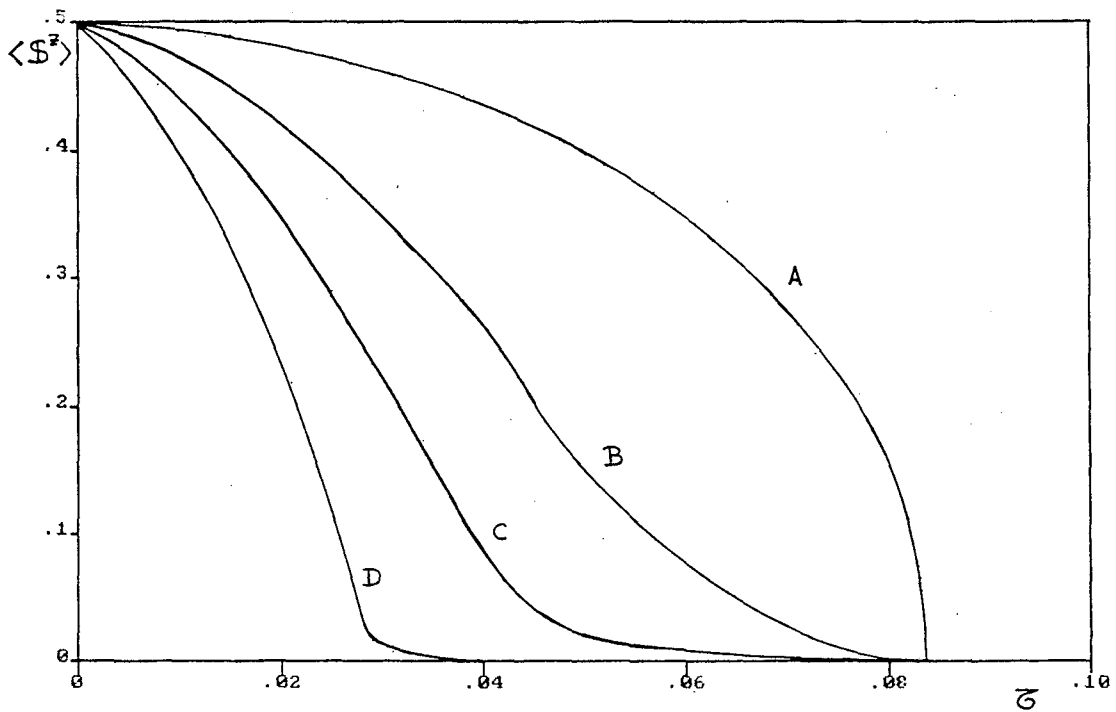


FIGURA 15 - Magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s = 0.50$; $\epsilon_v = 0.50$; $RJ = 1.00$; $\tau = \frac{K_B T}{6J}$ e diferentes valores do parâmetro de intercâmbio entre a superfície e o 2^o plano (J_{\perp})

CURVAS: A - volume ; B, C e D - superfície com $J_{\perp} = 0.1$, $J_{\perp} = 0.01$ e $J_{\perp} = 0.0001$ respectivamente

$$A(\vec{k}_{//}) = 1 - \frac{1}{2} (\cos aK_x + \cos aK_z).$$

Essa escolha de abcissa faz com que, na rede cúbica simples, o espectro de energia dos magnons de volume esteja limitado à região entre duas retas paralelas. Como vemos na figura, a região hachurada corresponde às energias dos magnons de volume que podem ser encontrados com igual probabilidade em qualquer região do cristal: esses são os chamados modos estendidos. Também observamos que, nessa região de baixas temperaturas, bem abaixo da temperatura crítica de volume, aparecem dois ramos, um abaixo do volume, que chamaremos de ramo acústico, e outro, acima do espectro de volume, que chamaremos de ramo ótico. O ramo ótico só aparece para pequenos vetores de onda, enquanto que o ramo acústico só aparece para vetores de onda próximos das fronteiras da zona de Brillouin.

Entretanto, à medida que a temperatura cresce o espectro de energia dos magnons de superfície assume um caráter bastante diferente. Na figura 17, a temperatura é próxima da temperatura crítica de volume, e vemos que se pode ter agora três ramos óticos e nenhum ramo acústico. É interessante observar que o fato da energia desses ramos ser superior à do volume, é um indício de que a superfície pode se manter ordenada acima de um volume já paramagnético.

De fato, como vimos na figura 14, o valor crítico de RJ nesse caso é 0.92. Ou seja, na temperatura crítica de volume ainda existem ondas de spin, localizadas próximo à superfície do cristal, que podem se excitadas, o que revela um ordenamento magnético de longo alcance nos planos próximos à superfície cristalina.

É interessante observar o comportamento dos modos de superfície quando consideramos valores de RJ abaixo de um valor

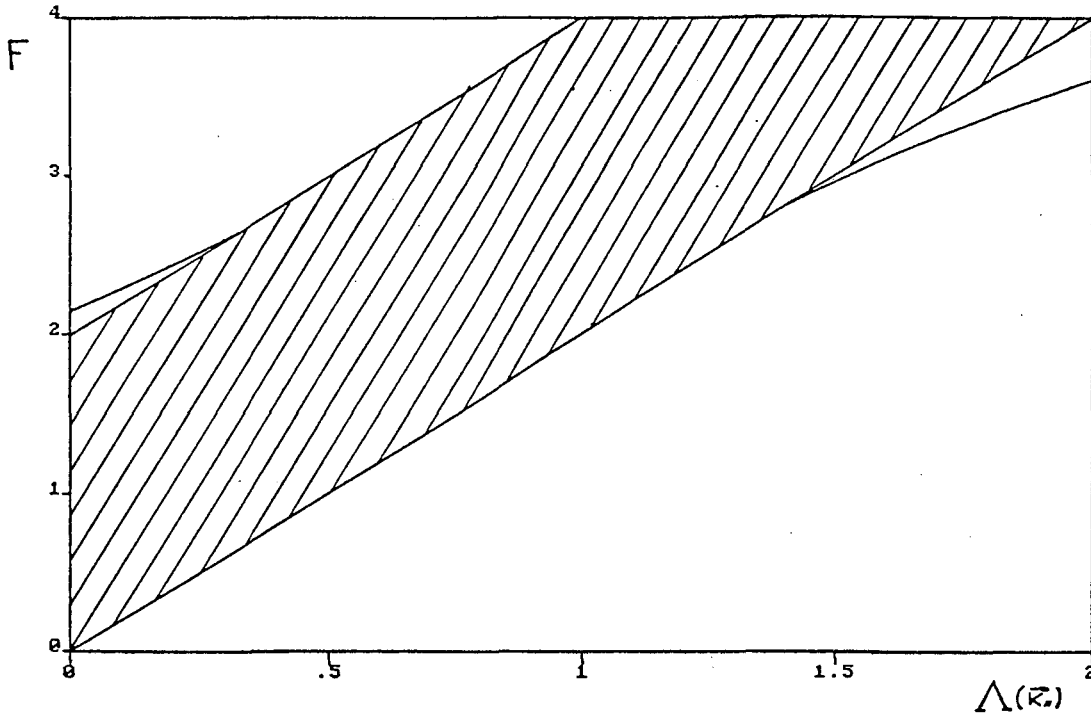


FIGURA 16 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_n)$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; $RJ=1.12$
 $\tau = 0.0189$; $\tau_c^v = 0.0839$; $F=E_{\vec{k}_n}^+ / \langle S_v^z \rangle$; $J_1=1$
 $\Lambda(\vec{k}_n) = [1 - \frac{1}{2} (\cos aK_x + \cos aK_z)]$

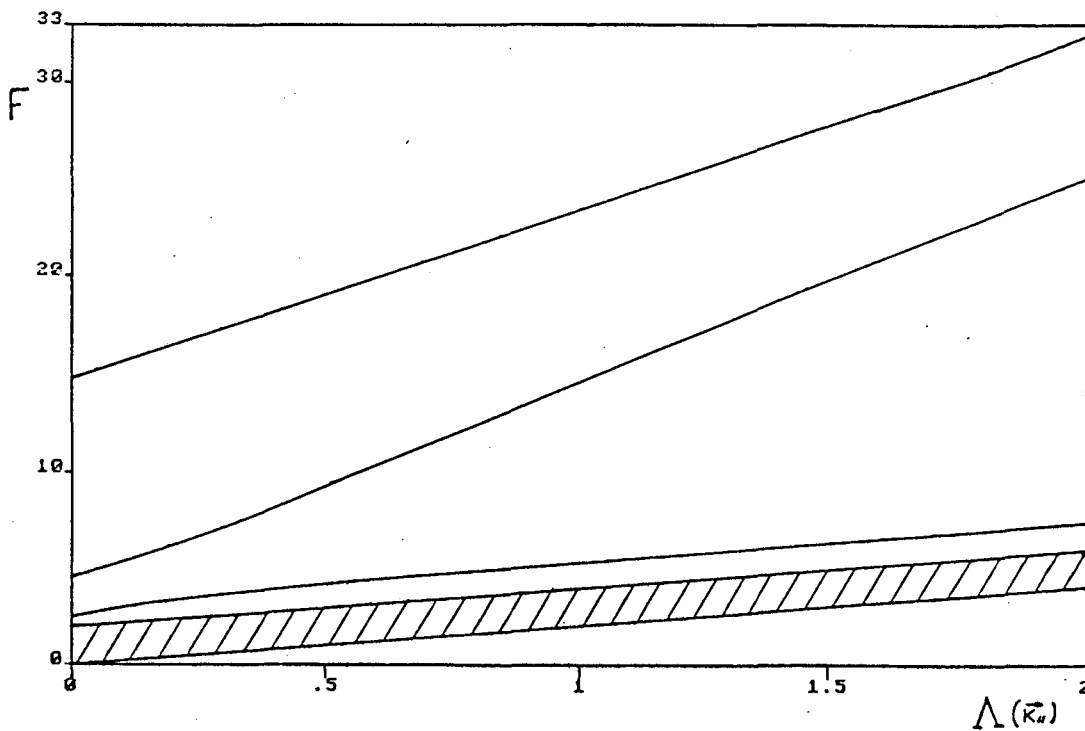


FIGURA 17 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_n)$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; $RJ=1.12$
 $\tau = 0.0837$; $\tau_c^v = 0.0839$; $F=E_{\vec{k}_n}^+ / \langle S_v^z \rangle$; $J_1=1$
 $\Lambda(\vec{k}_n) = [1 - \frac{1}{2} (\cos aK_x + \cos aK_z)]$

superfície quando consideramos valores de RJ abaixo de um valor crítico. Na figura 18, mostramos ainda a situação na qual $\epsilon_s = 0.30$, $\epsilon_v = 0.50$ e $RJ = 0.56$, portanto, abaixo do valor crítico ($RJ_c = 0.92$). Neste caso, obtemos somente dois ramos acústicos, ou seja, abaixo do espectro de volume. Portanto, quando o espectro de energia renormalizado das ondas de spin do volume vai a zero, esses ramos acústicos de superfície também desaparecem, ou seja, a superfície também se desordena juntamente com o volume. Portanto, quando RJ passa pelo seu valor crítico, começam a surgir ramos óticos, o que indica um ordenamento de longo alcance da superfície. O comportamento geral do espectro de energia para outras combinações dos parâmetros ϵ_v e ϵ_s é qualitativamente semelhante ao exibido nas figuras 16, 17 e 18.

Para finalizar nossa discussão acerca dos espectros de energia, representamos nas figuras 19 e 20 o comportamento dos modos $\vec{k}_{||} = 0$ e $\vec{k}_{||} = (\pi/a, 0, \pi/a)$ em função da temperatura para $\epsilon_v = 0.50$ e $\epsilon_s = 0.30$ e $RJ = 1.96$. Em ambas as figuras a curva A representa o limite superior do modo correspondente do volume, que se extingue na temperatura crítica de volume. Podemos ainda observar que os modos óticos sobrevivem na temperatura crítica de volume, só se extinguindo numa temperatura bem acima daquela do volume. A temperatura na qual esses modos óticos se extinguem é a chamada temperatura crítica de superfície, onde a ordem magnética de longo alcance desaparece também para os planos próximos à superfície. É fácil verificar que, na temperatura crítica de volume, também a derivada da energia do modo em relação à temperatura é descontínua, fato este semelhante ao já comentado anteriormente para as curvas de magnetização, sendo devido ao

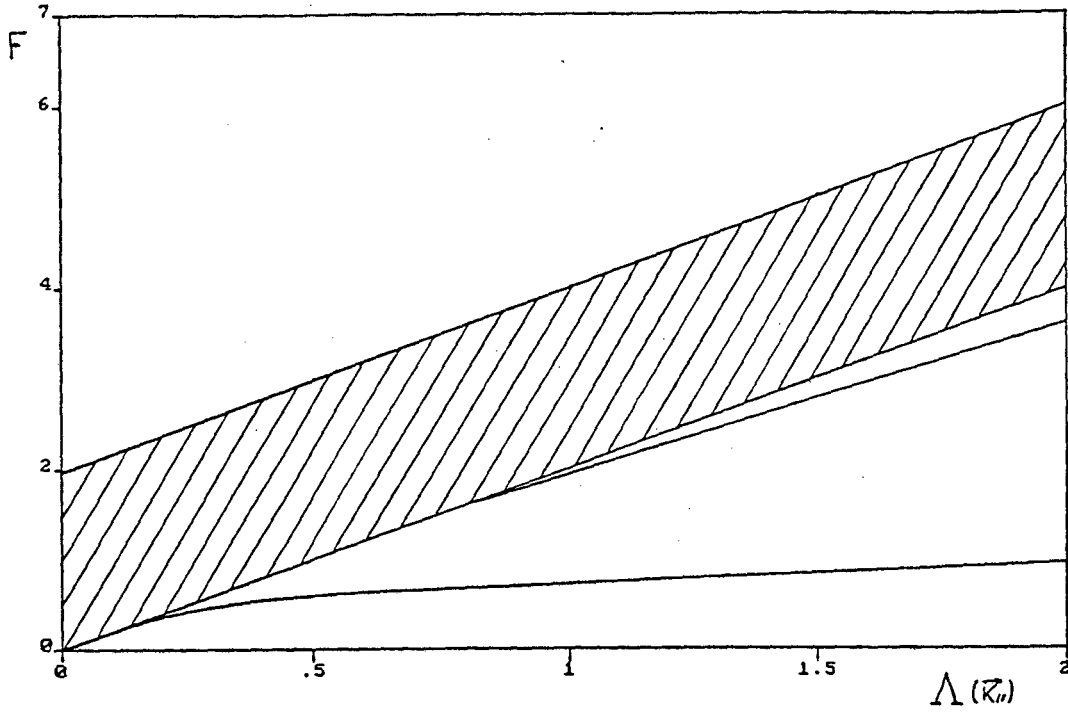


FIGURA 18 - Energia normalizada das ondas de spin (F) em função do parâmetro $\Lambda(\vec{k}_{||})$ para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$; $RJ=0.56$
 $\tau = 0.0837$; $\tau_C^v = 0.0839$; $F=E_{\vec{k}_{||}} / \langle S_V^2 \rangle$; $J_L=1$
 $\Lambda(\vec{k}_{||}) = [1 - \frac{1}{2} (\cos \alpha K_x + \cos \alpha K_z)]$

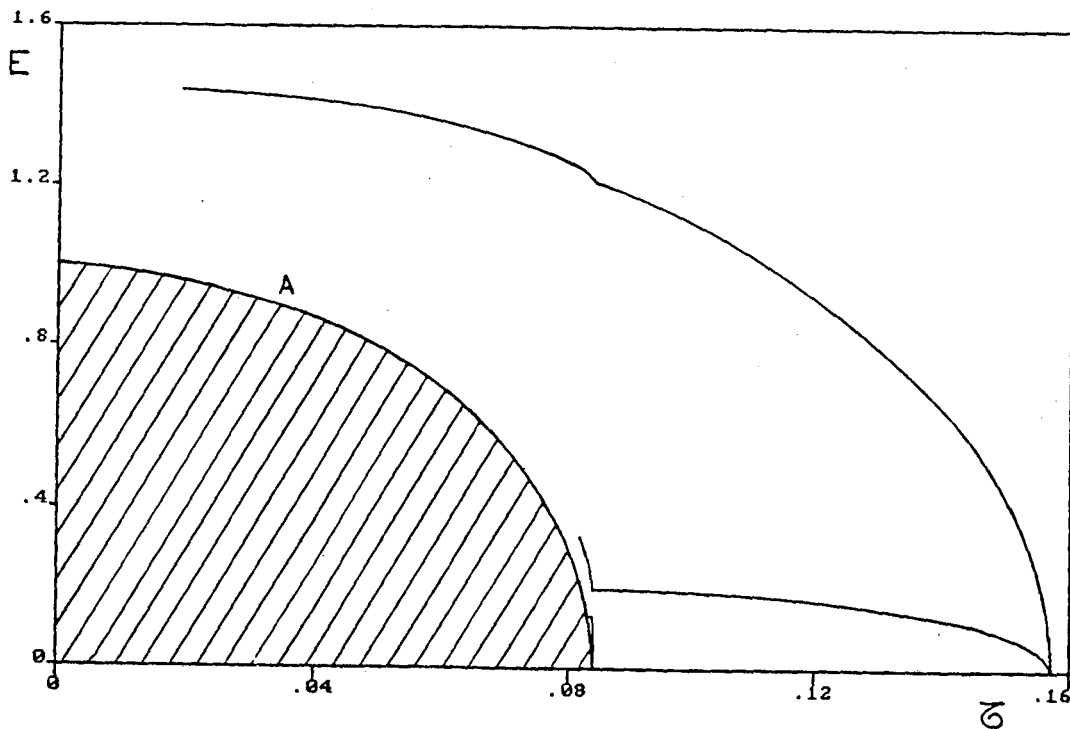


FIGURA 19 - Energia das ondas de spin ($E_{\vec{k}_{||}}$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$
 $RJ=1.96$; $\vec{k}_{||}(0,0,0)$; $J_L=1$
 CURVA A - limite superior do modo de volume

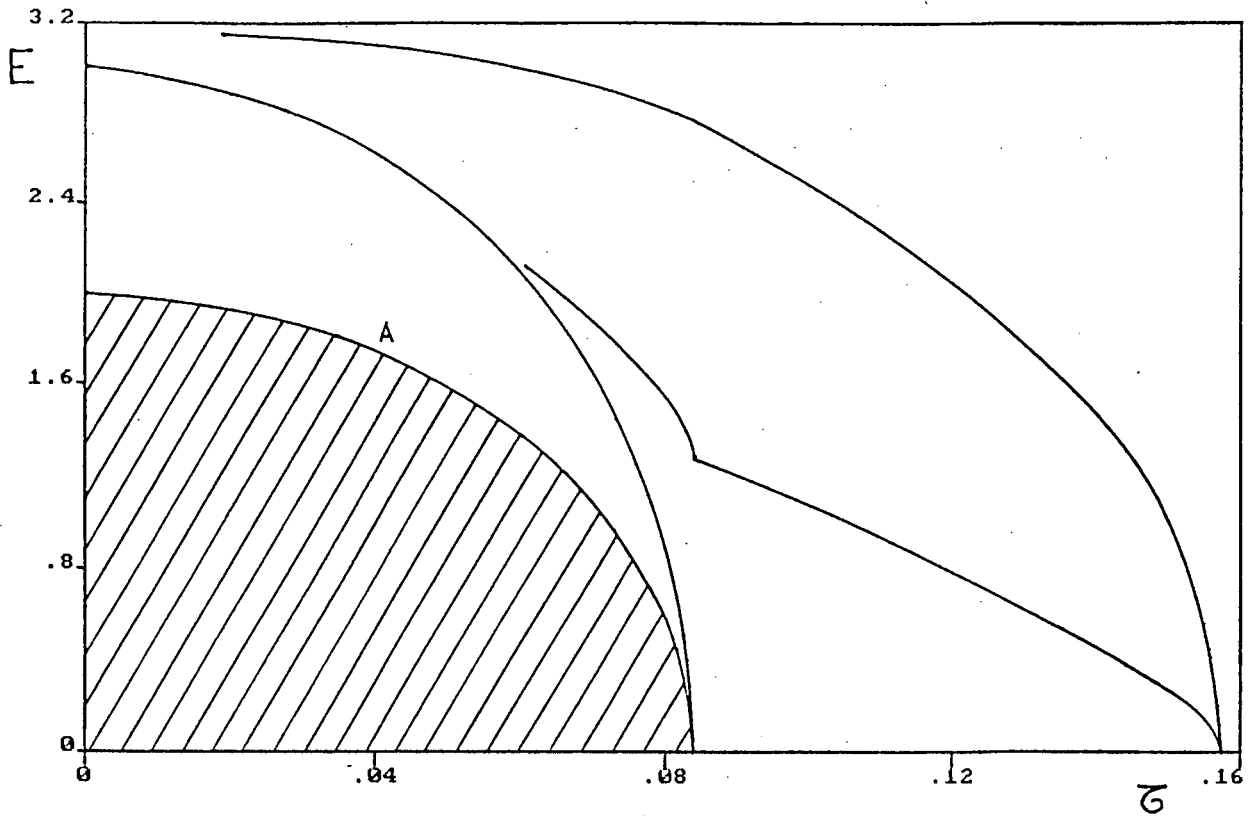


FIGURA 20 - Energia das ondas de spin ($E_{k_{z}}$) em função da temperatura reduzida (τ) para $\epsilon_s=0.30$; $\epsilon_v=0.50$
 $RJ=1.96$; $k_{z}(\pi/a, 0, \pi/a)$; $J_1=1$
 CURVA A - limite superior do modo de volume

número reduzido de planos considerados para representar a superfície. Finalmente também notamos que alguns ramos aparecem somente próximos à temperatura crítica de volume. Para temperaturas menores esses ramos não são bem localizados próximo à superfície do cristal, e se confundem com os modos de volume.

CAPITULO 5

CONCLUSÕES

Neste trabalho aplicamos o formalismo das Funções de Green para estudar as propriedades termodinâmicas de cristais ferromagnéticos semi-infinitos. Em nossos cálculos, utilizamos a aproximação RPA para desacoplar as equações de movimento e supomos que a partir do terceiro plano a magnetização do cristal é igual àquela de um sistema com simetria translacional total.

Consideramos um modelo de Heisenberg anisotrópico em nossos cálculos. Através de uma escolha adequada dos parâmetros de anisotropia, pudemos estudar os diferentes possíveis ordenamentos da superfície e do volume. Em particular, discutimos detalhadamente a situação na qual tanto o volume quanto a superfície eram descritos por modelos de Heisenberg isotrópicos. Na outra situação extrema, volume e superfície descritos por modelos de Ising, tomamos o limite "quase Ising", de tal forma que o formalismo das Funções de Green tivesse ainda validade.

Para se estudar as propriedades de superfície se faz necessário determinar inicialmente o comportamento da magnetização do sistema infinito em função da temperatura e do parâmetro de anisotropia de intercâmbio. A determinação do espectro de energia do volume, ou seja, a relação de dispersão para as ondas de spin que se propagam por todo o sistema, também é um ingrediente necessário para se estudar as excitações magnéticas de superfície. Esse estudo foi realizado no capítulo 2 deste trabalho.

Mostramos que as curvas de magnetização da superfície em

função da temperatura, apresentam um comportamento singular na temperatura crítica de volume. A derivada da magnetização não é contínua nessa temperatura. Acreditamos que esse comportamento seja devido ao número reduzido de planos que tomamos para representar a superfície. O cálculo da magnetização no esquema do Grupo de Renormalização⁽¹¹⁾ também apresenta descontinuidade na derivada nesta temperatura. Entretanto, Morán-López e Sanchez⁽⁵⁾ mostraram que, na aproximação de campo médio, essa descontinuidade desaparece à medida em que se aumenta o número de planos considerados. Experimentalmente os resultados obtidos por Rau e Robert⁽²⁰⁾ no Gadolínio não evidenciam tal descontinuidade.

Obtivemos um diagrama do acoplamento crítico de superfície em função dos parâmetros de anisotropia do volume e da superfície. Mostramos que os resultados obtidos com a técnica das Funções de Green são qualitativamente semelhantes àqueles obtidos com o Grupo de Renormalização no espaço real⁽¹⁰⁾. Por exemplo, o acoplamento crítico para o modelo de "Ising" ($\epsilon_s = \epsilon_v = 0.01$) é 1.37, enquanto que com o Grupo de Renormalização⁽¹⁰⁾ obtem-se 1.74. Lembremos que o resultado obtido através do método de expansões em séries de altas temperaturas é 1.6; o resultado obtido com o método de Monte Carlo é 1.5. Portanto, o nosso resultado se encontra acima do valor de campo médio (1.25) e abaixo dos melhores valores conhecidos na literatura. Mostramos ainda que no limite no qual a superfície e o volume são ambos descritos por modelos de Heisenberg, o acoplamento crítico de superfície parece crescer indefinidamente, ou seja, não obtemos um ordenamento de superfície. Essa conclusão pôde ser obtida através de uma análise detalhada das somas que ocorrem na primeira zona de Brillouin de uma rede

quadrada. Lembramos que os resultados ficam muito diferentes caso empreguemos o método dos pontos especiais^(12,28). Mostramos ainda que se o acoplamento entre a superfície e o volume vai diminuindo, a superfície tende a se comportar como um modelo bidimensional, e no caso particular no qual ela é descrita por um modelo de Heisenberg, a sua temperatura crítica vai tendendo a zero, o que está de acordo com o teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾, cuja extensão para sistemas semi-infinitos apresentamos no apêndice.

Obtivemos também resultados para o espectro de excitação das ondas de spin localizadas próximo à superfície cristalina. Verificamos que se o acoplamento de superfície estiver abaixo do valor crítico correspondente, aparecem ramos "acústicos", cujas energias estão abaixo do espectro de volume. Portanto, na temperatura crítica de volume, os respectivos espectros de superfície e volume se anulam simultaneamente, não havendo assim ordenamento de superfície. Por outro lado, para acoplamentos de superfície acima do acoplamento crítico, o espectro apresenta essencialmente ramos "óticos", que não desaparecem na temperatura crítica de volume. Concluimos que a análise dos espectros em função do acoplamento (mudança de ramo acústico para ótico), pode nos dar informações acerca do ordenamento de superfície acima do volume.

Como perspectiva de trabalhos futuros, empregando a técnica das Funções de Green, no estudo das excitações magnéticas em superfícies podemos citar os seguintes:

a) Utilizar uma aproximação para desacoplar as equações de movimento que leve em conta efeitos de correlação transversal, que são desprezados na aproximação RPA. Por exemplo, poderíamos tentar o desacoplamento de Callen⁽³⁵⁾, o que tornaria certamente os

cálculos mais complexos, porém obteríamos correções à aproximação RPA. Dentro dessa perspectiva, poderíamos considerar também um número de planos diferenciados do volume, maior do que dois. Poderíamos com isso, verificar se a derivada da magnetização com relação à temperatura tornar-se-ia contínua na temperatura crítica de volume. Claramente, isso exigiria um grande esforço computacional para ser implementado.

b) Realizar expansões em ondas de spin, na região de baixas temperaturas, para verificar qual é a dependência da magnetização de superfície com a temperatura. Poderíamos calcular também outras propriedades termodinâmicas relevantes como por exemplo, a susceptibilidade magnética, o calor específico, etc.

c) Investigar o efeito do campo magnético externo nas propriedades do cristal ferromagnético semi-infinito. Nesse aspecto, poderemos verificar como se processam as transições de fase induzidas pelo campo em sistemas antiferromagnéticos semi-infinitos. Neste caso, é interessante verificar, por exemplo, se a transição de fase Paramagnética-Spin Flop, tem início pelos planos da superfície.

d) Analisar o efeito de outras anisotropias sobre o modelo considerado: anisotropias dipolares, anisotropias ortorrômbicas e uniaxiais de íon único, etc. Seria também interessante realizar cálculos de Função de Green, para outras estruturas cristalinas, como por exemplo a rede cúbica de face centrada que apresenta um maior interesse experimental.

e) Estudar, por exemplo, o efeito da diluição na superfície de sistemas ferromagnéticos semi-infinitos. Em particular o efeito de campos aleatórios na superfície de sistemas semi-infinitos pode nos dar informação sobre a possível existência de pontos tricríticos

APÊNDICE

O teorema de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾ é provado rigorosamente para um modelo de Heisenberg isotrópico em uma e em duas dimensões. É mostrado que não pode ocorrer magnetização espontânea em um modelo de Heisenberg isotrópico em uma ou em duas dimensões, à temperatura T , com interação de intercâmbio finita. Enquanto cálculos de campo médio⁽³⁶⁾ sugerem um estado de ordem na superfície a temperaturas superiores à temperatura crítica de volume, simulações de Monte Carlo⁽⁶⁾ em sistemas de Heisenberg clássicos parecem indicar a não existência de magnetização espontânea na superfície. Cálculos recentes de grupo de renormalização⁽¹⁰⁾ para modelos de Heisenberg ferromagnéticos isotrópicos em redes semi-infinitas também concluem pela não existência de magnetização espontânea a temperaturas acima da temperatura crítica de volume. Argumenta-se que este resultado está em acordo com o teorema de Mermin e Wagner. Acreditamos, entretanto, que este argumento não seja consistente visto que o sistema não é estritamente bidimensional.

É apresentada a seguir a determinação de um limite superior para a magnetização de superfície de um modelo de Heisenberg isotrópico em uma rede semi-infinita que não desaparece para valores muito pequenos de campos magnéticos. Esta análise segue essencialmente os mesmos passos que foram dados por Mermin e Wagner em sua prova.

Considera-se a seguinte Hamiltoniana em uma rede cúbica semi-infinita:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} J(\vec{R} - \vec{R}') S_{\vec{R}} \cdot S_{\vec{R}'} - h \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z \quad (1)$$

$J > 0$ é a interação ferromagnética de intercâmbio entre spins situados nos sítios \vec{R} e \vec{R}' e h é um pequeno campo magnético paralelo à superfície do cristal. Devido ao nosso sistema apresentar simetria bidimensional, introduzimos as seguintes transformadas de Fourier:

$$S_{\vec{R}} = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_{||}} e^{i \vec{k}_{||} \cdot \vec{R}_{||}} S_{\vec{R}}(\vec{k}_{||}) \quad , \quad (2)$$

$$J(\vec{R}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_{||}} e^{i \vec{k}_{||} \cdot \vec{R}_{||}} J_{\vec{R}}(\vec{k}_{||}) \quad , \quad (3)$$

onde N_s é o número de pontos da rede situados em um plano paralelo à superfície, $\vec{k}_{||}$ são os vetores de onda da primeira zona de Brillouin bidimensional, $\vec{R} = (\vec{R}_{||}, R)$, onde $\vec{R}_{||}$ são vetores situados sobre planos paralelos à superfície e R é um índice de plano, sendo que $R=0$ localiza a superfície. Temos portanto que:

$$\mathcal{H} = - \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{\vec{k}_{||}} J_{\vec{R}-\vec{R}'}(\vec{k}_{||}) S_{\vec{R}}(\vec{k}_{||}) \cdot S_{\vec{R}'}(-\vec{k}_{||}) - h \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z \quad (4)$$

tendo sido consideradas as seguintes regras de comutação:

$$[S_{\vec{R}}^+(\vec{k}_{||}), S_{\vec{R}'}^-(\vec{k}'_{||})] = 2 S_{\vec{R}}^z(\vec{k}_{||} + \vec{k}'_{||}) \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \quad , \quad (5)$$

$$[S_{\vec{R}}^+(\vec{k}_{||}), S_{\vec{R}'}^z(\vec{k}'_{||})] = - S_{\vec{R}}^+(\vec{k}_{||} + \vec{k}'_{||}) \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \quad , \quad (6)$$

$$[S_{\vec{R}}^-(\vec{k}_{||}), S_{\vec{R}'}^z(\vec{k}'_{||})] = S_{\vec{R}}^-(\vec{k}_{||} + \vec{k}'_{||}) \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \quad . \quad (7)$$

Aplicando agora a desigualdade de Bogoliubov⁽³⁷⁾

$$\frac{1}{2} \langle \{A, A^+\} \rangle \langle [[C, \mathcal{H}], C^+] \rangle \geq k_B T |\langle [C, A] \rangle|^2, \quad (8)$$

onde \mathcal{H} é a Hamiltoniana e $\langle \mathcal{X} \rangle = \text{Tr} (\mathcal{X} e^{-\beta \mathcal{H}} / \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}})$, com $\beta = 1/k_B T$. Se tomarmos $C = S_R^+(\vec{k}_R)$ e $A = S_R^(-(\vec{k}_R))$, teremos:

$$\frac{1}{2} \langle \{ S_R^+(\vec{k}_R), S_R^(-(\vec{k}_R)) \} \rangle \geq k_B T N_S^2 \langle S_R^z \rangle^2 \frac{1}{W}, \quad (9)$$

onde

$$W = \frac{1}{N_S} \sum_{\vec{k}_R} \left\{ \sum_{R'} J_{R-R'}(k_R) [\langle S_R^z(-\vec{k}_R) S_{R'}^z(\vec{k}_R) + \right.$$

$$\left. \frac{1}{4} (S_{R'}^+(\vec{k}_R) S_R^z(\vec{k}_R) + S_R^(-(\vec{k}_R)) S_{R'}^+(\vec{k}_R)) \rangle] - J_0(\vec{k}_R - \vec{k}_R)_x \right.$$

$$\left. \times [\langle S_R^z(-\vec{k}_R) S_R^z(\vec{k}_R) + \frac{1}{4} \{ S_R^+(\vec{k}_R), S_R^(-(\vec{k}_R)) \} \rangle] + \frac{\hbar}{2} N_S \langle S_R^z \rangle \right\}$$

e

$$\langle S_R^z(0) \rangle = \langle \sum_{\vec{k}_R} S^z(\vec{k}_R) \rangle = N_S \langle S_R^z \rangle. \quad (10)$$

Se fizermos $R=R'$ nossa expressão se reduzirá à de Mermin e Wagner⁽²⁵⁾ para um modelo estritamente bidimensional. Entretanto, se considerarmos as equações (9) e (10) para o plano da superfície ($R=0$), poderemos escrever:

$$\frac{1}{2} \langle \{ S_0^+(\vec{k}_R), S_0^(-(\vec{k}_R)) \} \rangle \geq k_B T N_S^2 \langle S_0^z \rangle^2 \frac{1}{W}, \quad (11)$$

onde

$$\begin{aligned}
W = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_i} \left\{ [J_0(\vec{K}_i) - J_0(\vec{K}_i - \vec{K}_i)] \cdot [\langle S_0^z(-\vec{K}_i) S_0^z(\vec{K}_i) + \right. \\
+ \frac{1}{4} \{ S_0^+(\vec{K}_i), S_0^(-\vec{K}_i) \} \rangle] + \frac{h N_s}{2} \langle S_0^z \rangle + \sum_{R \neq 0} J_R(\vec{K}_i) [\langle S_0^z(-\vec{K}_i) S_R^z(\vec{K}_i) + \\
+ \frac{1}{4} (S_R^+(-\vec{K}_i) S_0^-(\vec{K}_i) + S_0^(-\vec{K}_i) S_R^+(\vec{K}_i)) \rangle] \left. \right\}, \quad (12)
\end{aligned}$$

onde $J(\vec{K}_i)$ é a transformada de Fourier da interação de intercâmbio entre spins do primeiro plano ($R=0$) e dos outros planos. $J_0(\vec{K}_i)$ dá a interação de intercâmbio entre spins do mesmo plano.

É fácil ver que W é sempre positivo e, conseqüentemente, podemos escrever que:

$$\begin{aligned}
W \leq \frac{1}{N_s} \left| \sum_{\vec{R}_i} J_0(\vec{R}_i) (1 - e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i}) \sum_{\vec{K}_i} e^{-i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i} [\langle S_0^z(-\vec{K}_i) S_0^z(\vec{K}_i) + \right. \\
+ \frac{1}{4} \{ S_0^+(\vec{K}_i), S_0^(-\vec{K}_i) \} \rangle] \left. \right| + \frac{h N_s}{2} \langle S_0^z \rangle + \left| \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{K}_i} \sum_{\vec{R}(R \neq 0)} e^{-i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i} \right. \\
\left. \times J(\vec{R}) [\langle S_0^z(-\vec{K}_i) S_R^z(\vec{K}_i) + \frac{1}{4} (S_R^+(-\vec{K}_i) S_0^-(\vec{K}_i) + S_0^(-\vec{K}_i) S_R^+(\vec{K}_i)) \rangle] \right|. \quad (13)
\end{aligned}$$

Se observarmos que:

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{K}_i} \langle S_0(\vec{K}_i) S_0(-\vec{K}_i) + S_0^z(\vec{K}_i) S_0^z(-\vec{K}_i) \rangle = \frac{1}{2} N_s^2 [S(S+1) + \langle S_0^z \rangle^2], \quad (14)$$

e que

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{K}_i} \langle S_0^z(-\vec{K}_i) S_R^z(\vec{K}_i) + \frac{1}{4} (S_R^+(-\vec{K}_i) S_0^-(\vec{K}_i) + S_0^(-\vec{K}_i) S_R^+(\vec{K}_i)) \rangle = \\
= \frac{N_s}{2} \sum_{\vec{R}_i} \langle S_{0,\vec{R}_i} S_{R,\vec{R}_i} + S_{0,\vec{R}_i}^z S_{R,\vec{R}_i}^z \rangle; \quad (15)
\end{aligned}$$

Poderemos então escrever que:

$$\begin{aligned}
 W &\leq \frac{1}{N_s} \left| \sum_{\vec{R}_n} J_0(\vec{R}_n) (1 - e^{i\vec{K}_n \cdot \vec{R}_n}) N_s^2 S(S+1) \right| + \frac{N_s h}{2} \langle \mathcal{S}_0^z \rangle + \\
 &+ \left| \sum_{\vec{R} (R \neq 0)} J(\vec{R}) \frac{1}{2} \left(\sum_{\vec{R}_n} \langle \mathcal{S}_{0\vec{R}_n} \mathcal{S}_{\vec{R}\vec{R}_n} + \mathcal{S}_{0\vec{R}_n}^z \mathcal{S}_{\vec{R}\vec{R}_n}^z \rangle \right) \right| \leq \\
 &\leq N_s \left| \sum_{\vec{R}_n} J_0(\vec{R}_n) (1 - \cos \vec{K}_n \cdot \vec{R}_n) S(S+1) \right| + \\
 &+ \frac{N_s h}{2} \langle \mathcal{S}_0^z \rangle + N_s \left| \sum_{\vec{R} (R \neq 0)} J(\vec{R}) S^2 \right| \quad (16)
 \end{aligned}$$

e, finalmente, obtem-se:

$$\begin{aligned}
 W &\leq N_s \sum_{\vec{R}_n} \frac{J_0(\vec{R}_n)}{2} \vec{R}_n^2 \vec{K}_n^2 S(S+1) + \frac{N_s h}{2} \langle \mathcal{S}_0^z \rangle + \\
 &+ N_s \sum_{\vec{R} (R \neq 0)} J(\vec{R}) S^2 \quad ; \quad (17)
 \end{aligned}$$

Se substituirmos W na equação (11) por este limite superior e efetuarmos a soma em \vec{K}_n , obtemos:

$$S(S+1) \geq K_B T \langle \mathcal{S}_0^z \rangle^2 \sum_{\vec{K}_n} W^{-1} \quad (18)$$

Transformando a soma em \vec{K}_n em uma integral no interior da primeira zona de Brillouin da superfície da rede, obtemos:

$$\begin{aligned}
 S(S+1) &\geq \frac{2 K_B T \langle \mathcal{S}_0^z \rangle^2}{\rho (2\pi)^2} \int \left[S(S+1) \sum_{\vec{R}_n} J_0(\vec{R}_n) \vec{K}_n^2 \vec{R}_n^2 + \right. \\
 &+ h \langle \mathcal{S}_0^z \rangle + 2 \sum_{\vec{R} (R \neq 0)} J(\vec{R}) S^2 \left. \right]^{-1} d^2 \vec{K}_n \quad , \quad (19)
 \end{aligned}$$

onde ρ^{-1} é o volume por spin. A última desigualdade é reforçada se integrarmos apenas sobre uma esfera de raio K_0 , onde K_0 é a distancia da origem ao plano de Bragg mais próximo no espaço \vec{K} , isto é:

$$\langle S_0^z \rangle^2 \leq \frac{2\pi\rho S(S+1)}{K_0^2} \cdot \frac{\mathcal{E}}{k_B T} \cdot \frac{1}{\ln \left[1 + \frac{\mathcal{E}}{2 \sum_{\vec{R}(\neq 0)} J(\vec{R}) S^2 + h \langle S_0^z \rangle} \right]} \quad (20)$$

onde definimos

$$\mathcal{E} = S(S+1) \sum_{\vec{R}''} K_0^2 \vec{R}''^2 J_0(\vec{R}'') \quad (21)$$

Claramente, se fizermos $J(\vec{R})=0$, isto é, se desprezarmos as interações de intercâmbio entre os spins da superfície com os spins dos demais planos obtemos o célebre resultado de Mermin e Wagner. Por outro lado, se as interações de intercâmbio entre os spins do plano da superfície com os spins dos demais planos não desaparece, no limite quando $h \rightarrow 0$, obtemos o seguinte limite superior para a magnetização de superfície:

$$\langle S_0^z \rangle^2 \leq \frac{2\pi\rho S(S+1)}{K_0^2} \cdot \frac{\mathcal{E}}{k_B T} \cdot \frac{1}{\ln \left[1 + \frac{\mathcal{E}}{2 \sum_{\vec{R}(\neq 0)} J(\vec{R}) S^2} \right]} \quad (22)$$

Portanto, este último resultado assegura a existência de um limite superior para a magnetização de superfície quando se leva em conta a interação de intercâmbio entre os planos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

01. D.L.MILLS , Physical Review B 3 , 3887 (1971)
02. D.L.MILLS , Physical Review B 8 , 4424 (1973)
03. R.PANDIT e M.WORTIS , Physical Review B 25 , 3226 (1982)
04. F.A.GRANJA e J.L.MORÁN-LÓPEZ , Physical Review B 31 , 7146 (1985)
05. J.L.MORAN-LÓPEZ e J.M.SANCHEZ , Physical Review B 39 , 9746 (1989)
06. K.BINDER e P.C.HOHENBERG , Physical Review B 9 , 2194 (1974)
07. K.BINDER e D.P.LANDAU , Physical Review Letters 52 , 318 (1984)
08. T.W.BURKHARDT e E.EISENRIEGLER , Physical Review B 16 , 3213 (1977)
09. S.DIETRICH e E.EISENRIEGLER . Physical Review B 27 , 2937 (1983)
10. A.M.MARIZ, U.M.S.COSTA e C.TSALLIS , Europhysics Letters 3 , 27 (1987)
11. C.TSALLIS e A.CHAME , Journal de Physique (Paris) Colloq. 49 , ICM 88-part III, C8-1619 (1988)
12. S.SELZER e N.MAJLIS , Physical Review B 26 , 404 (1982)
13. S.SELZER e N.MAJLIS , Physical Review B 27 , 544 (1983)
14. C.A.QUEIROZ e W.FIGUEIREDO , Physical Review B 36 , 5544 (1987)
15. C.A.QUEIROZ e W.FIGUEIREDO , Physical Review B 40 , 4967 (1989)

16. R.J.CELOTTA, D.T.PIERCE, G.C.WANG, S.D.BADER e G.P.FELCHER ,
Physical Review Letters 43 , 728 (1979)
17. C.RAU e S.EICHNER , Physical Review Letters 47 , 939 (1981)
18. S.F.ALVARADO, M.CAMPAGNA e H.HOPSTER , Physical Review Letters
48 , 51 (1982)
19. D.WELLER, S.F:ALVARADO, W.GUDOT, K.SCHRODER e M.CAMPAGNA ,
Physical Review Letters 54 , 1555 (1985)
20. C.RAW, e M.ROBERT , Physical Review Letters 58 , 2714 (1987)
21. W.DURR, M.TABORELLI, O.PAUL, R.GERMAR, W.GUDAT, D.PESCIA e
M.LANDOLT , Physical Review Letters 62 , 206 (1989)
22. N.MAJLIS , "Theoretical Models of Surface Magnetism and their
comparison with recent experiments" in V Latin - American
Symposium of Surface Physics and Small Particles , World
Scientific, Eds. M.Cardona e J.Giraldo , 1988.
23. R.J.CELOTTA e D.T.PIERCE , Science 234 , 249 (1986)
24. K.BINDER , "Critical Behavior at Surfaces in Phase Transitions
and Critical Phenomena" , Eds. C.Domb e J.L.Lebowitz ,
vol.8 , Academic Press , 1983
25. N.D.MERMIN e H.WAGNER , Physical Review Letters 17 , 1133
(1966)
26. D.N.ZUBAREV , Soviet Physics Uspekhi 3 , 320 (1960)
27. A.BALDERESCHI , Physical Review B 7 , 5212 (1973)
28. S.B.L.CUNNINGHAM , Physical Review B 10 , 4988 (1974)
29. S.M.REZENDE , V Brazilian Symposium in Theoretical Physics ,
Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora, 1980
30. H.S.WALL , "Analitic Theory of Continued Fractions" , D.Van
Nostrand , 1984

31. S.SELZER , "Magnetismo de Superfícies" - Tese de Doutorado ,
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 1981
32. C.A.QUEIROZ , "Modelo de Heisenberg com Anisotropia Uniaxial de
Ion Único num Cristal Semi-Infinito" , Dissertação de
Mestrado , UFSC, Florianópolis , 1985
33. H.A.CECCATTO , Journal Physics A, Math. Gen. 19 , 751 (1986)
34. J.A.PLASCAK , Journal Physics A, Math. Gen. 17 , L919 (1984) ,
35. H.B.CALLEN , Physical Review 130 , 890 (1963)
36. R.A.WEINER , Physical Review Letters 31 , 1588 (1973)
37. H.WAGNER , Z. Physik 195 , 273 (1966)