

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

*Impurezas magnéticas em ferromagnetos
de Ising com campo transversal*

Raimundo Valmir Leite Filho

Tese de Doutorado

Fortaleza

20 de Abril de 2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Raimundo Valmir Leite Filho

*Impurezas magnéticas em ferromagnetos
de Ising com campo transversal*

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

Fortaleza
20 de Abril de 2005

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- L555i Leite Filho, Raimundo Valmir.
Impurezas magnéticas em ferromagnetos de Ising com campo transversal / Raimundo Valmir Leite Filho. – 2005.
109 f. : il.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2005.
Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.
1. Funções de Green . 2. Modelo de Ising. 3. Ferromagneto. I. Título.

CDD 530

Raimundo Valmir Leite Filho

*Impurezas magnéticas em ferromagnetos
de Ising com campo transversal*

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho
Prof. Orientador
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Uriel Medeiros de Souza Costa
Fundação Universidade Estadual de Alagoas

Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque
Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Aprovada em 20 de Abril de 2005.

Ao Lucas

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela orientação.

Ao Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior, pela grande colaboração.

Aos Profs. Dr. Josué Mendes Filho e Dr. José Soares Andrade Júnior, pelo empenho em prol deste departamento.

Ao Prof. Raimundo Parente de Albuquerque, pelos primeiros princípios em matemática.

A Aurineide, minha mãe, e meus irmãos Gean, Rosa, Jorge e João Paulo.

Aos amigos Tayroni, Daniela, Luis Araripe e Neudson pela ajuda de valia inestimável.

Aos estudantes George, Ana e Roberto.

Aos amigos Márcio André, Alexandre Magno, Luiz Ozório e Ascânio Dias.

Aos funcionários do nosso Departamento, por seus préstimos.

Às agências financiadoras CNPq, CAPES e FUNCAP.

Resumo

O formalismo de funções de Green é usado para calcular o espectro de excitações associados a impurezas magnéticas implantadas em um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. Através do método da equação de movimento expressões explícitas para as funções de Green são determinadas para um ferromagneto sem impurezas. A função de Green para um filme ferromagnético contendo impurezas é obtida através da equação de Dyson. O espectro de ondas de spin relativo às impurezas é obtido para frequências abaixo do limite inferior da banda de volume para um material puro.

Com o objetivo de avaliar a influência da posição das impurezas no filme no espectro de excitações, consideramos três diferentes disposições geométricas para as impurezas: linha de impurezas perpendicular à superfície do filme, quatro impurezas em um plano paralelo às superfícies e quatro impurezas em um plano perpendicular às superfícies do filme. Obtemos resultados para a frequência dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre duas impurezas vizinhas, do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos e do parâmetro de campo efetivo nas impurezas.

Abstract

A Green function formalism is used to calculate the spectrum of excitations associated with magnetic impurities implanted in a ferromagnetic thin film described by the transverse Ising model. Using the equations of motion method, explicit expressions for the Green function are determined for a ferromagnetic without impurities. The Green's functions for a ferromagnetic film containing impurities are obtained through Dyson equation. We consider only the "defect" modes that appear below the bulk band of the pure material.

In order to assess the influence of the position of the impurities in the film on the excitations spectra, we consider three different geometrical arrangement for the impurities: impurities line perpendicular to the surface film, four impurities in a plane paralel to the surface, and four impurities in a plane perpendicular to the surfaces of the film. We obtain results for the frequencies localized modes as a function of the exchange parameter between two impurities neighborings, of the exchange parameter between the impurities and their neighborings, and the effective field parameter at the impurities.

*Procuram-se homens para jornada arriscada.
Baixa remuneração, frio cortante, longos meses
de completa escuridão, perigo constante, retorno
em segurança duvidoso. Honra e reconhecimento
em caso de sucesso.*

*– Anúncio de jornal de Ernest Shackleton,
convocando exploradores para a Antártica, 1900. –*

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 15
2	Funções de Green em matéria condensada	p. 19
2.1	Introdução	p. 19
2.2	A Representação de Schrödinger	p. 19
2.3	A Representação de Heisenberg	p. 20
2.4	O Ensemble Gran Canônico e a Média Térmica	p. 22
2.5	As Funções de Green	p. 23
2.5.1	Dependência temporal	p. 24
2.5.2	Equação de movimento	p. 25
2.5.3	Funções de correlação temporal	p. 26
2.5.4	Representação espectral e intensidade espectral	p. 26
2.5.5	Representação espectral para as funções de Green	p. 28
3	Impureza localizada num ferromagneto semi-infinito	p. 32
3.1	O modelo de Ising	p. 32
3.2	Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto puro	p. 34
3.2.1	Introdução ao modelo	p. 34
3.2.2	As funções de Green	p. 35
3.2.3	Representação matricial	p. 37
3.2.4	Modos de volume e de superfície	p. 38
3.3	Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto contendo uma impureza	p. 39
3.3.1	Introdução ao modelo	p. 39
3.3.2	Representação matricial	p. 41
3.3.3	Resultados numéricos para modos de impureza	p. 43
4	Impurezas acopladas num ferromagneto semi-infinito	p. 46
4.1	Introdução	p. 46

4.2	Modelo e formalismo de F.G.	p. 46
4.3	Resultados numéricos	p. 50
5	Impurezas acopladas em um filme ferromagnético	p. 59
5.1	Introdução	p. 59
5.2	Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto puro	p. 59
5.2.1	Introdução ao modelo	p. 59
5.2.2	Representação matricial	p. 61
5.3	Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto contendo impurezas	p. 64
5.4	Resultados numéricos	p. 67
5.4.1	Caso 1: linha de impurezas acopladas na direção do eixo z . . .	p. 68
5.4.2	Caso 2: quatro impurezas no plano xz	p. 78
5.4.3	Caso 3: quatro impurezas no plano xy	p. 84
6	Conclusões	p. 89
	Apêndice A – Equação de Dyson	p. 91
	Apêndice B – Método iterativo para inversão de matrizes	p. 93
	Apêndice C – Matriz inversa - meio semi-infinito	p. 97
	Apêndice D – Matriz inversa - meio finito	p. 100
	Apêndice E – Função de Green - meio semi-finito	p. 102
	Apêndice F – Green’s function for a magnetic impurity layer in a ferromagnetic Ising film with transverse field	p. 105
	Apêndice G – Localized magnetic excitations of coupled impurities in a transverse Ising ferromagnet	p. 106
	Referências	p. 107

Lista de Figuras

2.1	Contornos para os pólos da função de Green.	p. 28
3.1	Esquema mostrando um ferromagneto semi-infinito puro.	p. 34
3.2	Esquema mostrando um ferromagneto semi-infinito com uma impureza localizada.	p. 40
3.3	Impureza o e seus primeiros vizinhos em uma rede cúbica simples. . . .	p. 43
3.4	Frequência dos modos localizados versus energia de troca J'/J para diferentes valores do campo h'/h ; linha pontilhada $h' = 0.55h$, linha tracejada $h' = 0.65h$ e linha sólida $h' = 1.5h$. Impureza na terceira camada ($n = 3$).	p. 44
3.5	Frequência dos modos localizados versus campo aplicado h'/h para diferentes valores da energia de troca J'/J ; linha pontilhada $J' = 1.0J$, linha tracejada $J' = 2.0J$ e linha sólida $J' = 3.0J$. Impureza na terceira camada ($n = 3$).	p. 45
4.1	Representação do esquema de interação para duas impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.	p. 48
4.2	Representação do esquema de interação para duas impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro. Podem ser alinhadas ao longo do eixo x (a) ou do eixo z (b). . .	p. 51
4.3	Frequências das ondas de spin relativas às impurezas localizadas como uma função do parâmetro de troca J_o , para o caso X , com $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_{o'} = 1.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando as duas impurezas estão na superfície (linha sólida), e $J_{o'} = 2.5J$, $J_I = 0.25J$ quando ambas estão na segunda camada (linha tracejada) e na terceira camada (linha pontilhada).	p. 52

4.4	Frequências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca J_o da impureza o (localizada no sítio acima da impureza o'), caso Z , com $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_{o'} = 2.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando a impureza o está localizada na superfície (linhas sólidas), na segunda (linhas tracejadas) e terceira camada (linhas pontilhadas).	p. 53
4.5	Frequências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca $J_{o'}$ da impureza o' (localizada no sítio abaixo da impureza o), caso Z , com $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_o = 1.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando a impureza o' está localizada na segunda camada (linhas sólidas), e $J_o = 2.5J$, $J_I = 0.25J$ quando a mesma está na terceira camada (linhas tracejadas) e quarta camada (linhas pontilhadas). . . .	p. 54
4.6	Frequências localizadas das ondas de spin em função campo local h_o em uma das impurezas, caso X . Os parâmetros são os mesmos dos gráficos anteriores. Os resultados são obtidos para ambas as impurezas na superfície (linhas sólidas), segunda (linha tracejada) e terceira camada (linhas pontilhadas).	p. 55
4.7	Frequências localizadas das ondas de spin em função campo local h_o na impureza o (localizada no sítio acima da impureza o'), caso Z . Os parâmetros são os mesmos dos gráficos anteriores. Os resultados são obtidos para ambas as impurezas na superfície (linhas sólidas), segunda (linha tracejada) e terceira camada (linhas pontilhadas).	p. 56
4.8	Frequências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas acopladas. O gráfico mostra resultados para ambos os casos, X (linha sólida) com as duas impurezas o e o' na superfície e Z (linha tracejada) com a impureza o na superfície e o' no sítio abaixo.	p. 57
5.1	Esquema de interações para um filme ferromagnético puro. o campo transversal é aplicado na direção x	p. 60
5.2	Representação do esquema de interação para uma linha de impurezas vizinhas em um filme ferromagnético. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.	p. 65

5.3	Representação do esquema de interação para uma linha de impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transverso. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus vizinhos do material puro, se primeiros vizinhos.	p. 68
5.4	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 69
5.5	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 10 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 70
5.6	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_2 entre a impureza 2 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 71
5.7	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_3 entre a impureza 3 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 72
5.8	Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_1 aplicado sobre a impureza 1 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 73

5.9	Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_1 aplicado sobre a impureza 1 para o caso de em um filme ferromagnético com 10 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 74
5.10	Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_2 aplicado sobre a impureza 2 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h_o = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 75
5.11	Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_3 aplicado sobre a impureza 3 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 76
5.12	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre impurezas vizinhas em um filme ferromagnético com cinco camadas ($p = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas $h' = 0.65h$ e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos $J' = 2.5J$. Parâmetros no texto.	p. 77
5.13	Representação do esquema de interação para quatro impurezas vizinhas no plano xz de um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.	p. 78
5.14	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xz de um filme ferromagnético com 6 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 79

5.15	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de campo local h_1 aplicado sobre a impureza para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xz de um filme ferromagnético com 6 camadas. Os parâmetros de troca que envolvem as impurezas e seus vizinhos foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.	p. 80
5.16	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas, para o caso no as impurezas 1 e 2 estão na superfície de um filme de seis camadas. Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.	p. 81
5.17	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas, (a) impurezas 1 e 2 na superfície do filme (b) impurezas 1 e 2 na segunda camada do filme ($N - 1 = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.	p. 82
5.18	Representação do esquema de interação para quatro impurezas vizinhas no plano xy de um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas somente com seus primeiros vizinhos do material puro $J_I = 0$	p. 84
5.19	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xy de um filme ferromagnético com 5 camadas. Parâmetros no texto.	p. 85
5.20	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de campo local h_1 aplicado sobre a impureza para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xy de um filme ferromagnético com 5 camadas. Parâmetros no texto.	p. 86
5.21	Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas (a) quatro impurezas na superfície do filme (b) quatro impurezas na segunda camada do filme ($N - 1 = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.	p. 88

1 *Introdução*

A física do estado sólido é uma vasta área da física que trata da compreensão das propriedades mecânicas, térmicas, ópticas e magnéticas da matéria sólida. Uma descrição teórica dessas propriedades deve levar em consideração o grande número de átomos constituintes, da ordem de 10^{23} partículas por centímetro cúbico, o que exige a aplicação de técnicas apropriadas para descrever sistemas de muitos corpos. Porém, desenvolver um modelo teórico capaz de explicar todos os fenômenos que podem ocorrer em um sólido não constitui tarefa simples. Podemos apenas desenvolver modelos simplificados para cada área de interesse. Portanto, qualquer teoria básica do estado sólido deve desenvolver conceitos unificados onde se possa considerar todas as possíveis características individuais de um dado sólido.

Uma característica predominante nos sólidos é o arranjo regular de seus átomos, onde predomina a interação de um átomo com seus vizinhos. Particularmente, um sólido cristalino possui seus átomos arranjados numa configuração periódica denominada rede cristalina. As interações na rede cristalina podem ter um caráter de curto alcance e restrito a um volume limitado em torno do átomo. Interações de curto alcance podem enfraquecer com o aumento da distância, como no caso da interação de troca em materiais magnéticos. No entanto, na maioria dos sólidos também podem ocorrer interações de longo alcance, como as de dipolo-dipolo.

Na construção de modelos simplificados para sistemas de muitas partículas, deve-se considerar o conceito de excitações elementares, decorrentes das excitações de partículas individuais, as quasi-partículas, ou das correlações do movimento de partículas interagentes, denominados modos coletivos [1, 2, 3, 4]. Como exemplos temos: as vibrações coletivas dos íons na rede cristalina, cujos quanta associados são chamados de fônons; as oscilações coletivas dos elétrons de valência em metais, os plasmons. A interação entre as oscilações coletivas, conhecida como acoplamento, também pode gerar novas excitações elementares, como por exemplo: o acoplamento entre fótons e fônons, denominado polariton de fônons.

O estado fundamental de um cristal magneticamente ordenado, tal como um ferromagneto ou um antiferromagneto, pode ser excitado de tal maneira que a densidade local

de spin eletrônico efetua um movimento de precessão em torno da direção de equilíbrio da magnetização. Os modos normais dessa oscilação são chamados de ondas de spin, cujos quanta associados são chamados magnons. As ondas de spin foram descobertas por Bloch em 1930 [5]. O estudo da propagação de ondas de spin em sistemas ferromagnéticos a baixas temperaturas é importante sob vários aspectos, por exemplo, elas são responsáveis pelo termo $T^{3/2}$ na curva da magnetização em função da temperatura $M(T)$ [6, 7], elas contribuem na determinação do calor específico, da temperatura de Curie e de outras propriedades termodinâmicas dos sólidos.

Como vimos, sólidos são conhecidos como meios que permitem uma variedade de excitações elementares. Para modelar o comportamento dessas excitações, considera-se o meio no qual elas se propagam como um cristal perfeito que se estende infinitamente. Esta consideração em alguns casos, entretanto, não permite uma boa descrição do sistema. Um exemplo é dado quando se trata de um meio de baixa dimensão, tal como um filme fino, no qual a presença de superfícies tem influência no espectro de excitações. A introdução de camadas de impurezas, impurezas localizadas, ou mesmo uma baixa concentração delas, também modifica o espectro de excitações desse meio. Este diferente comportamento ocorre porque a presença de superfícies ou a introdução de impurezas pode modificar as interações microscópicas no material. Também a baixa dimensionalidade do meio, juntamente com a presença de impurezas, provoca uma quebra de simetria translacional no sistema, causando significativas modificações na propagação das excitações e permitindo o surgimento de excitações localizadas.

Por impurezas ou defeitos em sólidos cristalinos entende-se uma região onde o arranjo microscópico de íons difere drasticamente do cristal puro [8, 9]. Os defeitos em sólidos podem ser encontrados na forma de superfícies, linhas ou pontos. Os tipos de defeitos mais importantes encontrados em sólidos são:

Deslocamentos: linhas de defeitos que embora provavelmente ausentes num cristal ideal em equilíbrio térmico, são invariavelmente encontradas em um cristal real.

Vacâncias e interstícios: pontos de defeitos que apresentam ausência de íons ou presença extra de íons. Em cristais iônicos, tais defeitos são inteiramente responsáveis pela condutividade elétrica e podem alterar profundamente suas propriedades ópticas e, em particular, sua cor. Neste texto usaremos o termo substitucional em vez de interstício.

Os recentes avanços alcançados em técnicas litográficas, os quais permitem a construção de diferentes disposições de átomos nos mais diversos padrões em escala nanométrica, possibilitaram a fabricação de novos sistemas magnéticos que podem ter arranjos de buracos, defeitos ou impurezas. Guedes e colaboradores estudaram a formação de

domínios durante a reversão da magnetização devido a um conjunto de furos quadrados em um filme de Fe [10]. Eles estudaram também as modificações nas propriedades magnéticas devido a um conjunto de furos elípticos em um filme de Fe [11]. Em ambos os casos as medidas foram feitas usando efeito kerr magneto-óptico difratado. Uma área de pesquisas que vem se desenvolvendo rapidamente é a de semicondutores ferromagnéticos diluídos, onde um semicondutor puro é magneticamente dopado por um metal de transição para produzir um semicondutor ferromagnético [12, 13, 14, 15, 16]. Recentemente, foram obtidos avanços significativos na fabricação de dispositivos eletrônicos usados para armazenar dados ou para processar informações, ambos a base de semicondutores ferromagnéticos. Essa tecnologia, conhecida como spintrônica, utiliza simultaneamente os dois graus de liberdade, a carga e o spin dos portadores, para manipulação de dados [17, 18, 19].

Desde o início da década 1960, o efeito da introdução de impurezas em sólidos tem sido tratado em uma grande quantidade de trabalhos. Do ponto de vista teórico, a introdução de impurezas em cristais produz modos com frequências localizadas fora dos limites da banda de frequências de excitação para um cristal puro. Estes modos são chamados de modos localizados de impurezas. Izyumov demonstrou que a teoria para estes efeitos para diferentes tipos de excitações elementares é semelhante [20].

Em sistemas magnéticos os modos de impurezas podem ser detectados experimentalmente através de técnicas ópticas ou por espalhamento de nêutrons. As técnicas ópticas mais usadas no estudo de modos de defeitos são a espectroscopia de infravermelho, na qual a absorção de radiação por um cristal é medida em função desta frequência, e espalhamento Raman, na qual o espalhamento inelástico da radiação por uma amostra é observado. Uma revisão das propriedades de defeitos em sólidos magnéticos foi feita por Cowley e Buyers [21]. Recentemente, muitos trabalhos relativos ao estudo de impurezas em sistemas magnéticos foram publicados. Chen e Cottam usaram a técnica de Funções de Green (F.G.) para determinar os modos de defeitos para sistemas ferromagnéticos e antiferromagnéticos [22, 23] no modelo de Heisenberg para um sistema semi-infinito. Os modos de defeitos associados a uma impureza nas proximidades da superfície de um sistema ferromagnético descritos pelo modelo de Ising com campo transversal foram estudados por Costa Filho, Costa e Cottam [24], usando a técnica de F.G.. O caso para duas impurezas foi estudado por Leite, Milton Pereira e Costa Filho [25]. Um estudo das propriedades de sistemas magnéticos semi-infinitos contendo camadas totalmente impuras nos modelos de Heisenberg e Ising podem ser encontrado nas Refs. [26, 27, 28].

Neste trabalho estudamos o espectro de ondas de spin relativas a impurezas localizadas para os casos contendo impurezas acopladas em um sistema ferromagnético semi-infinito

(Capítulo 4), e em um filme ferromagnético (Capítulo 5), descritos pelo modelo de Ising com campo transversal. Em ambos os Capítulos usamos a técnica de F.G. para estudar a propagação de ondas de spin em regime de troca.

No Capítulo 2, fazemos uma apresentação da linguagem matemática apropriada para o desenvolvimento destes trabalhos. Introduzimos a teoria de F.G. em física da matéria condensada, um método matemático estabelecido por Zubarev [29], cuja aplicação é direcionada para a solução de problemas em sistemas ferromagnéticos.

No capítulo 3, fazemos uma rápida introdução ao modelo de Ising com campo transversal, cujo Hamiltoniano é adotado no presente estudo. Fazemos uma revisão dos trabalhos desenvolvidos por Shiwai e Cottam e por Costa Filho, Costa e Cottam onde eles empregaram o método da equação de movimento para a F.G. para calcular as propriedades dinâmicas de um sistema ferromagnético semi-infinito, puro [30] e com impurezas [31], respectivamente.

No Capítulo 4, aplicamos a técnica de F.G., fundamentada no Capítulo 3, para calcular o espectro de excitações para duas impurezas vizinhas implantadas num ferromagneto semi-infinito. Determinamos a equação de movimento para as F.G. onde o sistema é descrito através do modelo de Ising com campo transversal. Como consideramos apenas interações entre primeiros vizinhos, tomamos duas orientações fisicamente diferentes: duas impurezas alinhadas no eixo x , Caso X , e duas impurezas alinhadas no eixo z , Caso Z . Obtemos resultados para as frequências dos modos defeituosos como função do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos, do campo aplicado e do acoplamento de troca entre elas.

No Capítulo 5, estendemos a técnica aplicada no Capítulo 4 para calcular o espectro de ondas de spin relativas a impurezas localizadas para o caso contendo impurezas acopladas em um filme ferromagnético com n camadas paralelas ao plano xy . Obtemos resultados para três casos com diferentes disposições para as impurezas implantadas no material puro. Caso 1: linha contendo n impurezas acopladas na direção do eixo z , Caso 2: quatro impurezas no plano xz e Caso 3: quatro impurezas no plano xy .

Este trabalho se encerra no Capítulo 6, onde fazemos uma discussão geral dos resultados obtidos nos Capítulos 4 e 5 e apresentamos as conclusões e perspectivas para futuros trabalhos.

Nos Apêndices A, B, C, D e E mostramos algumas demonstrações matemáticas usadas em cálculos feitos nos capítulos deste trabalho. Nos Apêndices F e G, apresentamos a cópia de dois artigos publicados pelo autor relativos ao estudo de impurezas inseridas em ferromagnetos de Ising com campo transversal.

2 *Funções de Green em matéria condensada*

2.1 Introdução

Em Física do Estado Sólido, as Funções de Green são definições apropriadas do conceito de funções de correlação, funções dependentes do tempo e da temperatura, que são introduzidas convenientemente para a determinação de médias termodinâmicas de sistemas de muitos corpos e que conduzem a resultados corretos em diferentes limites. Na verdade, existem diversas classes de F.G., a diferença está na forma de se obter os valores médios. Assim, se a média é feita no estado fundamental, tem-se as F.G. da Teoria Quântica de Campos, se as F.G. são obtidas ao se tirar a média sobre um ensemble estatístico, teremos as F.G. da Mecânica Estatística ou Termodinâmica. Particularmente, ao estudarmos as propriedades termodinâmicas de um sistema magnético, precisamos calcular a média sobre o ensemble grã-canônico dos operadores de interesse. Portanto, antes de discorrermos sobre a técnica das F.G., estabeleceremos os conceitos deste ensemble e de média térmica, conceitos fundamentais em sistemas que envolvem muitos corpos.

2.2 A Representação de Schrödinger

Discutiremos nesta seção algumas representações adequadas aos nossos propósitos, pois queremos descrever convenientemente nossas equações de evolução para um determinado sistema físico de interesse. Iniciaremos com a representação de Schrödinger. Nesta representação a função de onda possui uma dependência temporal, denotada por $|\Psi_S(t)\rangle$, e os operadores são considerados independentes do tempo, de modo que a equação de movimento, considerando ($\hbar = 1$), é escrita como

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle = \mathcal{H}|\Psi_S(t)\rangle, \quad (2.1)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano.

A solução formal da Eq.(2.1), sendo o Hamiltoniano explicitamente independente do

tempo é a função denotada por

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t}|\Psi_S(0)\rangle, \quad (2.2)$$

que representa a evolução temporal da função de onda.

2.3 A Representação de Heisenberg

Nessa representação, os operadores possuem dependência temporal explícita e as funções de onda são denotadas por $|\Psi_H(t)\rangle$. Essa função de onda é agora representada como

$$|\Psi_H(t)\rangle = e^{i\mathcal{H}t}|\Psi_S(0)\rangle. \quad (2.3)$$

Tal definição leva-nos a concluir que

$$|\Psi_H(t)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle. \quad (2.4)$$

Um resultado fundamental é que o valor esperado de qualquer operador nas duas representações tem o mesmo valor, de modo que as representações são equivalentes e a escolha de uma ou outra, é mera conveniência. Sendo as funções de onda independentes do tempo, pode-se mostrar que a relação entre quaisquer operadores \hat{A}_H e \hat{A} é dada por

$$\hat{A}_H = e^{i\mathcal{H}t}\hat{A}e^{-i\mathcal{H}t}. \quad (2.5)$$

Da relação acima, deriva que a equação de movimento tem a forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H = i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}]. \quad (2.6)$$

Em Mecânica Estatística Clássica a evolução dinâmica de um sistema físico é descrita por suas variáveis cinemáticas no espaço de fase, de modo que a sua configuração instantânea para algum instante t é dada pela sua função distribuição $f = f(q, p, t)$ no espaço de fase Γ e isto corresponde a uma cópia completa do sistema. A este conjunto de pontos ou configurações do sistema denominamos ensemble. A equação de evolução dinâmica de um sistema físico é dada pela equação de Liouville

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, \mathcal{H}\} = 0, \quad (2.7)$$

onde $\{, \}$ são os parênteses de Poisson.

Em Mecânica Quântica a equação de Liouville expressa a evolução do operador es-

tatístico ou matriz densidade ρ ,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[\mathcal{H}, \rho]. \quad (2.8)$$

O valor médio ou macroscópico de uma grandeza A pode ser encontrado através da função f de forma clássica por

$$\langle A \rangle = \frac{\int f A d\Gamma}{\int f d\Gamma}, \quad (2.9)$$

onde

$$d\Gamma = dp_1 \cdots dp_n dq_1 \cdots dq_n. \quad (2.10)$$

Para um observável qualquer A podemos encontrar o seu valor médio, através da mecânica estatística quântica, usando a função de onda definida no espaço de Hilbert $\Psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ para o estado $|\psi\rangle$. Esse valor médio é dado por

$$\langle A \rangle = \frac{\overline{(\Psi, A\Psi)}}{\overline{(\Psi, \Psi)}} = \frac{\sum_{n,m} \overline{(c_n, c_m)} (\Phi_n, A\Phi_m)}{\sum_n \overline{(c_n, c_m)}}. \quad (2.11)$$

Quando o sistema isolado evolui no tempo, sua função de onda se modifica através da expressão

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \Phi_n(x), \quad (2.12)$$

sendo os números c_n as densidades de probabilidade e $|c_n|^2$ a probabilidade de se encontrar o sistema isolado na posição x . $\Phi_n(x)$ são as autofunções ortonormalizadas de um operador A . Podemos reescrever a média para um operador A fazendo-se as seguintes considerações de acordo com os postulados da Mecânica Estatística Quântica:

(i) Igualdade da probabilidade a priori

$$(c_n, c_m) = \begin{cases} 1, & \text{para } n = m, \quad E \leq E_n \leq E + \Delta E \\ 0, & \text{para } n \neq m. \end{cases} \quad (2.13)$$

(ii) Fases randômicas

$$\overline{(c_n, c_m)} = 0. \quad (2.14)$$

Os coeficientes $\overline{(c_n, c_m)}$ referem-se a um sistema macroscópico em equilíbrio termodinâmico que interage tão fracamente com o meio exterior que, sua energia E_n pode ser considerada aproximadamente constante, isto é, ela se encontra em um intervalo infinitesimal, entre E e $E + \Delta E$, sendo ($\Delta E \ll E$).

Assim as expressões para a função de onda e o valor médio, tornam-se

$$\Psi(x, t) = \sum_n b_n(t) \Phi_n(x), \quad (2.15)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n |b_n|^2 (\Phi_n, A \Phi_n)}{\sum_n |b_n|^2}. \quad (2.16)$$

Podemos ainda escrever a média termodinâmica em termos do operador matriz densidade ρ , definido por

$$\rho = \sum_i |\Phi_i\rangle |b_i|^2 \langle \Phi_i|; \quad (2.17)$$

lembrando que $\sum_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| = 1$ e cujos elementos de matriz são dados por

$$\rho_{i,j} = \langle \Phi_i | \rho | \Phi_j \rangle. \quad (2.18)$$

Portanto a média tomará a forma seguinte

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i (\Phi_i, A \rho \Phi_i)}{\sum_i (\Phi_i, \rho \Phi_i)} = \frac{Tr(A\rho)}{Tr(\rho)}. \quad (2.19)$$

2.4 O Ensemble Gran Canônico e a Média Térmica

Neste ensemble o operador número atua sobre um espaço de Hilbert com número indefinido de partículas [32]. Contudo, sua utilização transcende, pois mesmo quando estamos interessados em um sistema com número fixo de partículas, como elétrons num metal ou sistemas em que é impossível fixar o número de partículas, como no caso de gases formados por quasi-partículas que são continuamente criadas ou absorvida pela matéria, esse ensemble é fundamental. Queremos escrever a média térmica para este ensemble, para tal escrevemos a densidade de estados como

$$\Omega_i = \frac{e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}{\sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}, \quad (2.20)$$

onde o denominador é a função partição Z , ou seja,

$$Z(\mu, V, T) = \sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}, \quad (2.21)$$

sendo μ o potencial químico e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura.

Portanto podemos escrever a seguinte expressão para a matriz densidade ρ

$$\rho = \sum_i |i\rangle \Omega_i \langle i|, \quad (2.22)$$

de forma que usando-se a definição de Ω , temos

$$\rho = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N_i)}}{Z(\mu, V, T)}. \quad (2.23)$$

A média termodinâmica de qualquer operador A , em equilíbrio termodinâmico é dada pela expressão

$$\langle A \rangle = \frac{Tr(A\rho)}{Tr(\rho)}. \quad (2.24)$$

Assim, para o ensemble gran canônico, encontramos que a média térmica é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{Tr [Ae^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}]}{Tr [e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}]} = Z^{-1} Tr [Ae^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}]. \quad (2.25)$$

2.5 As Funções de Green

Para sistemas interagentes é fundamental encontrar o espectro de excitação de uma partícula, o qual tem uma conexão com o limite não interagente. Tais excitações são descritas por meio das F.G.. Além, é correto dizer que as F.G. representam a capacidade de resposta de um sistema físico a uma excitação externa, sendo possível obter a função distribuição para esse sistema, ou ainda, as grandezas macroscópicas termodinâmicas de interesse. Nesta seção introduziremos tais funções seguindo o formalismo proposto por Zubarev [29]. A F.G. clássica aparece naturalmente em equações diferenciais, como por exemplo a equação de Poisson

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r})/\varepsilon_0, \quad (2.26)$$

onde a F.G. representa uma solução, sendo o potencial para uma carga unitária

$$G(R) = (4\pi\varepsilon_0 R)^{-1}. \quad (2.27)$$

A resposta linear de um sistema quântico pode, de forma análoga, ser obtida através da F.G.. Essa resposta pode ser encontrada da resolução da equação de Schrödinger, ou equivalentemente para um sistema macroscópico, pela resolução da equação de evolução da matriz densidade

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\mathcal{H} + \mathcal{H}_0, \rho]. \quad (2.28)$$

Podemos agora definir as seguintes F.G. de tempo duplo, considerando dois operadores

$A(t)$ e $B(t')$ na representação de Heisenberg:

(i) Função de Green Retardada

$$G_r(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_r \equiv -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle. \quad (2.29)$$

(ii) Função de Green Avançada

$$G_a(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_a \equiv i\theta(t - t') \langle [A(t); B(t')] \rangle. \quad (2.30)$$

(iii) Função de Green Causal

$$G_c(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_c \equiv -i \langle TA(t)B(t') \rangle. \quad (2.31)$$

onde $\theta(t - t')$ é a função degrau ou de Heaviside

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

e o comutador com índice η carrega a estatística adequada, ou seja, a sua natureza comutativa ou anticomutativa, respectivamente para bósons e férmions.

$$[A, B]_\eta = AB - \eta BA. \quad (2.32)$$

Como estamos trabalhando com bósons, adotaremos $\eta = +1$. O valor médio que aparece na definição deve ser interpretado como uma média de ensemble. Como estaremos interessados em trabalhar com operadores que mudam o número de partículas, o ensemble apropriado é gran-canônico. Neste caso, a média é definida como

$$\langle X \rangle = Z^{-1} Tr(e^{-\beta \mathcal{H}'} X), \quad (2.33)$$

onde $Z^{-1} = Tr(e^{-\beta \mathcal{H}'})$ e $\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \mu N$, como visto na Seção 2.4.

2.5.1 Dependência temporal

A primeira propriedade importante das F.G., é sua dependência da diferença de tempos. Tomando a média que aparece na definição da F.G., definida com dois tempos, tal como

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} Tr(e^{-\beta \mathcal{H}'} AB) = Z^{-1} Tr e^{-\beta \mathcal{H}'} e^{i\mathcal{H}'t} A e^{-i\mathcal{H}'t} e^{i\mathcal{H}'t'} B e^{-i\mathcal{H}'t'}, \quad (2.34)$$

e, pela propriedade cíclica do traço e a comutação de quaisquer funções de \mathcal{H}' ,

$$Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA), \quad (2.35)$$

obtemos que a média acima só depende da diferença de tempo $t - t'$

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}'} e^{i\mathcal{H}(t-t')} A e^{-i\mathcal{H}'(t-t')} B) = \langle A(t-t')B(0) \rangle. \quad (2.36)$$

Assim vemos que todas as F.G. de tempo duplo dependem somente da diferença de tempo. Outras propriedades estão relacionadas a transformada de Fourier da função de Green as quais examinaremos adiante.

2.5.2 Equação de movimento

Na representação de Heisenberg, os operadores $A(t)$ e $B(t')$ satisfazem a seguinte equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} U(t) = U \mathcal{H}' - \mathcal{H}' U. \quad (2.37)$$

É fácil vermos isto quando derivamos a Eq.(2.5). Portanto, na Eq.(2.29), diferenciando em relação ao tempo $\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r$, e usando a Eq.(2.37), obtemos o seguinte resultado:

$$\frac{d}{dt} \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r = -i\delta(t-t') \langle[A(t), B(t')]\rangle + i \langle\langle [\mathcal{H}', A(t)]; B(t') \rangle\rangle. \quad (2.38)$$

Porém, embora tenhamos encontrado a equação de evolução de $\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r$, para um par de operadores, esta, por sua vez, gerou um outra F.G. de três operadores, ou seja, de ordem superior à função original. Novamente para se conhecer essa nova função é necessário utilizar sua equação de movimento e, assim de forma sucessiva, gerar-se uma cadeia infinita de F.G. acopladas através de suas equações de movimento. Para contornar essa dificuldade matemática e resolver o sistema é preciso reduzi-lo a um número finito de equações. O desacoplamento deve ser imposto a uma F.G. de ordem mais alta em termos de uma de ordem mais baixa para quebrar a série. Em alguns casos triviais, como para um sistema não interagente, o comutador que aparece na primeira equação não é muito complexo e a série é quebrada na primeira equação, permitindo a solução. Aqui revela-se naturalmente a base conceitual da F.G., pois dependendo do sistema físico, para a solução da equação diferencial que a envolve, é imprescindível a existência de condições de contorno às quais o sistema está sujeito. Em alguns casos, por exemplo, como os que envolvem interações entre partículas (bósons ou férmions fracamente interagentes), após uma conveniente mudança de espaço, a condição de contorno empregada para o desacoplamento das equações que surgem, é a aproximação HFA (Hartree-Fock Approximation) [33]; ou os que envolvem materiais ferromagnéticos, a condição de contorno utilizada é a aproximação RPA (Random Phase Approximation) [34, 35, 36, 37]. De uma maneira geral, em Física da Matéria Condensada, o desacoplamento da Eq.(2.38) é determinado

pelas representações espectrais das F.G. e das funções de correlação por intermédio das transformadas de Fourier e daí, dependendo do sistema, usa-se a aproximação mais conveniente. Portanto, definimos inicialmente a Função de Correlação temporal.

2.5.3 Funções de correlação temporal

Quando desejamos calcular médias em sistemas com muitas partículas devemos introduzir funções mais gerais que levem em conta a informação sobre correlações no sistema, ou seja, funções que informem o quanto uma grandeza influencia em outra, decorrido um certo tempo t . Em Física Estatística, define-se Função de Correlação como a média de produto de operadores [38, 39, 40]. Então, da definição de média estatística no ‘ensemble grã-canônico’ para dois operadores $A(t)$ e $B(t')$, temos

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}} A(t)B(t')), \quad (2.39)$$

que como já demonstramos é

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} A(t-t')B(0). \quad (2.40)$$

Desse modo, definimos as funções de correlação para esses operadores da seguinte maneira

$$C_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle \equiv \langle A(t-t')B(0) \rangle, \quad (2.41)$$

$$C_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle \equiv \langle B(0)A(t-t') \rangle, \quad (2.42)$$

funções, que no caso de equilíbrio termodinâmico, dependem apenas da diferença entre os instantes t e t' . Uma importante consequência desse fato é que quando assumimos $t' = t$, as médias temporais reduzem-se as médias estatísticas usuais, isto é:

$$C_{AB}(0) = \langle A(t)B(t') \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle, \quad (2.43)$$

$$C_{BA}(0) = \langle B(t')A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle. \quad (2.44)$$

2.5.4 Representação espectral e intensidade espectral

Neste ponto, iremos introduzir expansões em auto-estados que representem um conjunto completo de soluções para as funções de correlação. Adicionalmente, com uma transformada de Fourier passar para o espaços das frequências para obter uma representação espectral [38].

Então, considerando $|\nu\rangle$, um auto-estado do Hamiltoniano do sistema que satisfaz a

equação de auto-valor

$$\mathcal{H}'|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle. \quad (2.45)$$

Após algumas manipulações algébricas, a Função de Correlação dada na Eq.(2.42) é agora representada pelo conjunto completo desses auto-estados, na forma

$$C_{BA}(t-t') = Z^{-1} \sum_{\mu,\nu} \langle \nu|B|\mu\rangle \langle \mu|A|\nu\rangle e^{i(E_\mu - E_\nu)(t-t')} e^{\beta E_\mu}, \quad (2.46)$$

onde inserimos a relação de completeza, $\sum_\mu |\mu\rangle \langle \mu| = \mathbf{1}$. Nesse ponto, é oportuno definirmos a seguinte transformada de Fourier da Função de Correlação dos operadores A e B que é

$$C_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{i\omega(t-t')} d\omega. \quad (2.47)$$

Desse modo, expressamos a Função de Correlação em termos de uma representação espectral, onde $J(\omega)$ é chamada de intensidade espectral (ou função espectral), definida como

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} C_{BA}(t-t') e^{-i\omega(t-t')} dt. \quad (2.48)$$

Agora, substituindo a Eq.(2.46) na Eq.(2.48) e, considerando a representação delta

$$\delta(E_\mu - E_\nu - \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_\mu - E_\nu - \omega)t} dt, \quad (2.49)$$

obtemos, por fim

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{\mu,\nu} \langle \nu|B|\mu\rangle \langle \mu|A|\nu\rangle e^{\beta E_\mu} \delta(E_\mu - E_\nu - \omega). \quad (2.50)$$

Deste resultado se infere naturalmente que a intensidade espectral $J(\omega)$ está definida nos pontos onde $(E_\mu - E_\nu) = \omega$, ou seja, das excitações do sistema. Por analogia, definimos

$$C_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J'(\omega) e^{i\omega(t-t')} d\omega, \quad (2.51)$$

onde $J'(\omega)$ é a função espectral de $C_{AB}(t-t')$, que goza da seguinte propriedade:

$$J'(\omega) = J(\omega) e^{\beta\omega}. \quad (2.52)$$

Para não perdermos a referência, recordemos o impasse estabelecido pela equação de movimento das F.G. na Seção 2.5.2, isto é, da necessidade dessas definições para o desacoplamento de funções ordem mais alta. Logo, da mesma maneira que definimos uma representação espectral para funções de correlação temporal, o faremos agora para as F.G., $G_r(t-t')$, via transformada de Fourier.

2.5.5 Representação espectral para as funções de Green

Como as F.G., que no caso de equilíbrio termodinâmico, também dependem da diferença entre os tempos t e t' , podemos relacioná-las com a intensidade espectral, $J(\omega)$, através das seguintes operações; primeiro, escrevemos transformada

$$G_r(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad (2.53)$$

e a transformada inversa de Fourier,

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(t - t') e^{iE(t-t')} dt. \quad (2.54)$$

Depois, substituímos na Eq.(2.54) na definição da F.G., dada pela Eq.(2.29), ficando com a seguinte expressão:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iE(t-t')} \theta(t - t') [F_{AB}(t - t') - F_{BA}(t - t')] dt. \quad (2.55)$$

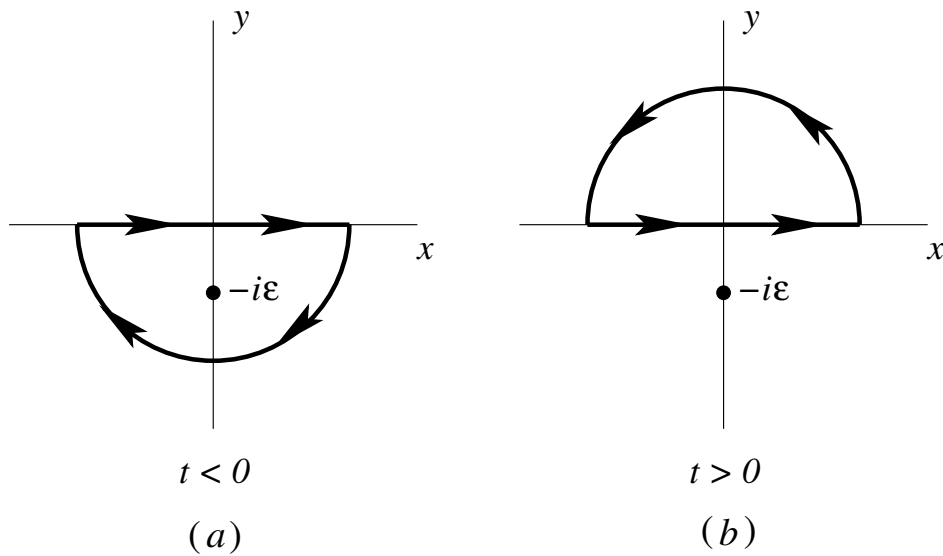


Figura 2.1: Contornos para os pólos da função de Green.

Por último, substituindo $C_{BA}(t - t')$ e $C_{AB}(t - t')$ pelas Eqs.(2.47) e (2.49), respecti-

vamente, obtemos

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - 1) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-\omega)(t-t')} \theta(t-t'). \quad (2.56)$$

Devemos obter valores de E que satisfaçam a equação de $G_r(E)$. A solução é simplificada quando escrevemos a função descontínua $\theta(t-t')$, conhecida como função degrau, na forma

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix(t)}}{x+i\varepsilon} dx, \quad (2.57)$$

que pode ser resolvida usando o método de resíduos. Então, considerando ε como uma quantidade infinitesimal positiva ($\varepsilon \rightarrow 0^+$), a expressão acima pode ser facilmente verificada usando uma integração cujo contorno é mostrado na Figura (2.1). Em (a), o integrando possui um pólo no semi-plano inferior para $x = -i\varepsilon$. Quando $t > 0$ o contorno é fechado nessa região e a integral na Eq.(2.57) é igual a unidade. Em (b), para $t < 0$, o contorno é fechado no semi-plano superior. Neste caso a integral é nula, pois o pólo está fora do contorno. Usando este resultado, temos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-\omega)(t-t')} \theta(t) = \frac{i}{E - \Omega + i\varepsilon}. \quad (2.58)$$

Portanto, a Eq.(2.56) reduz-se simplesmente à forma

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega + i\varepsilon} d\omega, \quad (2.59)$$

isto é, uma expressão que relaciona a Função de Green Retardada com a intensidade espectral. Por outro lado, fazendo uso da identidade [41]

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \quad (2.60)$$

$G_r(E)$, pode ser descrita por intermédio de suas partes real e imaginária, ou seja,

$$Re G_r(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega} d\omega \quad (2.61)$$

$$Im G_r(E) = -\frac{1}{2} (e^{\beta E} - 1) J(E). \quad (2.62)$$

Disso decorre um resultado muito importante para a análise física dos sistemas termodinâmicos de que trata a Mecânica Estatística, em particular a Física da Matéria Condensada, o Teorema da Flutuação-Dissipação [42]

$$J(E) = \frac{-2}{(e^{\beta E} - 1)} Im G_r(E), \quad (2.63)$$

pois, conhecida a parte imaginária da F.G., a menos de um “fator térmico” multiplicativo, encontramos a intensidade espectral e conseqüentemente a Função de Correlação temporal que, também, uma vez conhecida, podemos determinar as grandezas termodinâmicas mensuráveis de interesse.

Em conjunto, como já mencionamos, podemos igualmente encontrar a F.G. Avançada, $G_a(E)$, tal como foi feito para $G_r(E)$, e escrever uma expressão geral para ambas, da seguinte maneira

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega \pm i\varepsilon} d\omega. \quad (2.64)$$

Assim, utilizando o método das variáveis complexas que, afortunadamente, embora E seja uma quantidade real, as F.G. Retardada e Avançada podem ser estendidas analiticamente num plano complexo \mathbf{E} [43]; onde a primeira, só está definida para os valores positivos da parte imaginária da energia, e a segunda, para valores negativos da parte imaginária da energia. Então, como essas funções têm domínios complementares, é possível definir uma única F.G. válida para todo o plano complexo \mathbf{E} , com exceção do eixo real. Assim, considerando a energia complexa, $\mathbf{E} = E \pm i\varepsilon$, podemos representá-la do seguinte modo

$$G(\mathbf{E}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - 1)}{\mathbf{E} - \omega} d\omega. \quad (2.65)$$

Dessa forma, $G(\mathbf{E})$ passa a ser então uma função de variável complexa, definida no plano complexo \mathbf{E} com singularidade no eixo real. Logo, a descontinuidade da função $G(\mathbf{E})$ sobre este eixo pode ser relacionada à função espectral quando usamos a seguinte representação para a função delta

$$2\pi i\delta(x) = \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right), \quad (2.66)$$

tal que

$$G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (e^{\beta\omega} - 1) J(\omega) \times \left(\frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} \right) \quad (2.67)$$

ou,

$$G(E - i\varepsilon) - G(E + i\varepsilon) = -i(e^{\beta\omega} - 1)J(\omega). \quad (2.68)$$

Esta é a técnica, entre os vários métodos que têm sido empregados no estudo teórico de sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade, que utilizaremos para obter os resultados quando ondas de spin interagem com impurezas do material em estudo. Portanto, com a ferramenta matemática apresentada, o próximo passo consiste em conhecer a forma

explícita do Hamiltoniano modelo para o nosso sistema. Assim, podemos encontrar a Função de Green a ele aplicada e, conseqüentemente, obter as propriedades físicas de nosso interesse.

3 *Impureza localizada num ferromagneto semi-infinito*

3.1 O modelo de Ising

Na tentativa de explicar o ferromagnetismo com bases não fenomenológicas, Lenz [44] propôs uma teoria segundo a qual átomos dipolares num cristal seriam livres para girar sobre si próprios numa posição fixa da rede cristalina. Entretanto, critérios energéticos restringiram na prática tais átomos a assumir somente duas orientações espaciais em relação a seus vizinhos. Forças não-magnéticas seriam então responsáveis por diferenças na energia potencial dos átomos nas duas posições relativas, induzindo portanto o alinhamento dos dipolos magnéticos e dando origem a uma magnetização espontânea. Sob a orientação de Lenz, em 1925, Ernst Ising [45] resolveu exatamente em uma dimensão, o modelo que receberia seu nome.

O modelo de Ising pode ser representado na forma geral pelo Hamiltoniano de spin

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (3.1)$$

onde J é a constante de troca, h é o campo aplicado em todos os sítios e σ_i é uma variável que pode assumir, no caso mais simples ($S = 1/2$), os valores $+1$ ou -1 , nos sítios $i = 1, 2, 3, \dots, N$ de uma rede cristalina em d dimensões. O primeiro termo, onde a soma deve considerar apenas os vizinhos mais próximos, representa as energias de interação que devem ser capazes de produzir um estado ordenado ferromagneticamente (quando $J_{ij} > 0$), ou, antiferromagneticamente (se $J_{ij} < 0$). O segundo termo é a energia resultante da interação do campo magnético externo h com o spin localizado no sítio i . Embora as variáveis de spin possam assumir diversas interpretações, as primeiras tentativas de solução para o modelo supunham interações uniformes e somente entre primeiros vizinhos, bem como campo e momentos magnéticos também uniformes em redes regulares. O problema unidimensional, resolvido por Ising, não apresentou transição de fase a temperaturas finitas. Contrariamente, as versões bi e tridimensional apresentaram magne-

tização espontânea para temperaturas suficientemente baixas, como mostrado por Peierls [46]. A temperatura crítica do modelo bidimensional foi determinada exatamente por Kramers e Wannier [47]. Onsager [48] calculou a função de partição do mesmo modelo na ausência de campo magnético. O cálculo da magnetização espontânea correspondente foi apresentado por Yang. Um histórico detalhado dos primeiros desenvolvimentos do modelo de Ising foi feito por Brush [49].

No estudo de excitações magnéticas, o modelo de Ising com campo transversal foi utilizado para descrever materiais magnéticos anisotrópicos reais quando imersos num campo magnético. Isso tem uma ampla aplicabilidade no formalismo da teoria de pseudo-spin para modelar transições de ordem-desordem em materiais ferroelétricos, como KH_2PO_4 , e alguns sistemas Jahn-Teller, tais como DyVO_4 e TbVO_4 [50]. Um estudo de revisão do modelo foi feito por Blinc e Zeks [51], [52] e por Elliott e Young [53]. Aliado à técnica das F.G., amplamente discutida no Capítulo 2, o modelo de Ising com campo transversal tem sido amplamente aplicado para estudar a propagação de ondas de spin em sistemas magnéticos.

Neste Capítulo, fazemos uma revisão dos trabalhos desenvolvidos por Shiwai e Cottam [30] onde eles empregaram o método da equação de movimento para a F.G. para calcular as propriedades dinâmicas de um sistema ferromagnético semi-infinito descrito através do modelo de Ising com campo transversal. Essa descrição servirá como base para o desenvolvimento do modelo que contém impurezas acopladas. As excitações no ferromagneto são mostradas como ondas de spin de superfície, que ocorre em adição aos modos de volume obtidos para um sistema que se estende infinitamente. Esse estudo nos dará suporte teórico para introduzir o trabalho desenvolvido por Costa Filho, Costa e Cottam [31], no qual eles calcularam os modos localizados, com efeitos de superfície e volume, associados a uma impureza magnética imersa num ferromagneto de Ising com campo transversal. O espectro de frequências em regime de ondas de spin é analisado considerando-se a impureza magnética em diferentes camadas. Os resultados mostram a dependência das frequências em relação a interação de troca entre a impureza e seus vizinhos e em relação ao campo magnético nela aplicado.

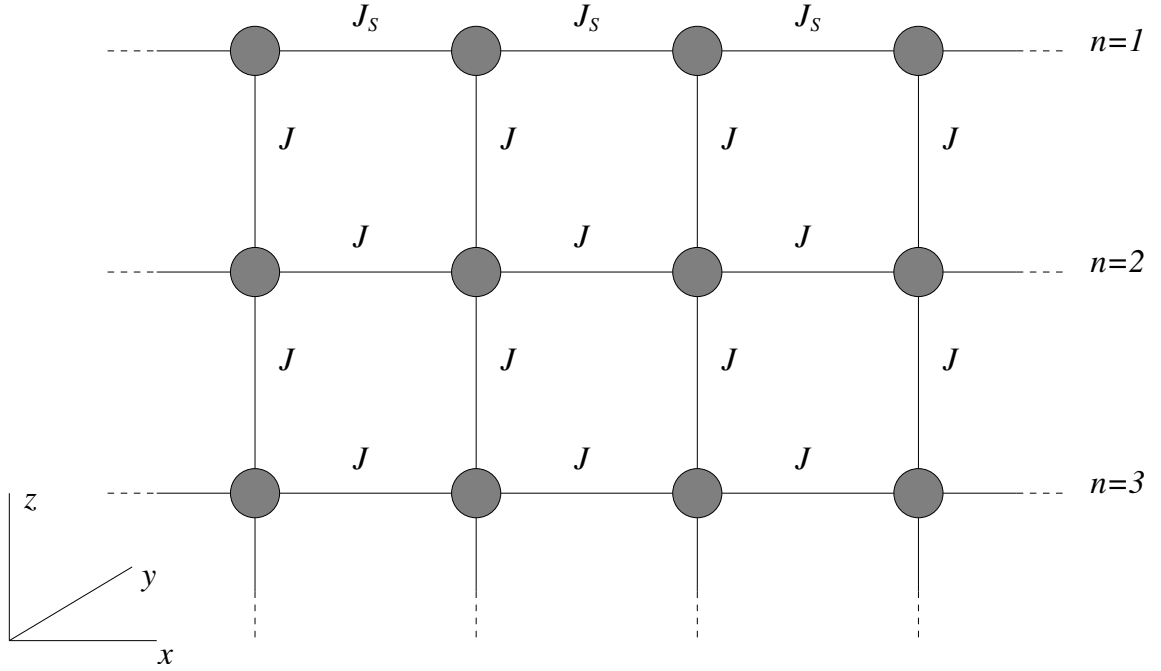


Figura 3.1: Esquema mostrando um ferromagneto semi-infinito puro.

3.2 Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto puro

3.2.1 Introdução ao modelo

Inicialmente, vamos considerar um sistema ferromagnético semi-infinito com uma superfície (001) e estrutura cúbica simples, com constante de rede a , descrito pelo Hamiltoniano de Ising na presença de um campo transversal h na direção x (veja Figura (3.1)),

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i h_i S_i^x, \quad (3.2)$$

onde, S_i^x e S_i^z são as componentes x e z do operador de spin no sítio i . $S = 1/2$ em todos os sítios. O duplo somatório deve ser feito sobre os pares de primeiros vizinhos e J_{ij} é a energia de troca entre eles, onde consideramos os valores $J_{ij} = J_S$, se ambos os vizinhos estiverem na camada de superfície e $J_{ij} = J$ no volume. O segundo termo na Eq.(3.2) descreve a interação do campo magnético transversal h_i com os operadores de spin no sítio i , com valores $h_i = h_S$ para sítios na camada de superfície e $h_i = h$ para sítios no volume.

3.2.2 As funções de Green

Para estudar as propriedades dinâmicas de um sistema ferromagnético semi-infinito, descrito pela Eq.(3.2), devemos encontrar a F.G. Retardada escrita no formalismo de Zubarev, $\langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega$ (veja Seção 2.5.2). Esta F.G. satisfaz a quação de movimento

$$\omega \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle[S_l^z, S_m^z]\rangle + \langle\langle [S_l^z, \mathcal{H}]; S_m^z \rangle\rangle_\omega, \quad (3.3)$$

onde os operadores de spin, localizados no sítios l ou m satisfazem a relação de comutação

$$[S_l^\alpha, S_m^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_l^\gamma \delta_{ij} \quad (3.4)$$

onde α, β e γ representam as coordenadas cartesianas, $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ é o tensor de Levi-Civita e δ é o delta de Kronecker [54]. Podemos então explicitar as relações de comutação da Eq.(3.3), obtendo

$$[S_l^z, S_m^z] = 0, \quad [S_l^z, \mathcal{H}] = -ih_l S_l^y. \quad (3.5)$$

Portanto, da equação de movimento resulta

$$\omega \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega = -ih_l \langle\langle S_l^y; S_m^z \rangle\rangle_\omega. \quad (3.6)$$

A equação acima mostra que a evolução temporal para a F.G. retardada $\langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega$ possui dependência em outra F.G. $\langle\langle S_l^y; S_m^z \rangle\rangle_\omega$, cuja equação de movimento é dada por

$$\omega \langle\langle S_l^y; S_m^z \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle[S_l^y, S_m^z]\rangle + \langle\langle [S_l^y, \mathcal{H}]; S_m^z \rangle\rangle_\omega. \quad (3.7)$$

Manipulando adequadamente a Eq.(3.4) para os operadores de spin, podemos mostrar que, para o primeiro termo do lado direito da equação acima, teremos

$$\langle[S_l^y, S_m^z]\rangle = i \langle S_l^x \rangle \delta_{lm} \quad (3.8)$$

e, para o segundo termo

$$\begin{aligned} \langle\langle [S_l^y, \mathcal{H}]; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= ih_l \langle\langle S_l^y; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\ &- \frac{i}{2} \left\{ \sum_j J_{lj} \langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega + \sum_i J_{il} \langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega \right\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Substituindo esses termos na Eq.(3.7) podemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle S_l^y; S_m^z \rangle \rangle_\omega &= \frac{i}{2\pi} \langle S_l^x \rangle \delta_{l,m} + ih_l \langle \langle S_l^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \\ &- \frac{i}{2} \left\{ \sum_j J_{lj} \langle \langle S_l^x S_j^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \sum_i J_{il} \langle \langle S_i^z S_l^x; S_m^z \rangle \rangle_\omega \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ou seja, obtemos uma nova equação que contém F.G. de ordem mais alta. Fica, portanto inviável estudar a evolução dessa F.G. via equação de movimento, pois obteremos uma cadeia infinita de equações acopladas. Para solucionar esse problema, faremos uso de uma aproximação bastante conhecida na literatura, a RPA (veja Seção 2.5.2). Essa aproximação consiste basicamente em desprezar as correlações entre as componentes transversais e longitudinais dos operadores de spin em pontos distintos da rede. Para o nosso caso, faremos:

$$\langle \langle S_l^x S_j^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega \approx \langle S_l^x \rangle \langle \langle S_j^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \langle S_j^z \rangle \langle \langle S_l^x; S_m^z \rangle \rangle_\omega, \quad (3.11)$$

$$\langle \langle S_i^z S_l^x; S_m^z \rangle \rangle_\omega \approx \langle S_i^z \rangle \langle \langle S_l^x; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \langle S_l^x \rangle \langle \langle S_i^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega. \quad (3.12)$$

Substituindo esses termos na Eq.(3.10), obtemos uma nova equação composta por F.G. para dois operadores,

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle S_l^y; S_m^z \rangle \rangle_\omega &= \frac{i}{2\pi} \langle S_l^x \rangle \delta_{l,m} + ih_l \langle \langle S_l^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \\ &- i \sum_i J_{il} \{ \langle S_i^z \rangle \langle \langle S_l^x; S_m^z \rangle \rangle_\omega + \langle S_l^x \rangle \langle \langle S_i^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega \}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Para um sistema puro, descrito pelo hamiltoniano de Ising com campo transversal, com $h_i = h$ para todo i , teremos uma transição de fase de segunda ordem a uma temperatura crítica T_C que, pela teoria do campo médio está relacionada com h e J por [55] $\tanh(h/2k_B T_C) = h/3J$. Para $T < T_C$ a orientação média dos spins tem componentes nas direções x e z mas, para $T \geq T_C$ teremos apenas spins orientados ao longo da direção x . Portanto, fazendo $\langle S_i^z \rangle = 0$ e $R^x \equiv \langle S_i^x \rangle = \frac{1}{2} \tanh(h/2k_B T)$ em todos os sítios na Eq.(3.13) e substituindo na Eq.(3.6), obtemos

$$\frac{[\omega^2 - h^2]}{h} G_{lm}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lm} - R_l^x \sum_j J_{lj} G_{jm}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega), \quad (3.14)$$

onde,

$$G_{lm}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \langle \langle S_l^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega, \quad G_{jm}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \langle \langle S_j^z; S_m^z \rangle \rangle_\omega. \quad (3.15)$$

Considerando as propriedades de invariância translacional nas direções paralelas à su-

perfície podemos definir a transformada de Fourier para a F.G. no espaço de fase como

$$G_{lm}^0(\omega) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega), \quad (3.16)$$

e sua inversa,

$$G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m} e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} G_{lm}^0(\omega), \quad (3.17)$$

onde, N é o número de células unitárias da rede e \mathbf{r}_l e \mathbf{r}_m , são vetores bi-dimensionais no plano xy e $\mathbf{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$ é vetor o de onda no plano. Os índices das camadas são denotados por n e n' , (iguais a 1, 2, 3, ...) definidos por $z = (n - 1)a$ e $z = (n' - 1)a$, onde a é o parâmetro de rede. A Eq.(3.14) assume então a forma

$$\left\{ \omega^2 - h^2 + hR^x \sum_j J_{lj} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} \right\} G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{h}{2\pi} R^x. \quad (3.18)$$

O fator de estrutura de uma rede cúbica simples, considerando apenas interações entre primeiros vizinhos, é dado por $\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{1}{2} [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]$. O que nos permite escrever

$$\sum_{j=1}^4 J_{lj} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} = 4J\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}). \quad (3.19)$$

Conseqüentemente, a Função de Green obtida a partir da Eq.(3.18) expressará interações de curto alcance, que são as interações de nosso interesse, ou seja:

$$G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{hR^x}{2\pi} \left[\frac{1}{\omega^2 - h^2 + 4hR^x J\gamma(\mathbf{q}_{\parallel})} \right] \quad (3.20)$$

Esta é a Função de Green obtida a partir do Hamiltoniano de Ising com campo transversal para o caso de um sistema ferromagnético semi-infinito sem impurezas.

3.2.3 Representação matricial

As séries de equações de F.G. representadas pela Eq.(3.20) podem ser escritas de forma matricial

$$\mathbf{A} \mathbf{G}_{nn'}^0 = -\frac{\delta_{nn'}}{2\pi J} \quad (3.21)$$

onde, no caso de um meio semi-infinito, \mathbf{A} e \mathbf{G}^0 são matrizes de dimensão infinita, dadas por

$$\mathbf{G}_{nn'}^0 = G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \quad (3.22)$$

e

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} d + \Delta & -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & d & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & d & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & d & -1 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -1 & d & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

onde os parâmetros d e Δ são definidos respectivamente por:

$$d = -\frac{[\omega^2 - h^2 + 4hR^x J \gamma(\vec{q}_{\parallel})]}{hR^x J}, \quad (3.24)$$

$$\Delta = \frac{\omega^2(h_S R_S^x - hR^x) - hh_S(hR_S^x - h_S R^x)}{hh_S R^x R_S^x J} - 4\gamma_2(\mathbf{q}_{\parallel}) \left(\frac{J_S}{J} - 1 \right), \quad (3.25)$$

onde $R^x = \frac{1}{2} \tanh(h/2k_B T)$ e $R_S^x = \frac{1}{2} \tanh(h_S/2k_B T)$.

As Eqs.(3.22-3.25) são similares às obtidas por Cottam [30] para um ferromagneto de Ising semi-infinito, na ausência de impurezas. Usando esses resultados, segue que as F.G. que satisfazem a Eq.(3.21) podem ser expressas como

$$G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{1}{2\pi J(x - x^{-1})} \left[x^{|n-n'|} - \left(\frac{1 + x^{-1}\Delta}{1 + x\Delta} \right) x^{n+n'} \right], \quad (3.26)$$

onde x é um parâmetro complexo que satisfaz a equação

$$x + x^{-1} = d, \quad |x| \leq 1. \quad (3.27)$$

Com essa representação, o objetivo agora é encontrar os modos dinâmicos do sistema.

3.2.4 Modos de volume e de superfície

As F.G. $G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$, dadas pela Eq. (3.26), contém uma descrição para os modos de volume e de superfície, juntamente com seus fatores apropriados esperados. De acordo com [30], os modos de volume podem ser obtidos fazendo-se $x = \exp(iq_z a)$, onde q_z é uma componente real do vetor de onda, perpendicular à superfície. Das Eqs. (3.24) e (3.27) obtemos a seguinte relação de dispersão para ondas de spin de volume

$$\omega = \left\{ h^2 - 4hR^x J \gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) - (x + x^{-1})hR^x J \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.28)$$

Inserindo $x = \exp(iq_z a)$ na equação acima teremos

$$\omega_B(\mathbf{q}) = \left\{ h^2 - 2hR^x J [\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)] \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.29)$$

onde $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)$ é um vetor de onda tridimensional.

Esta expressão é reconhecida como um resultado padrão [51, 53] para a relação de dispersão dos modos de volume quando $T > T_C$, num sistema infinito representado por uma rede cúbica simples, descrito pelo Modelo de Ising com Campo Transverso. Vemos portanto, que a equação de dispersão depende da direção do vetor de onda \mathbf{q} , mesmo para um cristal de alta simetria.

Os modos de superfície correspondem ao caso no qual $x = 1/\Delta$ na Eq.(3.28). Leva a

$$\omega = \left\{ h^2 - 4hR^x J \gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) - (\Delta + \Delta^{-1}) hR^x J \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.30)$$

onde Δ é uma função de ω , Eq.(3.25).

Dependendo dos parâmetros de superfície, os modos de superfície podem ocorrer acima ou abaixo dos limites da banda de volume. São conhecidos como modos ópticos ou acústicos, respectivamente. Por exemplo, no caso especial em que $h_S = h$ o parâmetro de superfície Δ é simplificado a

$$\Delta = -4\sigma\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (3.31)$$

portanto, independente de ω , onde denotamos $\sigma = J_S/J - 1$. Segue então que a relação de dispersão para ondas de spin de superfície corresponde a $\omega = \omega_S(\mathbf{q}_{\parallel})$, onde

$$\omega_S(\mathbf{q}_{\parallel}) = \left\{ h^2 - hR^x J [4(1 + \sigma)\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) + 4\sigma\gamma(\mathbf{q}_{\parallel})^{-1}] \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.32)$$

A frequência dos modos de superfície e volume foi amplamente discutida Shiwai e Cottam [30].

3.3 Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto contendo uma impureza

3.3.1 Introdução ao modelo

Considere novamente o sistema ferromagnético da Seção 3.2.1 descrito pelo Hamiltoniano de Ising com campo transverso,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i h_i S_i^x. \quad (3.33)$$

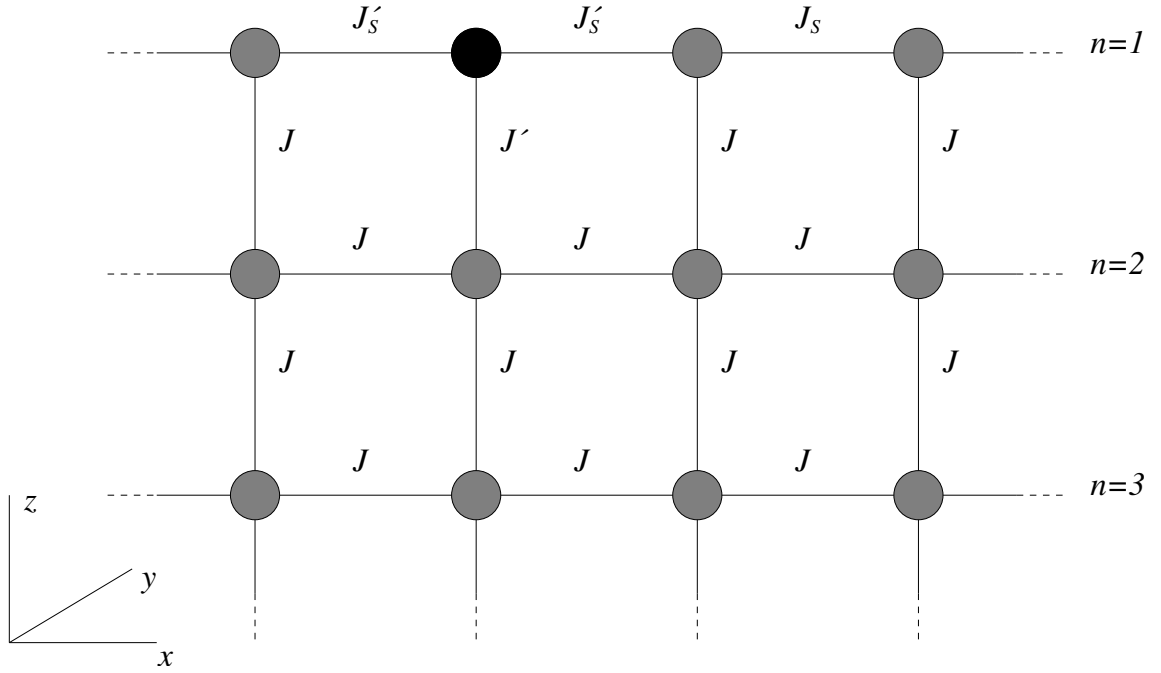


Figura 3.2: Esquema mostrando um ferromagneto semi-infinito com uma impureza localizada.

Considere também, uma impureza localizada num sítio qualquer na camada de superfície ($n = 1$), na camada imediatamente abaixo ($n = 2$) ou na região de volume ($n \geq 3$) (veja Figura (3.2)). Aqui também fazemos $S = 1/2$ em todos os sítios. O duplo somatório deve ser feito sobre os pares de primeiros vizinhos e J_{ij} é a energia de troca entre eles, onde consideramos os valores $J_{ij} = J$, se os vizinhos são puros, $J_{ij} = J_S$ se eles estão na superfície, $J_{ij} = J'$ se a interação é de uma impureza com seus vizinhos, e, $J_{ij} = J'_S$ se a impureza estiver na superfície. O segundo termo na Eq.(3.33) descreve a interação do campo magnético transversal h_i com os operadores de spin no sítio i , com valores h para sítios puros, h_S para sítios puros na superfície, h' e h'_S para sítios puros e com impurezas situados no volume e na superfície respectivamente.

Para o nosso propósito, é conveniente reescrever o Hamiltoniano como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, onde \mathcal{H}_0 é o Hamiltoniano para um ferromagneto puro descrito pelo modelo de Ising com campo transversal, Eq.(3.33), e \mathcal{H}' é a perturbação correspondente à substituição de um sítio i do sistema puro por uma impureza localizada. No caso de um meio que se estende

infinitamente, temos que

$$\mathcal{H}' = -(J' - J) \sum_d S_d^z S_o^z - (h' - h) S_o^x, \quad (3.34)$$

onde o somatório é feito sobre os seis primeiros vizinhos. Para um sistema com impurezas, a temperatura T_C para um sistema puro, que como vimos na Seção 3.2.1 é dada por $\tanh(h/2k_B T_C) = h/3J$, passa a ser T_C^i dependente de h' e J' que, em alguns casos pode ser maior que T_C . Para $T < T_C^i$ a orientação média dos spins tem componentes nas direções x e z , enquanto que para $T \geq T_C^i$, eles se alinham na direção do eixo x . Neste estudo nos concentramos apenas na fase paramagnética, $T \geq T_C^i$ para simplificar. As transformadas de Fourier para as F.G. para um sistema puro, como visto na seção anterior, são dadas pelas Eqs. (3.16) e (3.17), sendo nesse caso um vetor de onda tri-dimensional, e

$$G_{nn'}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{hR^x}{2\pi} \left[\frac{1}{\omega^2 - h^2 + 6hR^x J \gamma(\mathbf{q}_{\parallel})} \right]. \quad (3.35)$$

Aqui $\gamma_3(\mathbf{q}) = \frac{1}{3}[\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)]$ e $R^x \equiv \langle S^x \rangle = \frac{1}{2} \tanh(h/2k_B T)$ em todos os sítios.

3.3.2 Representação matricial

No caso de um ferromagneto semi-infinito, descrito pelo modelo de Ising com campo transversal, contendo uma impureza magnética localizada, procedendo de maneira análoga ao caso feito na Seção 3.2.2, podemos obter as equações acopladas para $G_{lm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \langle \langle S_l^z; S_m^z \rangle \rangle_{\omega}$,

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2 - [h + (h' - h)\delta_{lo}]^2}{h + (h' - h)\delta_{lo}} G_{lm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) &= \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lm} - R_l^x \sum_j J_{jl} G_{jm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \\ &\quad - \sum_d [G_{dm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \delta_{lo} + G_{om}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \delta_{ld}] \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde $R_l^x \equiv \langle S_l^x \rangle$. A equação acima pode ser relacionada à sua análoga, Eq.(3.14) (ver Seção 3.2.2). O resultado está detalhado no Apêndice A. Encontramos uma equação que relaciona a matriz F.G. para um sistema ferromagnético no modelo de Ising com campo transversal contendo uma impureza, \mathbf{G} , com a correspondente F.G. para o sistema puro, \mathbf{G}^0 . A equação de Dyson para esse caso é:

$$[(\tilde{\mathbf{G}}^0)^{-1} - \mathbf{V}] \tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{I}, \quad (3.37)$$

onde $\tilde{\mathbf{G}}^0$ e $\tilde{\mathbf{G}}$ denotam as matrizes para as F.G., cujos elementos são $(2\pi/R_l^x) G_{lm}^0(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$ e $(2\pi/R_l^x) G_{lm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$, respectivamente. Aqui \mathbf{I} é uma matriz unitária e $\mathbf{V}(\omega)$ é a matriz

que representa o potencial efetivo relacionado à perturbação \mathcal{H}' produzido pela impureza. Seus elementos são

$$V_{ij}(\omega) = \frac{(h' - h)(\omega^2 + hh')}{hh'} \delta_{lo} \delta_{ij} - \sum_d (J' - J) R_l^x (\delta_{lo} \delta_{jd} + \delta_{jo} \delta_{ld}). \quad (3.38)$$

Para a perturbação \mathcal{H}' devido à impureza existem três diferentes casos. Primeiro, quando a impureza está na região de volume, ($n \geq 3$), \mathcal{H}' é dado simplesmente pela Eq.(3.33). Se a impureza estiver na camada vizinha à superfície ($n = 2$), obtem-se

$$H' = -(J'_S - J_S) S_{d_1}^z S_o^z - (J' - J) \sum_{d'} S_{d'}^z S_o^z - (h' - h) S_x^o. \quad (3.39)$$

Cada impureza tem seis primeiros vizinhos, um deles (d_1) está na camada de superfície e cinco (d') na região de volume. Para $n = 1$, o sítio contendo a impureza está na superfície e tem somente cinco primeiros vizinhos. A interação de troca de uma impureza com o seu vizinho na superfície (d'') é diferente da interação com os demais (d_2), na região de volume. O Hamiltoniano pra esse caso é

$$H' = -(J' - J) S_{d_2}^z S_o^z - (J'_S - J_S) \sum_{d''} S_{d''}^z S_o^z - (h' - h_S) S_x^o. \quad (3.40)$$

As F.G. para um sistema semi-infinito puro são dados pelas Eqs.(3.15) e (3.26). A notação $R_l^x = \langle S_l^x \rangle$, de acordo com a teoria do campo médio, tem dois valores possíveis para o caso de um sistema puro: $R_l^x = \frac{1}{2} \tanh(h_S/2k_B T) \equiv R_S^x$, quando o sítio está na superfície ou $R_l^x = \frac{1}{2} \tanh(h/2k_B T) \equiv R^x$, se está fora.

As equações de F.G. considerando impureza localizada (na camada n) podem ser generalizadas da mesma forma descrita anteriormente para um sistema semi-infinito. Em particular, os elementos da matriz $\mathbf{V}(\omega)$ na equação de Dyson são obtidos a partir da Eq.(3.37), para o caso no qual a impureza está na região de volume ($n \geq 3$). Se a impureza está na camada vizinha à superfície ($n = 2$), os elementos da matriz são dados por

$$\begin{aligned} V_{ij}(\omega) = & \frac{(h' - h)(\omega^2 + hh')}{hh'} \delta_{lo} \delta_{ij} - \sum_d (J'_S - J_S) R_l^x (\delta_{lo} \delta_{jd_1} + \delta_{jo} \delta_{ld_1}) \\ & - \sum_{d'} (J' - J) R_l^x (\delta_{lo} \delta_{jd'} + \delta_{jo} \delta_{ld'}), \end{aligned} \quad (3.41)$$

e, se a impureza está na camada de superfície ($n = 1$)

$$V_{lj}(\omega) = \frac{(h' - h)(\omega^2 + hh')}{hh'} \delta_{lo} \delta_{ij} - \sum_d (J' - J) R_l^x (\delta_{lo} \delta_{jd_2} + \delta_{jo} \delta_{ld_2}) - \sum_{d'} (J'_S - J_S) R_l^x (\delta_{lo} \delta_{jd''} + \delta_{jo} \delta_{ld''}). \quad (3.42)$$

3.3.3 Resultados numéricos para modos de impureza

A equação de Dyson, Eq.(3.37), relaciona a matriz \mathbf{G} para um sistema ferromagnético de Ising com campo transversal contendo uma impureza com a matriz \mathbf{G}^0 correspondente para um sistema puro. As energias de excitação associadas aos sítios que contém impurezas podem ser obtidas numericamente usando-se a condição

$$\det[\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)] \mathbf{V}(\omega) = 0. \quad (3.43)$$

onde as expressões apropriadas para as matrizes $\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)$ e $\mathbf{V}(\omega)$ podem ser obtidas na

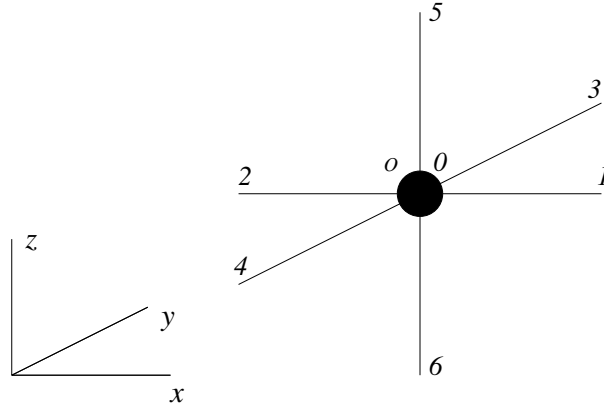


Figura 3.3: Impureza o e seus primeiros vizinhos em uma rede cúbica simples.

seção anterior. As energias obtidas na equação acima representam os pólos da F.G. para o sistema com uma impureza localizada (veja Seção 2.5.5).

A título de ilustração, considere uma impureza o localizada na terceira camada ($n = 3$) e seus seis primeiros vizinhos. Para esse caso, as matrizes $\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)$ para a F.G. e $\mathbf{V}(\omega)$ para o potencial efetivo relacionado à impureza, são dadas respectivamente pelas Eqs.(3.26) e (3.38). Somente uma submatriz 7×7 será diferente de zero para a matriz que representa o potencial: isto corresponde a uma impureza localizada no sítio o e seus seis primeiros vizinhos em uma rede cúbica simples. No caso especial $N = 1$, impureza na superfície,

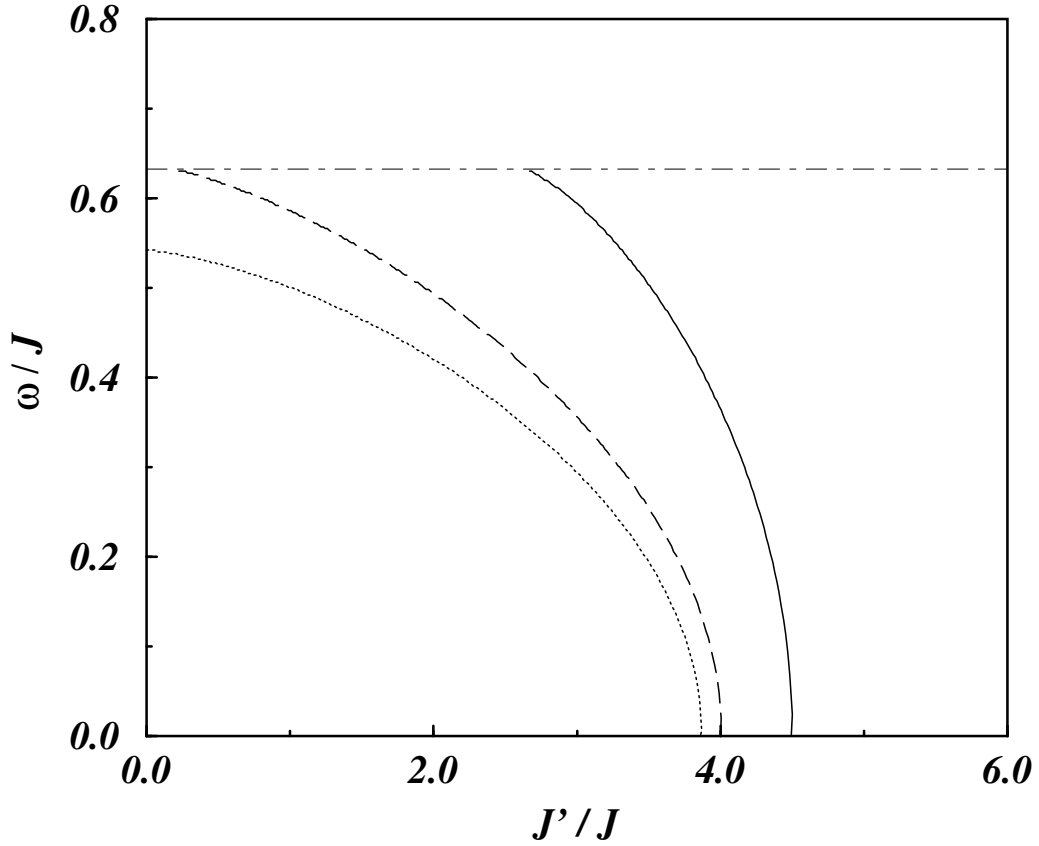


Figura 3.4: Frequência dos modos localizados versus energia de troca J'/J para diferentes valores do campo h'/h ; linha pontilhada $h' = 0.55h$, linha tracejada $h' = 0.65h$ e linha sólida $h' = 1.5h$. Impureza na terceira camada ($n = 3$).

existem somente cinco primeiros vizinhos (apenas uma matriz 6×6 é diferente de zero).

As soluções para a Eq.(3.43) são obtidas numericamente para um sistema semi-infinito fazendo-se um somatório sobre um vetor de onda tri-dimensional \mathbf{q} ou bi-dimensional \mathbf{q}_{\parallel} . Os modos de impurezas mostrados nas Figs.(3.4) e (3.5) ocorrem fora da banda de volume relativa a um material puro; são então denominados modos defeituosos. Os modos de impurezas com frequências dentro da banda de volume são conhecidos como modos ressonantes e não serão discutidos aqui já que são mais difíceis de ser detectados experimentalmente [56]. No caso de um sistema semi-infinito, podem ocorrer ondas de spin associados à superfície do material puro [51, 57] e podem influenciar os modos defeituosos. Os resultados numéricos apresentados nesta Seção foram obtidos por R. N. Costa Filho, Costa e Cottam em [31], onde tem-se uma discussão detalhada.

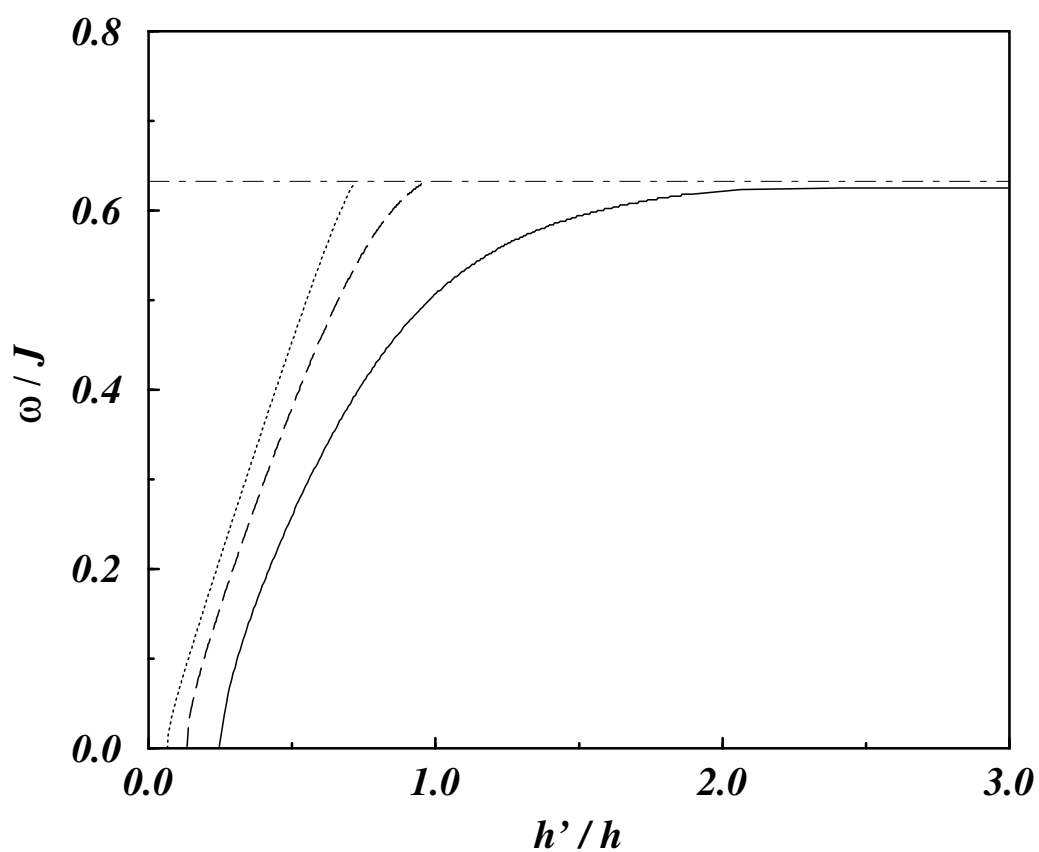


Figura 3.5: Frequência dos modos localizados versus campo aplicado h'/h para diferentes valores da energia de troca J'/J ; linha pontilhada $J' = 1.0J$, linha tracejada $J' = 2.0J$ e linha sólida $J' = 3.0J$. Impureza na terceira camada ($n = 3$).

4 *Impurezas acopladas num ferromagneto semi-infinito*

4.1 Introdução

Sólidos são meios que permitem a propagação de uma variedade de excitações elementares, tal como fônons, poláritons e magnons. Para modelar o comportamento dessas excitações, considera-se o meio no qual elas se propagam como um cristal perfeito que se estende infinitamente. Este tratamento em alguns casos, entretanto, não permite uma boa descrição do sistema. Um exemplo é dado quando se trata de um meio de baixa dimensão, tal como um filme fino, no qual a presença de superfícies tem influência no espectro de excitações. A introdução de camadas de impurezas, impurezas localizadas, ou mesmo uma baixa concentração delas, também modifica o espectro de excitações desse meio. Este diferente comportamento ocorre porque a presença de superfícies ou a introdução de impurezas pode modificar as interações microscópicas no material. Também a baixa dimensionalidade do meio, juntamente com a presença de impurezas, atua como quebra de simetria translacional no sistema, causando significativas modificações na propagação das excitações, e permitindo o surgimento de excitações localizadas.

Neste Capítulo, aplicaremos a técnica de F.G., fundamentada no Capítulo 3, para calcular o espectro de excitações para duas impurezas vizinhas implantadas num ferromagneto semi-infinito. Determinamos a equação de movimento para as F.G. onde o sistema é descrito através do modelo de Ising com campo transverso. Obtemos resultados para as frequências dos modos defeituosos como função do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos, do campo aplicado e do acoplamento de troca entre elas.

4.2 Modelo e formalismo de F.G.

Considere um sistema de spins semi-infinito, ordenados ferromagneticamente com uma superfície (001) e estrutura cúbica simples (constante de rede a). Semelhante ao visto na Fig.(3.1). Considere também, duas impurezas magnéticas, localizadas em sítios vizinhos,

imersas nesse meio a uma distância $(n - 1)a$ da superfície (com n inteiro, $n \geq 1$). O sistema de spins localizados é descrito através do Hamiltoniano de Ising na presença de um campo magnético externo aplicado transversalmente na direção x , escrito como:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{l,m} J_{lm} S_l^z S_m^z - \sum_l h_l S_l^x, \quad (4.1)$$

onde $S_{l,m}^x$ e $S_{l,m}^z$ são as componentes x and z dos operadores de spin \mathbf{S} , com $S = \frac{1}{2}$ em todos os sítios. O primeiro termo da Eq.(4.1) refere-se à contribuição devido à interação de troca, apenas entre primeiros vizinhos. O segundo termo descreve a interação do campo magnético transversal num dado sítio l , onde $h_l = h$ para sítios num material puro, localizados no volume, e $h_l = h_S$ para sítios na superfície de um material puro. Para introduzir os termos que incluem informações sobre os sítios com impurezas, convém reescrever o Hamiltoniano como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$, onde \mathcal{H}_0 é o Hamiltoniano para um ferromagneto puro e \mathcal{H}_I corresponde à perturbação causada pela inserção da impureza, dado por

$$\mathcal{H}_I = \mathcal{H}_{od} + \mathcal{H}_{o'd'} + \mathcal{H}_{oo'}, \quad (4.2)$$

onde os termos \mathcal{H}_{od} e $\mathcal{H}_{o'd'}$ descrevem o acoplamento de troca entre uma impureza num dado sítio indiciado o e o' , respectivamente, e seus vizinhos no material puro. Estes termos podem ser escritos como

$$\mathcal{H}_{od} = -(J_o - J) \sum_d S_d^z S_o^z - (h_o - h) S_o^x, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{H}_{o'd'} = -(J_{o'} - J) \sum_{d'} S_{d'}^z S_{o'}^z - (h_{o'} - h) S_{o'}^x, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{H}_{oo'} = -(J_I - J) S_o^z S_{o'}^z, \quad (4.5)$$

onde os índices d (d') se referem aos sítios puros vizinhos às impurezas. O acoplamento de troca assume os valores $J_o = J'$ ($J_{o'} = J''$) para a interação entre uma impureza e seus vizinhos no material puro e $J_o = J'_S$ ($J_{o'} = J''_S$) se a impureza e seus vizinhos estão na superfície. O termo $\mathcal{H}_{oo'}$ na Eq.(4.2) expressa a interação de troca entre as duas impurezas. A contribuição Zeeman nas Eqs.(4.3) e (4.4) descreve o efeito do campo magnético transversal h_o e $h_{o'}$ sobre as impurezas, os quais assumem os valores h'_S (h''_S) e h' (h'') se os sítios forem localizados na superfície ou volume do material, respectivamente.

Como consideramos apenas interações entre spins vizinhos, podemos distinguir duas orientações fisicamente diferentes para as impurezas, a saber, duas impurezas alinhadas ao longo do eixo x (Fig.(4.2a)), o qual nos referiremos como caso X , e duas impurezas alinhadas com eixo z (Fig.(4.2b)), caso Z . Para obter o espectro de excitação para esse

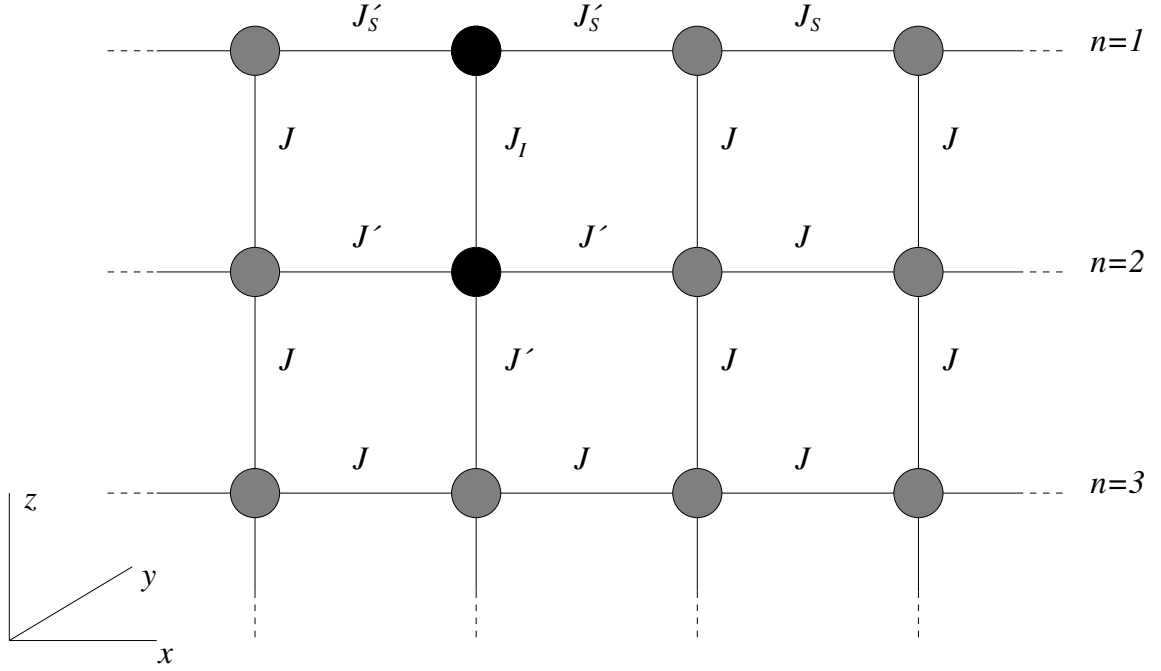


Figura 4.1: Representação do esquema de interação para duas impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transverso. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.

sistema, nós estendemos o formalismo para o caso de uma impureza simples [31], mostrado na última seção do capítulo anterior. Nós iniciamos definindo a F.G. $\langle\langle S_l^\alpha; S_m^\beta \rangle\rangle_\omega$, onde α e β são as componentes dos operadores de spin e ω é a frequência. Neste trabalho, usamos a F.G. retardada $G_{lm}(\mathbf{q}_\parallel, \omega) = \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega$. Esta função satisfaz a equação de movimento para os operadores de spin [29]

$$\omega \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle[S_l^z, S_m^z]\rangle + \langle\langle [S_l^z, \mathcal{H}]; S_m^z \rangle\rangle_\omega. \quad (4.6)$$

A F.G. para um sistema puro pode ser obtida resolvendo-se a equação acima com \mathcal{H} substituído por \mathcal{H}_0 . A solução, bastante conhecida na literatura [30], a qual descreve um ferromagneto de Ising semi-infinito, ou seja, com simetria translacional paralela à superfície, é dada por

$$G_{lm}^0(\omega) = -\frac{1}{M} \sum_q G_{\mathbf{q}_\parallel}^0(\omega) \exp[\mathbf{q}_\parallel \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)], \quad (4.7)$$

onde os vetores \mathbf{r}_l e \mathbf{r}_m indicam as posições para os sítios l e m , $\mathbf{q}_\parallel \equiv (q_x, q_y)$ é um vetor de onda no plano xy e M é o número de sítios numa camada paralela à superfície. As

amplitudes de Fourier para esta função são dadas por

$$G_{\mathbf{q}_{\parallel}}^0(\omega) = \frac{1}{2\pi J(x - x^{-1})} \left(x^{|n-n'|} - \frac{1 + x^{-1}\Delta}{1 + x\Delta} x^{n+n'} \right). \quad (4.8)$$

Os índices n e n' referem-se às camadas nas quais estão os sítios l e m , respectivamente (iniciando na camada de superfície com $n = 1$), e x é um número complexo ($|x| \leq 1$) que satisfaz a condição

$$x + x^{-1} = [h^2 - 4hJR^x\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) - \omega^2]/hJR^x, \quad (4.9)$$

onde $\gamma(\mathbf{q}_{\parallel})$ é o fator de estrutura que, no caso de uma rede cúbica simples, é dado por $\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{1}{2}[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]$. O parâmetro Δ na Eq.(8) depende das propriedades da superfície, é dado por

$$\Delta = \frac{\omega^2(h_S R_S^x - hR^x) - hh_S(hR_S^x - h_S R^x)}{hh_S R^x R_S^x J} - 4\gamma(\mathbf{q}_{\parallel}) \left(\frac{J_S}{J} - 1 \right), \quad (4.10)$$

onde, da teoria do campo médio, podemos obter as médias para as componentes de spin no volume e na superfície como $R^x \equiv \langle S^x \rangle = \tanh(h/2k_B T)$ e $R_S^x = \tanh(h_S/2k_B T)$, respectivamente.

A existência de impurezas localizadas num meio ideal provoca a quebra de simetria translacional nesse sistema. Conseqüentemente, os cálculos para o sistema contendo impurezas são realizados no espaço real. Incluindo o efeito perturbativo causado pelas impurezas \mathcal{H}_I no Hamiltoniano e aplicando a Eq.(4.8), podemos obter uma nova F.G. $G_{lm}(\omega)$, a qual é obtida a partir da equação

$$A_{lj} G_{lm}(\omega) = \delta_{lj} - \frac{2\pi}{R_l^x} [P_{lj} - U_{lj} - U'_{lj} - U''_{lj}] G_{lm}(\omega) \quad (4.11)$$

onde

$$A_{lj} = \frac{\omega^2 - [h + (h_o - h)\delta_{lo} + (h_{o'} - h)\delta_{lo'}]^2}{h + [h + (h_o - h)\delta_{lo} + (h_{o'} - h)\delta_{lo'}]} \delta_{lj},$$

$$P_{lj} = \sum_p J_{lp} R_l^x \delta_{lj}$$

$$U_{lj} = \sum_d (J_o - J) R_l^x [\delta_{lo} \delta_{dm} + \delta_{ld} \delta_{jo}],$$

$$U'_{lj} = \sum_{d'} (J_{o'} - J) R_l^x [\delta_{lo'} \delta_{jd'} + \delta_{ld'} \delta_{jo'}],$$

$$U''_{lj} = (J_I - J) R_l^x [\delta_{lo'} \delta_{jo} + \delta_{lo} \delta_{jo'}].$$

Onde os índices o (o') assumem os valores 0 (2) para cada sítio contendo impureza no caso X e 0 (6) no caso Z (veja Fig.(4.2)). O segundo somatório é feito sobre os cinco primeiros vizinhos de qualquer das impurezas. Reescrevendo a Eq.(4.11) na forma matricial obtemos a equação de Dyson (veja Apêndice A)

$$[(\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega))^{-1} - \mathbf{V}(\omega)]\tilde{\mathbf{G}}(\omega) = \mathbf{I}, \quad (4.12)$$

onde $\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)$ e $\tilde{\mathbf{G}}(\omega)$ são matrizes quadradas cujos elementos são dados por $(2\pi/R_i^x)G_{lm}^0(\omega)$ e $(2\pi/R_i^x)G_{lm}(\omega)$, respectivamente. \mathbf{I} é a matriz identidade, \mathbf{V} é o potencial efetivo devido ao termo de impurezas \mathcal{H}_I , com elementos

$$V_{lj}(\omega) = \frac{\omega^2 - h^2}{h} \delta_{lj} - A_{lj} - P_{lj} - U_{lj} - U'_{lj} - U''_{lj}. \quad (4.13)$$

A equação acima relaciona as matrizes que representam as funções de Green para um sistema puro ($\mathbf{G}^0(\omega)$) com ($\mathbf{G}(\omega)$) para um sistema contendo impurezas. O espectro de modos localizados pode então ser encontrado numericamente resolvendo-se a equação que satisfaz a condição para o determinante

$$\det[\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)\mathbf{V}(\omega)] = 0, \quad (4.14)$$

as quais representam os polos da F.G. $\mathbf{G}(\omega)$ para o sistema contendo impurezas.

4.3 Resultados numéricos

Nossos resultados mostram o comportamento dos modos localizados, relativos às impurezas, como uma função do parâmetro de troca e do campo efetivo. Para estudar a influência da posição de cada impureza no espectro de excitações, obtemos soluções numéricas da Eq.(4.14) para impurezas localizadas na superfície do material (camada $n = 1$) e nas imediatamente abaixo (camadas $n = 2$ e $n = 3$). Especificamente, para o caso X , nós consideramos três configurações, a saber, ambas as impurezas na superfície, ambas as impurezas na segunda camada e ambas as impurezas na terceira camada, de acordo com a notação usada na Fig.(4.2a). Da mesma forma, para o caso Z , onde consideramos duas impurezas sendo uma das impurezas na superfície e a outra na camada 2, uma na camada dois e a outra na terceira camada e uma da terceira e a outra na quarta camada Fig.(4.2a).

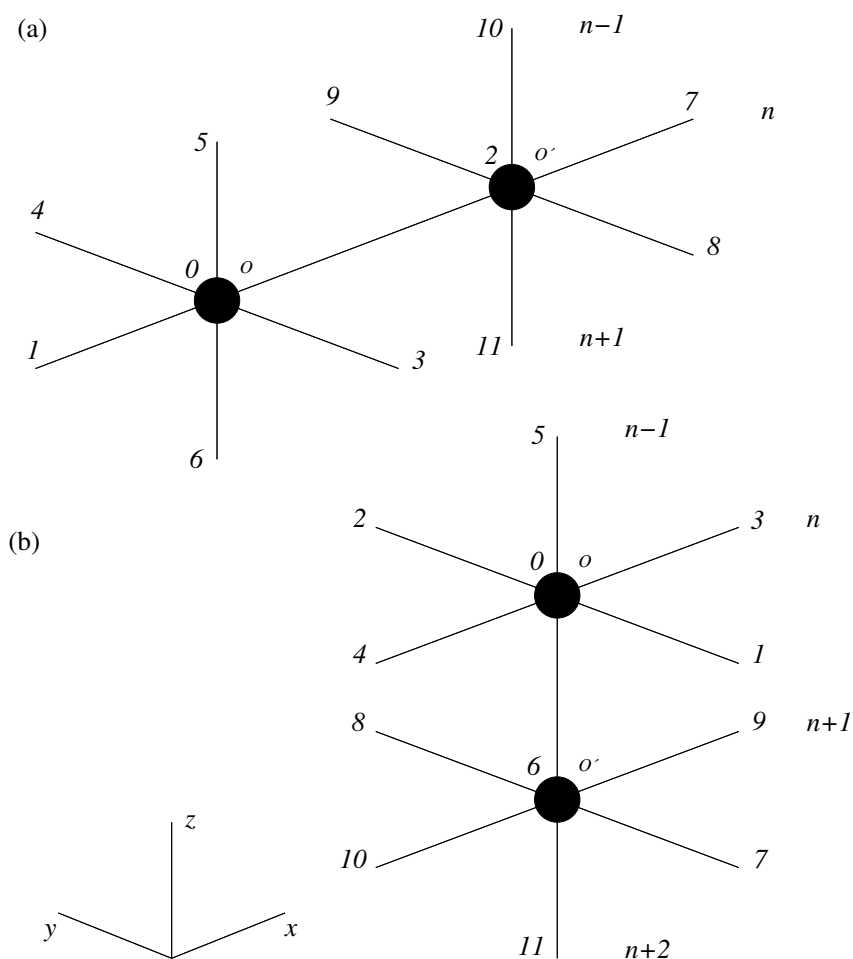


Figura 4.2: Representação do esquema de interação para duas impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro. Podem ser alinhadas ao longo do eixo x (a) ou do eixo z (b).

A Fig.(4.3) mostra o espectro local de ondas de spin para impurezas dispostas como no caso X em função da constante de acoplamento entre uma das impurezas (J_o) e seus vizinhos localizados nos sítios puros, mantendo constante o parâmetro de troca entre a outra impureza e seus vizinhos. Para esse caso consideramos $J_{o'} = 1.5J$ e $J_I = 0.25J$ para $n = 1$, e $J_{o'} = 2.5J$, $J_I = 0.25J$ para $n = 2$ e 3 . Os parâmetros de campo foram $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e para o parâmetro de temperatura fizemos $T = 2.5J/k_B$ em todos os casos. Os três conjuntos de ramos correspondem aos casos nos quais as impurezas estão localizadas nas camadas 1 (linha sólida), 2 (linha tracejada) e 3 (linha pontilhada). Os modos de impurezas podem ser classificados como modos ressonantes, se suas frequências estão dentro da banda de volume, e modos de impurezas, cujas frequências estão fora da

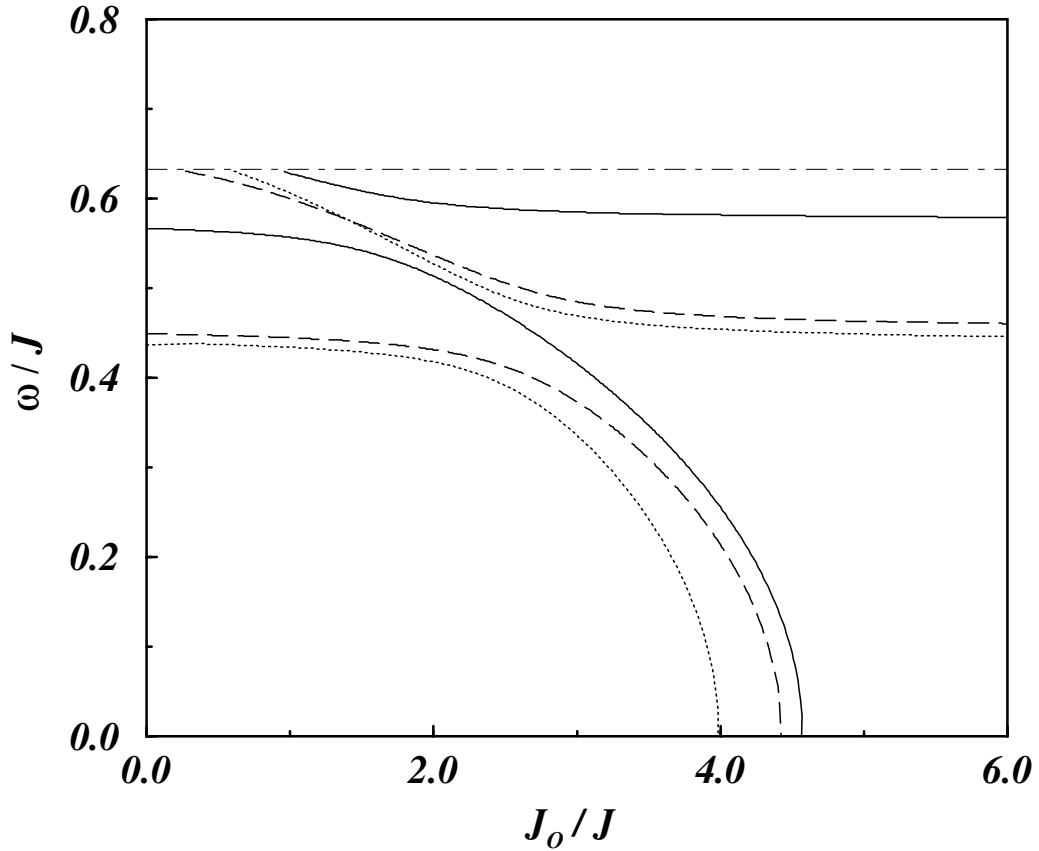


Figura 4.3: Frequências das ondas de spin relativas às impurezas localizadas como uma função do parâmetro de troca J_o , para o caso X , com $h_o = h_o' = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_o' = 1.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando as duas impurezas estão na superfície (linha sólida), e $J_o' = 2.5J$, $J_I = 0.25J$ quando ambas estão na segunda camada (linha tracejada) e na terceira camada (linha pontilhada).

banda de volume. Neste trabalho consideramos apenas os modos que podem ser facilmente detectados experimentalmente. Portanto, restringiremos nossos estudos apenas aos modos que estão fora dos limites de frequências de ondas de spin de volume.

O limite inferior da banda de volume está representado nos gráficos pela linha horizontal ponto-tracejada. Como nos resultados para uma impureza, apresentados na Ref. [31], os modos locais de ondas de spin são obtidos em função da intensidade do acoplamento de troca com o meio puro. Neste trabalho, entretanto, a existência de uma segunda impureza causa o aparecimento de um novo modo localizado. Na ausência de acoplamento entre as impurezas, o gráfico apresenta uma linha horizontal (para a frequência da impureza com J' constante) sobreposta à curva que mostra o decaimento da frequência associada

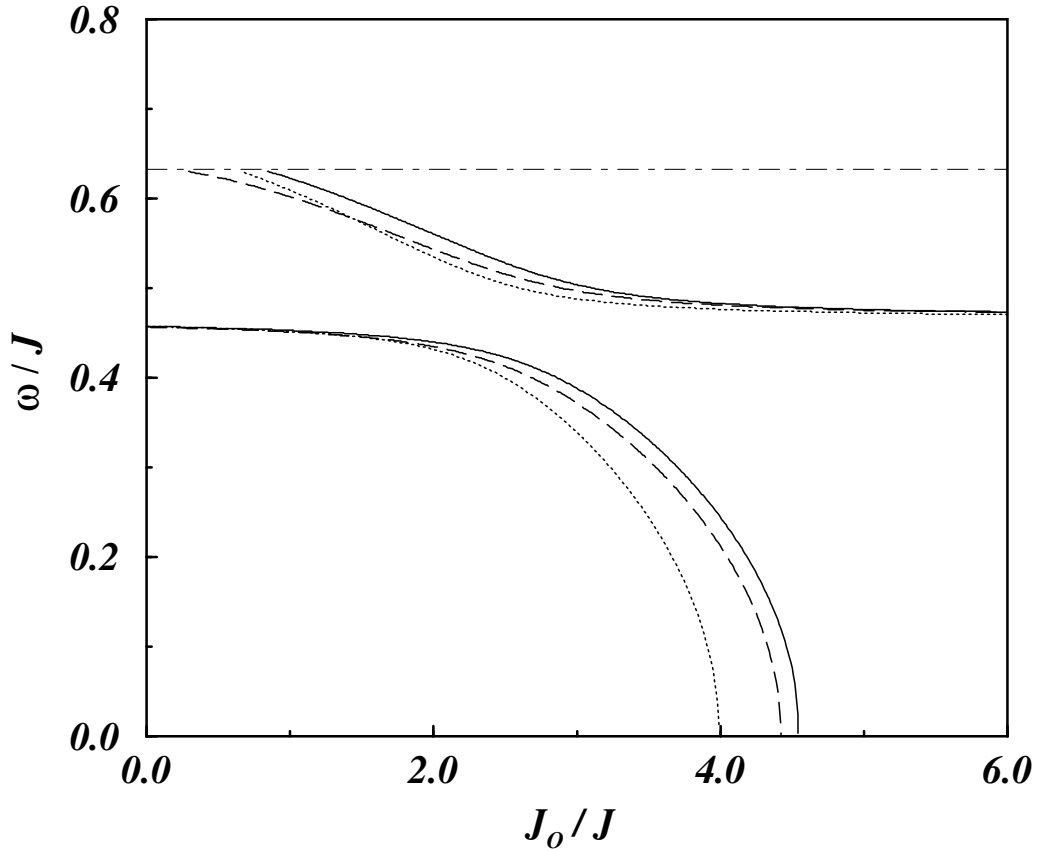


Figura 4.4: Freqüências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca J_o da impureza o (localizada no sítio acima da impureza o'), caso Z , com $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_{o'} = 2.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando a impureza o está localizada na superfície (linhas sólidas), na segunda (linhas tracejadas) e terceira camada (linhas pontilhadas).

à segunda impureza, o qual emerge do limite inferior da banda de volume para pequenos valores de J_o . O acoplamento de troca gera então um efeito de repulsão entre os modos quando $J_o \approx J_{o'}$. Como esperado, a magnitude desse efeito depende da intensidade do acoplamento entre as impurezas. Quando as duas impurezas estão na superfície ocorre uma diminuição do número de coordenação, isto causa um aumento no efeito repulsivo entre os modos, comparado com os casos nos quais as impurezas estão nas camadas 2 e 3. Quando as impurezas estão localizadas abaixo da terceira camada, os resultados não mostram uma dependência apreciável da posição, dizemos então que esses resultados correspondem a impurezas localizadas no volume. Isto é uma consequência do curto alcance da interação de troca nesse sistema.

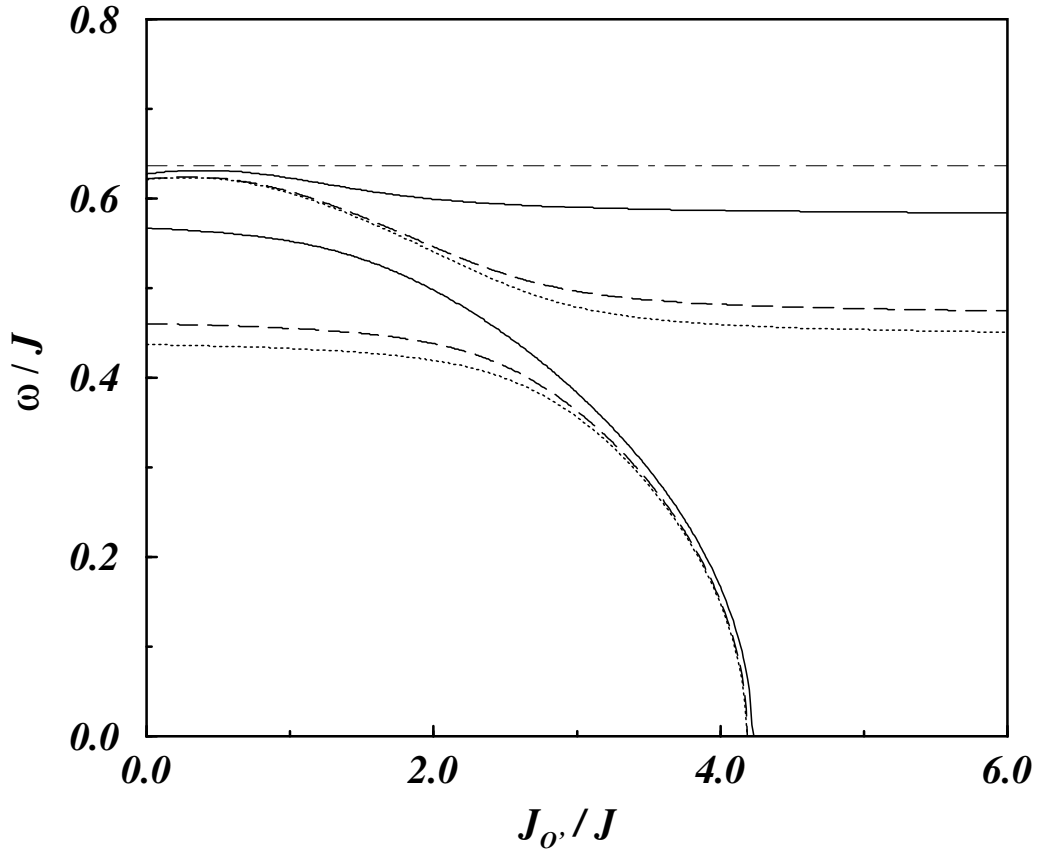


Figura 4.5: Frequências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca $J_{o'}$ da impureza o' (localizada no sítio abaixo da impureza o), caso Z , com $h_o = h_{o'} = 0.65h$ e $T = 2.5J/k_B$. Os parâmetros são $J_o = 1.5J$ e $J_I = 0.25J$ quando a impureza o' está localizada na segunda camada (linhas sólidas), e $J_o = 2.5J$, $J_I = 0.25J$ quando a mesma está na terceira camada (linhas tracejadas) e quarta camada (linhas pontilhadas).

O efeito do alinhamento das impurezas é mostrado na Fig.(4.4), a qual apresenta resultados para frequências de ondas de spin no caso Z , como uma função da constante de troca da impureza o com seus vizinhos, enquanto os demais parâmetros permanecem constantes. Para $n = 2$ e 3 os resultados são semelhantes aos obtidos para o caso X , a menos de uma pequena diferença nas frequências para os respectivos modos. Para $n = 1$, entretanto, a diferença entre os ramos é mais pronunciada. Os resultados mostram que a influência da orientação das impurezas torna-se particularmente mais pronunciado quando elas estão na superfície. Isto é uma consequência do menor número de vizinhos, o que modifica a energia de troca na superfície.

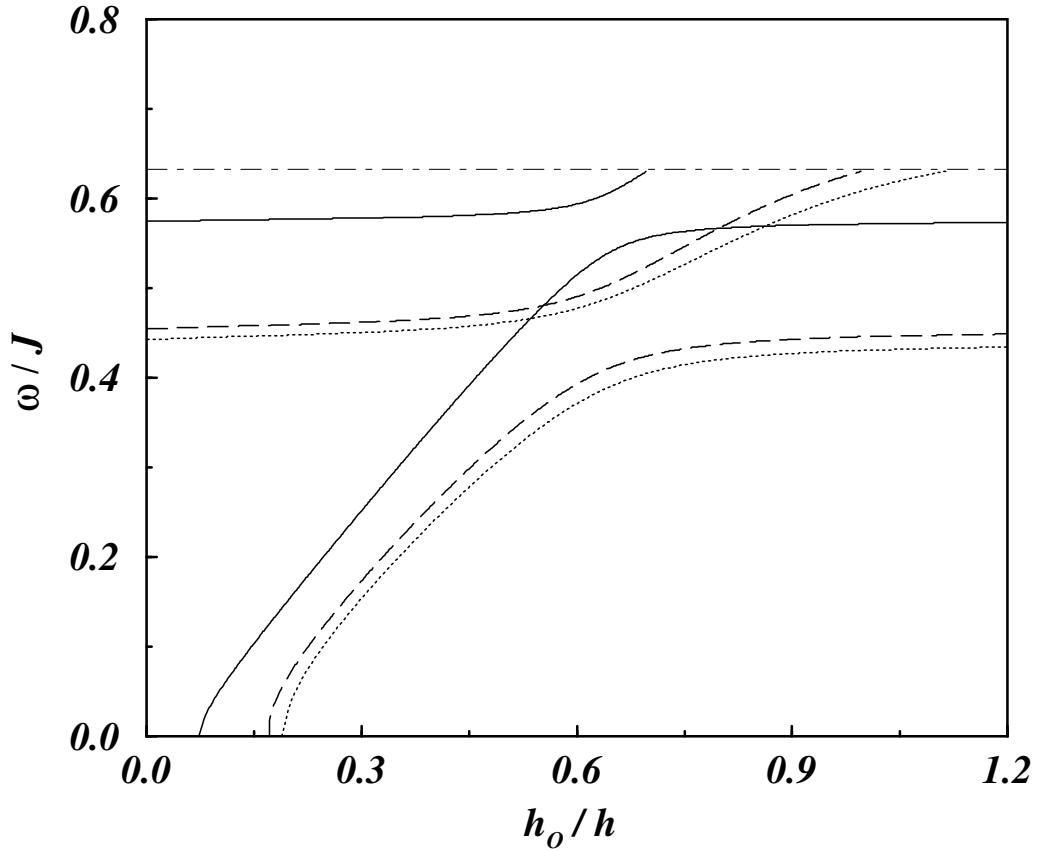


Figura 4.6: Frequências localizadas das ondas de spin em função campo local h_o em uma das impurezas, caso X . Os parâmetros são os mesmos dos gráficos anteriores. Os resultados são obtidos para ambas as impurezas na superfície (linhas sólidas), segunda (linha tracejada) e terceira camada (linhas pontilhadas).

A Fig.(4.5) mostra resultados para a frequência como uma função do parâmetro de troca $J_{o'}$ entre a impureza o' (localizada no sítio abaixo da impureza o) e seus vizinhos no volume, caso Z , mantendo os mesmos parâmetros anteriores. Neste caso, a impureza considerada pode estar localizada na segunda, terceira ou quarta camada. Em contraste com os resultados apresentados para a impureza o , Fig.(4.4), os ramos de frequência não emergem da banda de volume para pequenos valores do parâmetro de troca. Além disso, quando a impureza o' está localizada na segunda camada (linha sólida), as curvas são significativamente diferentes em comparação ao caso no qual as duas impurezas estavam na superfície. Este efeito é uma consequência da modificação do parâmetro de troca da impureza o' nas duas configurações.

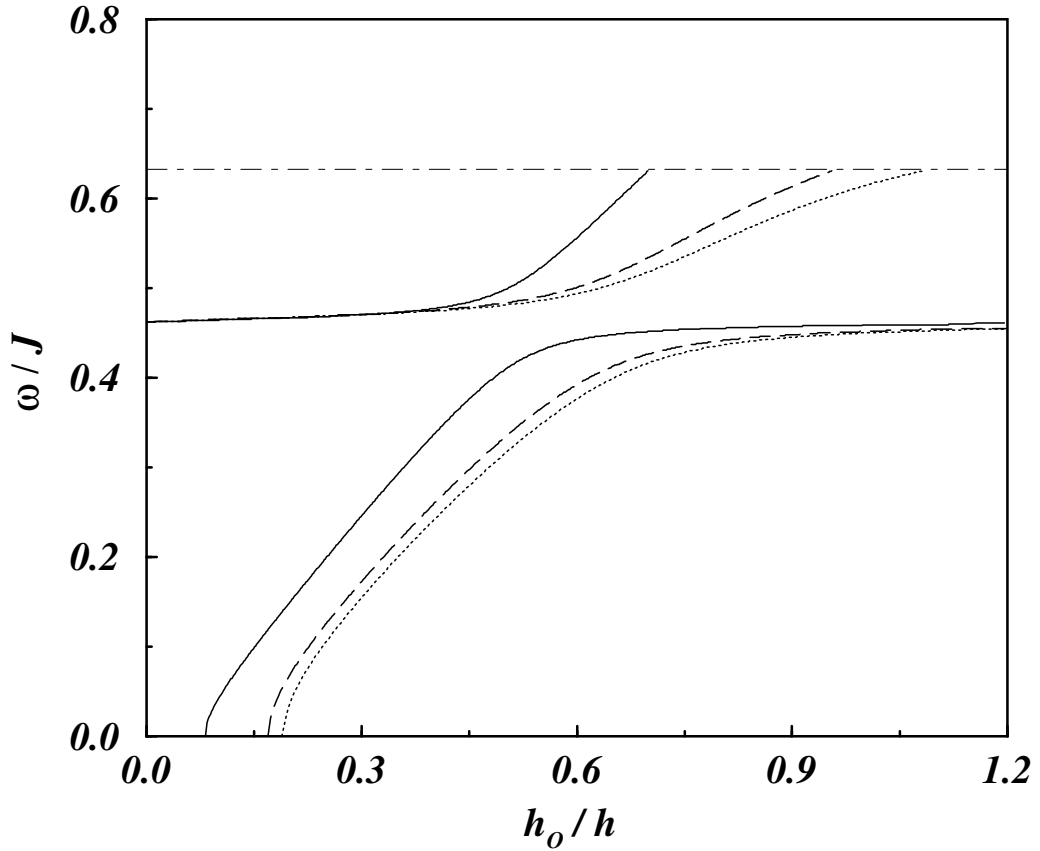


Figura 4.7: Frequências localizadas das ondas de spin em função campo local h_o na impureza o (localizada no sítio acima da impureza o'), caso Z . Os parâmetros são os mesmos dos gráficos anteriores. Os resultados são obtidos para ambas as impurezas na superfície (linhas sólidas), segunda (linha tracejada) e terceira camada (linhas pontilhadas).

A influência do campo local é mostrada nas figuras que seguem. A Fig.(4.6) mostra a frequência local das ondas de spin como uma função do campo local h_o aplicado numa das impurezas, para o caso X . Os demais parâmetros são os mesmos dos gráficos anteriores. Os resultados foram obtidos para $n = 1$ (linhas sólidas), $n = 2$ (linhas tracejadas) e $n = 3$ (linhas pontilhadas). O gráfico mostra o efeito de repulsão entre os modos, devido ao acoplamento entre as impurezas. Também fica evidente a diferença entre os modos localizados para o caso $n = 1$ e os casos para $n = 2$ e $n = 3$, devido à diferença entre o parâmetro de troca na superfície e no volume. Para campos maiores que $h_o = 0.69 h$ ($n = 1$), $h_o = 0.99 h$ ($n = 2$) e $h_o = 1.11 h$ ($n = 3$), observa-se que a frequência dos modos localizados penetra na banda de volume, transformando-se então em modos ressonantes.

Um gráfico semelhante é mostrado na Fig.(4.7), para o caso Z . Os resultados mostram

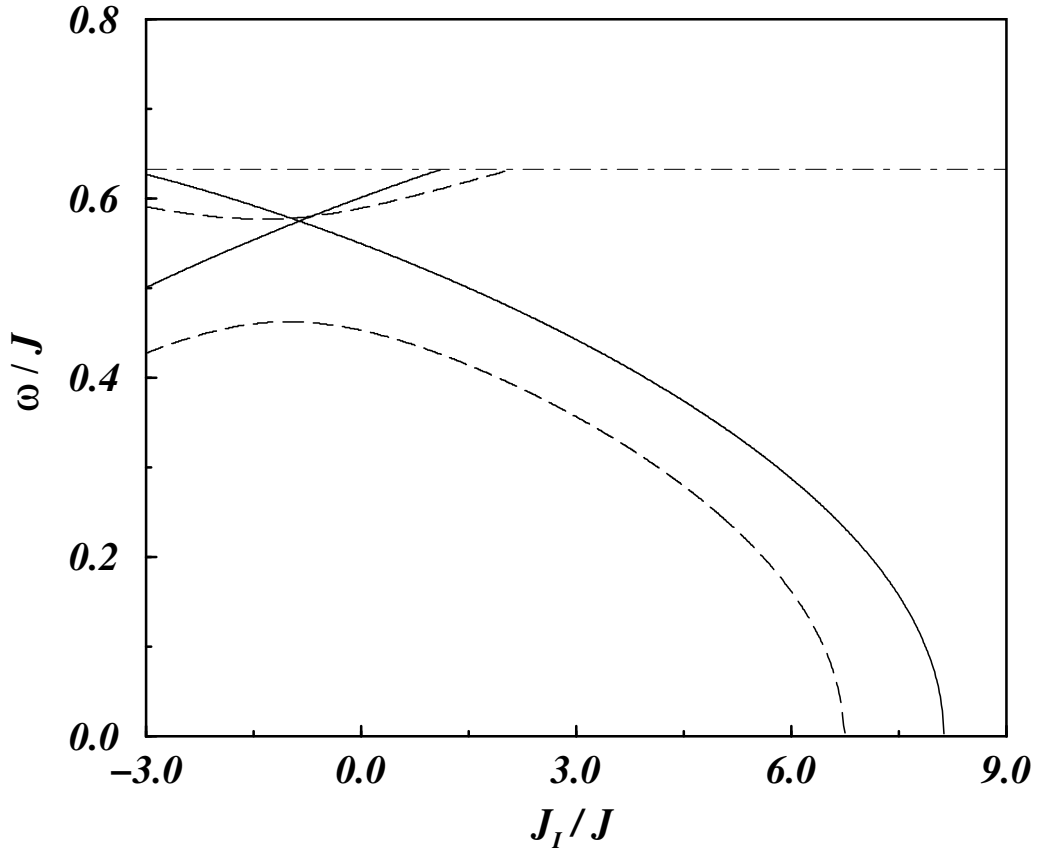


Figura 4.8: Frequências localizadas das ondas de spin em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas acopladas. O gráfico mostra resultados para ambos os casos, X (linha sólida) com as duas impurezas o e o' na superfície e Z (linha tracejada) com a impureza o na superfície e o' no sítio abaixo.

a frequência dos modos localizados como uma função do campo local na impureza o . Em contraste com a figura anterior, os ramos de mais alta frequência não apresentam diferença para valores de campo menores que $0.47h$, onde h é o campo local para sítios no volume. Por outro lado, os modos de alta frequência também tornam-se ressonantes para valores de campo local similares ao do caso X .

A Fig.(4.8) mostra o gráfico da frequência como função da constante de acoplamento (J_I) entre as impurezas. Gráfico mostra resultados para ambos os casos X e Z . Os resultados são obtidos para acoplamentos ferromagnético ($J_I > 0$) e antiferromagnético ($J_I < 0$) entre as impurezas. Para o caso X , nós consideramos ambas as impurezas na superfície do sistema, enquanto no caso Z as impurezas o e o' estão localizadas na superfície e na camada imediatamente abaixo. O comportamento da frequência é bastante

diferente nos dois casos, com o resultado para o caso Z mostrando uma grande diferença em relação ao outro caso. Observa-se que no caso X ocorre um cruzamento entre os modos para $J_I = -0.86J$. No caso Z , observa-se que mesmo não ocorrendo o cruzamento entre os modos, o modo de mais baixa frequência apresenta um máximo em $J_I = -1.11J$ enquanto o modo de alta frequência apresenta um mínimo em $J_I = -1.37J$.

5 *Impurezas acopladas em um filme ferromagnético*

5.1 Introdução

No Capítulo 4, estudamos o espectro de excitações para duas impurezas vizinhas implantadas num ferromagneto semi-infinito. Determinamos a equação de movimento para as F.G. onde o sistema é descrito através do modelo de Ising com campo transversal. Obtemos resultados para dois casos. Caso *X*, com duas impurezas no eixo *x* e Caso *Z*, com duas impurezas no eixo *Z*. Os resultados para as frequências dos modos de defeitos como função do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos no material puro, do campo efetivo aplicado sobre as impurezas e do acoplamento de troca entre elas.

Neste Capítulo, estudaremos o espectro de ondas de spin relativas a impurezas localizadas para o caso contendo impurezas acopladas em um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. Estudaremos três casos com diferentes disposições para as impurezas implantadas no material puro. Caso 1: linha de impurezas acopladas na direção do eixo *z*, Caso 2: quatro impurezas no plano *xz* e Caso 3: quatro impurezas no plano *xy*.

5.2 Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto puro

5.2.1 Introdução ao modelo

Considere um filme ferromagnético com um par de superfícies paralelas na direção (001) e estrutura cúbica simples (constante de rede *a*). Semelhante ao visto na Fig.(5.1). Qualquer sítio da rede tem o vetor posição dado por

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = a(l, m, n), \quad (5.1)$$

com os inteiros *l*, *m* e *n* nos intervalos $-\infty < l, m < +\infty$ e $1 \leq n \leq N - 1$, respectivamente, onde $n = 1$ e $n = N - 1$ denotam as duas camadas de superfície e *N* é

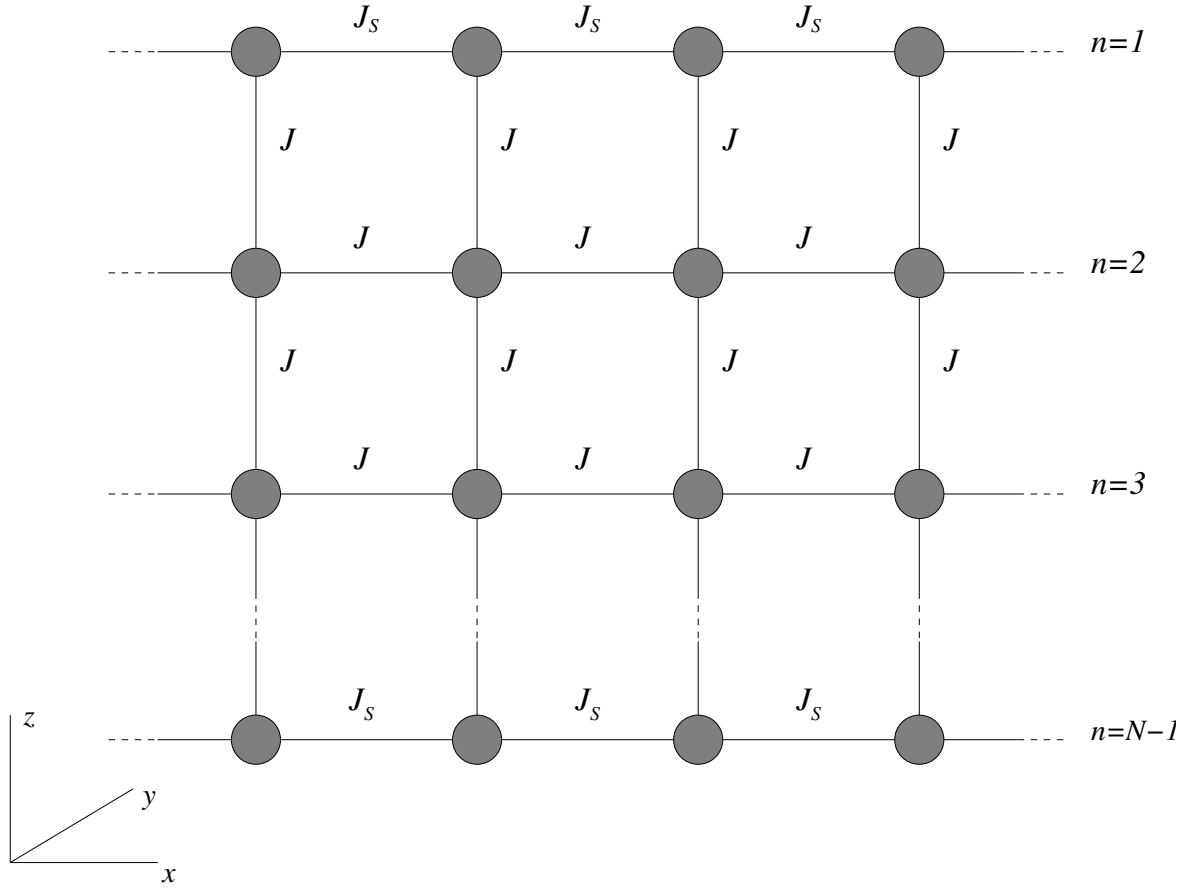


Figura 5.1: Esquema de interações para um filme ferromagnético puro. o campo transversal é aplicado na direção x .

um inteiro positivo.

O ferromagneto será representado pelo Hamiltoniano de Ising com campo transversal

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{l,m} J_{lm} S_l^z S_m^z - \sum_l h_l S_l^x, \quad (5.2)$$

onde, S_i^x e S_i^z são as componentes x e z do operador de spin no sítio i . $S = 1/2$ em todos os sítios, como no Capítulo 3. O duplo somatório deve ser feito sobre os pares de primeiros vizinhos e J_{ij} é a energia de troca entre eles, onde consideramos os valores $J_{ij} = J_S$, se ambos os vizinhos estiverem na camada de superfície e $J_{ij} = J$ no volume. O segundo termo na Eq.(5.2) descreve a interação do campo magnético transversal h_i com os operadores de spin no sítio i , com valores $h_i = h_S$ para sítios na camada de superfície e $h_i = h$ para sítios no volume.

5.2.2 Representação matricial

O formalismo matemático necessário para a análise quantitativa desse modelo segue, a rigor, o mesmo tratamento inicialmente realizado no Capítulo 3. Isso é evidenciado quando partimos da Eq.(3.21),

$$\mathbf{A}\mathbf{G}_{nn'}^0 = -\frac{\delta_{nn'}}{2\pi J} \quad (5.3)$$

No entanto, como o sistema é limitado, a exigência imposta pelo seu dimensionamento conduz a definições de matrizes finitas de ordem $N - 1$ determinadas pelo número de camadas do material. As séries de equações para a F.G. representadas pela equação acima podem ser escritas de forma matricial

$$\mathbf{A}^{(N-1)}[\mathbf{G}^0]^{(N-1)} = -\frac{\mathbf{1}}{2\pi J}. \quad (5.4)$$

Para o nosso caso,

$$\mathbf{A}^{(N-1)} = \begin{pmatrix} d + \Delta & -1 & 0 & \cdots & & & \\ -1 & d & -1 & \cdots & & & \\ 0 & -1 & d & \cdots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & \cdots & d & -1 & 0 \\ & & & & \cdots & -1 & d & -1 \\ & & & & \cdots & 0 & -1 & d + \Delta \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

onde os parâmetros d e Δ foram definidos anteriormente como:

$$d = -\frac{[\omega^2 - h^2 + 4hR^x J\gamma(\mathbf{q}_{\parallel})]}{hR^x J}, \quad (5.6)$$

$$\Delta = \frac{\omega^2(h_S R_S^x - hR^x) - hh_S(hR_S^x - h_S R^x)}{hh_S R^x R_S^x J} - 4\gamma_2(\mathbf{q}_{\parallel}) \left(\frac{J_S}{J} - 1 \right), \quad (5.7)$$

onde $R^x = \frac{1}{2} \tanh(h/2k_B T)$ e $R_S^x = \frac{1}{2} \tanh(h_S/2k_B T)$. É conveniente escrever a matriz $\mathbf{A}^{(N-1)}$ como a soma de duas matrizes

$$\mathbf{A}^{(N-1)} = [\mathbf{A}^0]^{(N-1)} + \Delta^{(N-1)} \quad (5.8)$$

onde

$$[\mathbf{A}^0]^{(N-1)} = \begin{pmatrix} d & -1 & 0 & \cdots & & & & & & & \\ -1 & d & -1 & \cdots & & & & & & & \\ 0 & -1 & d & \cdots & & & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & & & & & \\ & & & & \vdots & \vdots & \vdots & & & & \\ & & & \cdots & d & -1 & 0 & & & & \\ & & & \cdots & -1 & d & -1 & & & & \\ & & & \cdots & 0 & -1 & d & & & & \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

e

$$\Delta^{(N-1)} = \begin{pmatrix} \Delta & 0 & \cdots & & & & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & & & & & & & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & & & & & \\ & & \cdots & 0 & 0 & & & & & & \\ & & \cdots & 0 & \Delta & & & & & & \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

$[\mathbf{A}^0]^{(N-1)}$ é uma matriz tridiagonal não perturbada. a matriz Δ , também tri-diagonal, contém efeitos perturbativos causados por superfícies ou por camadas de impurezas [58]. No nosso caso, a matriz Δ contém apenas efeitos de superfície.

A solução formal da equação matricial dada pela Eq.(5.4) pode ser escrita como:

$$[\mathbf{G}^0]^{(N-1)} = - \left(\frac{1}{2\pi J} \right) \left[(\mathbf{1}^{(N-1)} + \mathbf{B}^{(N-1)} \Delta^{(N-1)})^{-1} \right] \mathbf{B}^{(N-1)}, \quad (5.11)$$

onde $\mathbf{B}^{(N-1)}$ é a inversa da matriz $[\mathbf{A}^0]^{(N-1)}$ e $\mathbf{1}^{(N-1)}$ denota uma matriz unitária de ordem $(N-1)$.

A dedução da matriz $\mathbf{B}^{(N-1)}$, feita usando o método iterativo de Gauss-Seidel [59], está nos Apêndices B e D. Como resultado obtemos:

$$B_{nn'}^{(N-1)} = \frac{x^{n+n'} - x^{|n-n'|} + x^{2N-(n+n')} - x^{2N-|n-n'|}}{(1-x^{2N})(x-x^{-1})} \quad (5.12)$$

onde x é um parâmetro complexo definido como

$$x + x^{-1} = d \quad (5.13)$$

e $|x| < 1$. No limite de $N \rightarrow \infty$, o fator envolvendo x^{2N} na Eq.(5.12) vai a zero, e nós então recuperamos a expressão para a matriz inversa para o caso de um ferromagneto semi-infinito (veja Apêndice C)[60, 61].

Para obter os elementos da inversa da matriz $(\mathbf{1}^{(N-1)} + \mathbf{B}^{(N-1)} \Delta^{(N-1)})$, denotados

por $M_{n,n'}^{(N-1)}$, a qual pode ser escrita de uma forma particionada como

$$\mathbf{M}^{(N-1)} = \left(\begin{array}{c|c|c} M_{1,1} & \mathbf{0} & M_{1,N-1} \\ \hline M_{2,1} & & M_{2,N-1} \\ \vdots & \mathbf{1} & \vdots \\ \hline M_{N-2,1} & & M_{N-2,N-1} \\ \hline M_{N-1,1} & \mathbf{0} & M_{N-1,N-1} \end{array} \right), \quad (5.14)$$

omitindo-se a partir daqui o superíndice $(N-1)$. Usando as Eqs.(5.8) e (5.12), podemos escrever a relação de recorrência:

$$M_{n,n'} = \delta_{n,n'} + \left[\delta_{1,n'} \frac{x^n - x^{2N-n}}{1 - x^{2N}} + \delta_{N-1,n'} \frac{x^N (x^n - x^{2N-n})}{1 - x^{2N}} \right] \Delta, \quad (5.15)$$

com $1 \leq n, n' \leq N-1$.

A inversa da matriz $[\mathbf{M}]$ pode agora ser escrita como:

$$[\mathbf{M}^{(N-1)}]^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \left(\begin{array}{c|c|c} M_{1,1}^{-1} & \mathbf{0} & -M_{1,N-1}^{-1} \\ \hline M_{2,1}^{-1} & & M_{2,N-1}^{-1} \\ \vdots & \mathbf{1} & \vdots \\ \hline M_{N-2,1}^{-1} & & M_{N-2,N-1}^{-1} \\ \hline -M_{N-1,1}^{-1} & \mathbf{0} & M_{N-1,N-1}^{-1} \end{array} \right) \quad (5.16)$$

onde $\det \mathbf{M}^{(N-1)} = (M_{1,1})^2 - (M_{1,N-1})^2$. As relações de recorrência para os elementos da inversa da matriz $\mathbf{M}^{(N-1)}$ são dados por:

$$M_{n,n'}^{-1} = \frac{\delta_{n,n'} M_{1,1} - \delta_{N-1,n'} M_{1,N-1}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \quad \text{para } n = 1, \quad (5.17)$$

$$M_{n,n'}^{-1} = \delta_{n,n'} + [\delta_{1,n'} + \delta_{N-1,n'}] \times \left\{ \frac{-M_{n,n'} M_{N-n',N-n'} + M_{N-n',n'} M_{n,N-n'}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \right\} \quad \text{para } 2 \leq n \leq N-2, \quad (5.18)$$

$$M_{N-1,n'}^{-1} = \frac{-\delta_{1,n'} M_{N-1,1} + \delta_{n',N-1} M_{N-1,N-1}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \quad \text{para } n = N-1, \quad (5.19)$$

onde em todas as relações, $1 \leq n' \leq N-1$.

Portanto, para obtermos os termos do lado direito da Eq.(5.11) multiplicamos os elementos das inversas dados pelas Eqs.(5.17)-(5.19) pelos elementos da matriz $\mathbf{B}^{(N-1)}$, dados pela Eq.(5.12). Como resultado, obtemos os elementos para a função de Green:

$$G_{1,n'} = \frac{-1}{2\pi J} \left\{ \frac{M_{1,1} B_{1,n'} - M_{1,N-1} B_{N-1,n'}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \right\} \quad 1 \leq n' \leq N-2, \quad (5.20)$$

$$G_{n,n'} = \frac{-1}{2\pi J} \left\{ B_{n,n'} + \frac{-M_{n,1}M_{N-1,N-1} + M_{N-1,1}M_{n,N-1}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} B_{1,n'} - \frac{M_{n,N-1}M_{1,1} - M_{1,N-1}M_{n,1}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} B_{N-1,n'} \right\} \quad 2 \leq n, n' \leq N-2, \quad (5.21)$$

$$G_{N-1,n'}^{-1} = \frac{-1}{2\pi J} \left\{ \frac{M_{N-1,1}B_{1,n'} + M_{N-1,N-1}B_{N-1,n'}}{\det \mathbf{M}^{(N-1)}} \right\} \quad 2 \leq n' \leq N-1, \quad (5.22)$$

onde $1 \leq n, n' \leq N-1$.

5.3 Modelo e formalismo de F.G. para um ferromagneto contendo impurezas

Para introduzir os termos que incluem informações sobre os sítios com impurezas, convém reescrever o Hamiltoniano como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$, onde \mathcal{H}_0 é o Hamiltoniano para um ferromagneto puro e \mathcal{H}_I corresponde à perturbação causada pela inserção da impureza, dado por

$$\mathcal{H}_I = \mathcal{H}_{od} + \mathcal{H}_{oo'}, \quad (5.23)$$

onde os termos \mathcal{H}_{od} descrevem o acoplamento de troca entre uma impureza num dado sítio indiciado o e seus vizinhos no material puro. Estes termos podem ser escritos como

$$\mathcal{H}_{od} = - \sum_o \left[(J_o - J) \sum_d S_d^z S_o^z - (h_o - h) S_o^x \right], \quad (5.24)$$

$$\mathcal{H}_{oo'} = - \sum_{o,o'} (J_I - J) S_o^z S_{o'}^z, \quad (5.25)$$

onde o índice d se refere aos sítios puros vizinhos à impureza o . O acoplamento de troca assume os valores $J_o = J'$ para a interação entre uma impureza e seus vizinhos no material puro e $J_o = J'_S$ se a impureza e seus vizinhos estão na superfície. O termo $\mathcal{H}_{oo'}$ na Eq.(5.25) expressa a interação de troca entre as duas impurezas vizinhas. A contribuição Zeeman na Eq.(5.24) descreve o efeito do campo magnético transversal h_o sobre as impurezas, pode assumir os valores h'_S e h' se os sítios forem localizados na superfície ou no volume do material, respectivamente.

Para obter o espectro de excitação para esse sistema, nós estendemos o formalismo para o caso de uma impureza simples [31], mostrado na última seção do Capítulo 3. Nós iniciamos definindo a F.G. $\langle\langle S_l^\alpha; S_m^\beta \rangle\rangle_\omega$, onde α e β são as componentes dos operadores de spin e ω é a frequência. Neste trabalho, usamos a F.G. retardada $G_{lm}(\mathbf{q}_\parallel, \omega) = \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega$. Esta função satisfaz a equação de movimento para os operadores de spin [29]

$$\omega \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle[S_l^z, S_m^z]\rangle + \langle\langle [S_l^z, \mathcal{H}]; S_m^z \rangle\rangle_\omega. \quad (5.26)$$

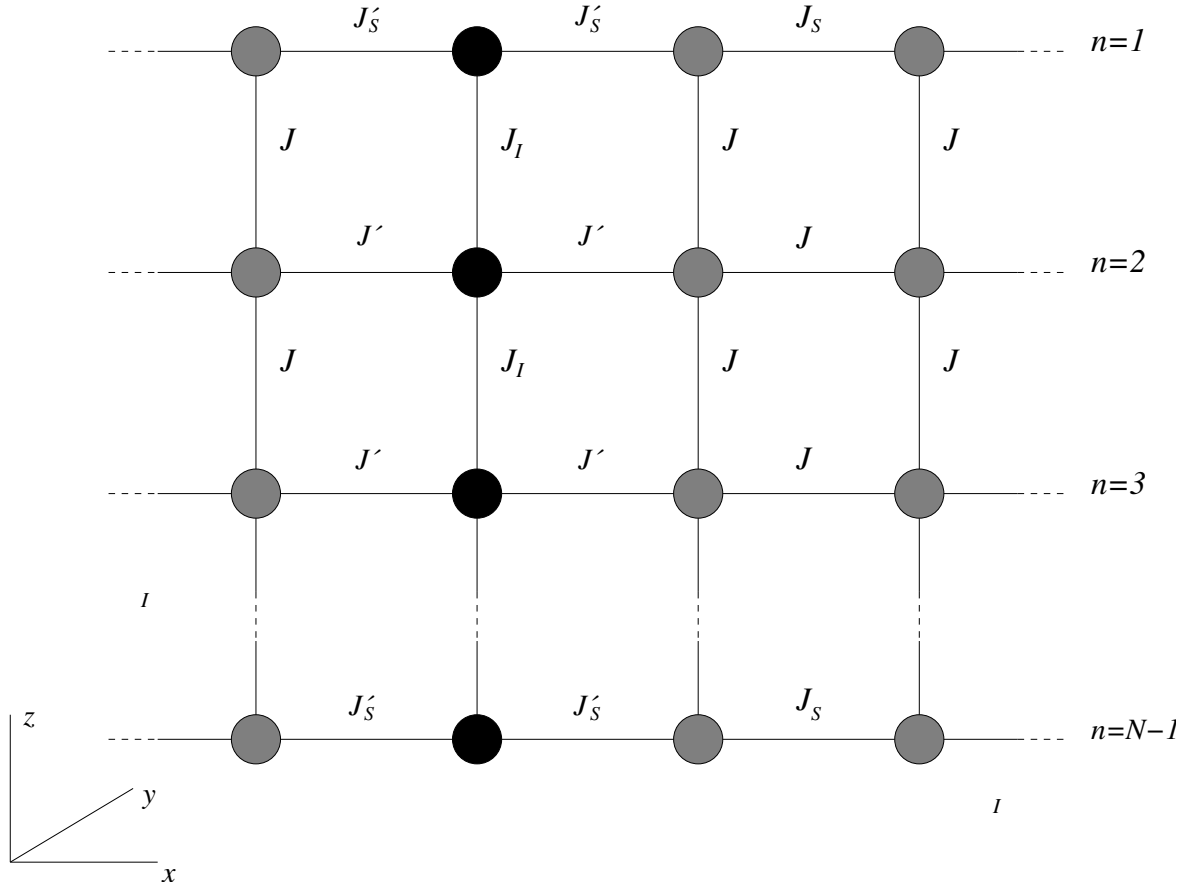


Figura 5.2: Representação do esquema de interação para uma linha de impurezas vizinhas em um filme ferromagnético. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.

A F.G. para um sistema puro pode ser obtida resolvendo-se a equação acima com \mathcal{H} substituído por \mathcal{H}_0 . A solução, bastante conhecida na literatura [30], a qual descreve um ferromagneto de Ising semi-infinito, ou seja, com simetria translacional paralela à superfície, é dada por

$$\begin{aligned}
 G_{lm}^0(\omega) &\equiv \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
 &= -\frac{1}{M} \sum_q G_{\mathbf{q}\parallel}^0(\omega) \exp[\mathbf{q}\parallel \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)],
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

onde os vetores \mathbf{r}_l e \mathbf{r}_m indicam as posições para os sítios l e m , $\mathbf{q}\parallel \equiv (q_x, q_y)$ é um vetor de onda no plano xy e M é o número de sítios numa camada paralela à superfície. As amplitudes de Fourier para esta função são dadas pelas Eqs.(5.20)-(5.22).

A existência de impurezas localizadas num meio ideal provoca a quebra de simetria translacional nesse sistema. Conseqüentemente, os cálculos para o sistema contendo impurezas são realizados no espaço real. Incluindo o efeito perturbativo causado pelas impurezas \mathcal{H}_I no Hamiltoniano e aplicando a Eq.(5.26), podemos obter uma nova F.G. $G_{lm}(\omega)$, a qual é obtida a partir da equação

$$A_{lj}G_{lm}(\omega) = \delta_{lj} - \frac{2\pi}{R_l^x} [P_{lj} - U_{lj} - U'_{lj}] G_{lm}(\omega) \quad (5.28)$$

onde

$$A_{lj} = \frac{\omega^2 - [h + \sum_o (h_o - h)\delta_{lo}]^2}{h + [h + \sum_o (h_o - h)\delta_{lo}]} \delta_{lj}, \quad (5.29)$$

$$P_{lj} = \sum_p J_{lp} R_l^x \delta_{lj} \quad (5.30)$$

$$U_{lj} = \sum_{o,d} (J_o - J) R_l^x [\delta_{lo}\delta_{dm} + \delta_{ld}\delta_{jo}], \quad (5.31)$$

$$U'_{lj} = \sum_{o'} (J_I - J) R_l^x [\delta_{lo'}\delta_{jo} + \delta_{lo}\delta_{jo'}]. \quad (5.32)$$

Onde os índices o e o' assumem valores que indiciam sítios contendo impurezas (veja Fig.(5.3)). O somatório na Eq.(5.31) refere-se ao termo de interação entre uma impureza no sítio o e seus quatro vizinhos puros indicados por d . Na Eq.(5.32) temos o termo de acoplamento entre impurezas vizinhas. Reescrevendo a Eq.(5.28) na forma matricial obtemos a equação de Dyson

$$[(\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega))^{-1} - \mathbf{V}(\omega)]\tilde{\mathbf{G}}(\omega) = \mathbf{I}, \quad (5.33)$$

onde $\tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)$ e $\tilde{\mathbf{G}}(\omega)$ são matrizes quadradas cujos elementos são dados por $(2\pi/R_l^x)G_{lm}^0(\omega)$ e $(2\pi/R_l^x)G_{lm}(\omega)$, respectivamente, com os elementos da matriz $G_{lm}^0(\omega)$ dados pelas Eqs.(5.20)-(5.22). \mathbf{I} é a matriz identidade e $\mathbf{V}(\omega)$ é o potencial efetivo devido ao termo de impurezas \mathcal{H}_I , com elementos

$$V_{lj}(\omega) = \frac{\omega^2 - h^2}{h} \delta_{lj} - A_{lj} - P_{lj} - U_{lj} - U'_{lj}. \quad (5.34)$$

A equação acima relaciona as matrizes que representam as funções de Green para um sistema puro $\mathbf{G}^0(\omega)$ com $\mathbf{G}(\omega)$ para um sistema contendo impurezas. O espectro de modos localizados pode então ser encontrado numericamente resolvendo-se a equação que

satisfaz a condição determinantal

$$\det[\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{G}}^0(\omega)\mathbf{V}(\omega)] = 0, \quad (5.35)$$

as quais representam os polos da F.G. $\mathbf{G}(\omega)$ para o sistema contendo impurezas. A seguir, apresentamos alguns resultados numéricos obtidos através desse método.

5.4 Resultados numéricos

Neste Capítulo, obtemos resultados que mostram o efeito sobre o espectro de ondas de spin ao introduzirmos impurezas em um filme ferromagnético, substituindo por exemplo o átomo de um sítio o por outro com propriedades magnéticas diferentes. Consideramos três casos com diferentes disposições geométricas. Caso 1: linha de impurezas no eixo z (Fig.(5.3)), perpendicular às superfícies; Caso 2: quatro impurezas no plano xz (Fig.(5.13)) e Caso 3: quatro impurezas no plano xy (Fig.(5.18)). Em todos os casos consideramos interações apenas entre primeiros vizinhos. Nossos resultados mostram o espectro de ondas de spin como uma função do campo efetivo (h') aplicado sobre as impurezas, do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos no material puro (J') e do parâmetro de troca entre duas impurezas vizinhas (J_I).

A princípio, o método de F.G. apresenta soluções para sistemas em qualquer temperatura. No entanto, limitamos nosso estudo a fase paramagnética. Nessa fase, $\langle S_r^z \rangle = 0$. Portanto, a orientação média dos spins ocorre na direção x . A média em S^x é obtida da teoria do campo médio onde, para sistemas com spin $\frac{1}{2}$, $\langle S_r^z \rangle = R_r^x \equiv \tanh(h_r/2k_B T_C)$, onde fizemos $h_r = h_S$ sítios puros na superfície, $h_r = h$, para sítios puros no volume e $h_r = h'$ para sítios com impurezas localizadas. Para um ferromagneto puro a temperatura crítica é dada por $\tanh(h/2k_B T_C) = h/3J$. Especificamente, nós consideramos a razão $J/h = 1.0$ e a temperatura T correspondente a $k_B T/h = 2.5$, já que $k_B T_C \approx 0.65$.

Como comentado anteriormente, os modos de impurezas podem ser classificados como ressonantes, se as frequências ocorrem dentro da banda de volume de um material puro, e modos de defeitos, que ocorrem fora da banda de volume. Em todos os casos mostramos apenas os modos de defeitos com frequências abaixo do limite inferior da banda de volume obtido para um material puro, $\omega/J \approx 0.63$, o qual é indicado nos gráficos pela linha horizontal ponto-tracejada.

Em todas as figuras tomamos como parâmetros básicos os valores: $J_S = 1.0J$ e $h_S = 1.0h$ para o acoplamento de troca e o campo na superfície do material puro, $J'_S = 1.5J$ e $J' = 2.5J$ para o acoplamento de troca entre uma impureza e seus vizinhos na superfície e no volume respectivamente. $J_I = 0.25J$ para o acoplamento de troca entre

duas impurezas. J e h são os parâmetros de troca e campo no volume do material puro. Para o campo efetivo atuando em todos os sítios que contém impurezas fizemos $h' = 0.65h$.

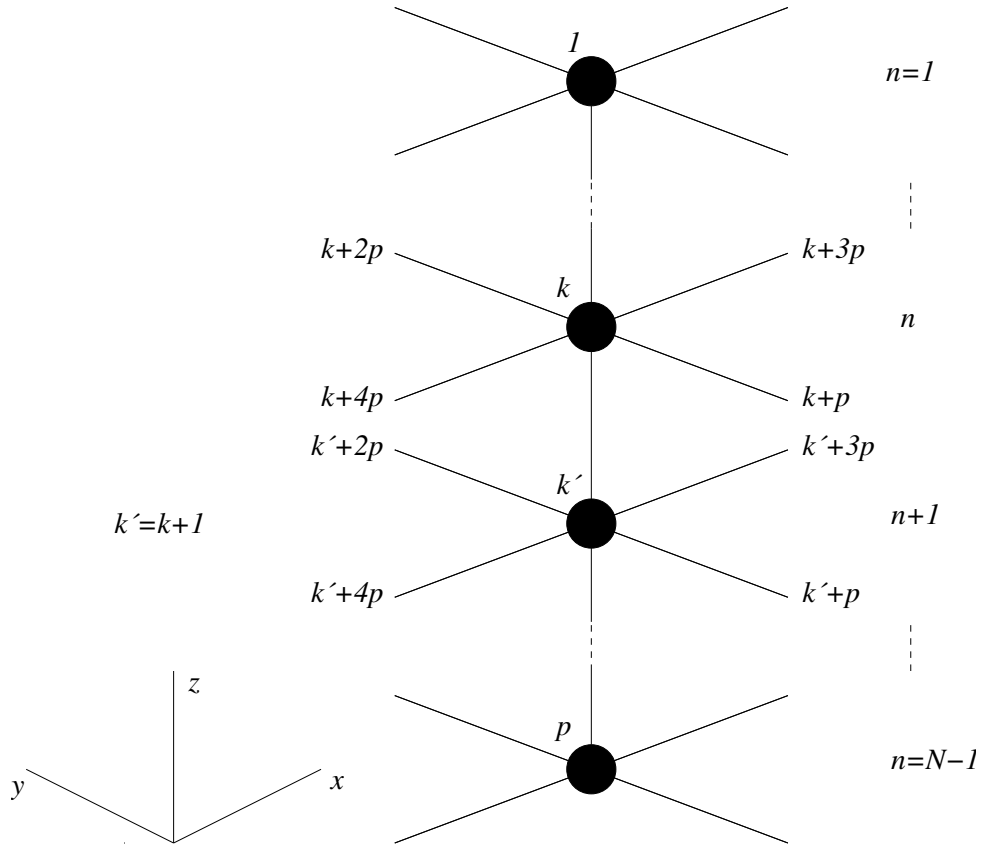


Figura 5.3: Representação do esquema de interação para uma linha de impurezas vizinhas em um ferromagneto de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus vizinhos do material puro, se primeiros vizinhos.

5.4.1 Caso 1: linha de impurezas acopladas na direção do eixo z

A Fig.(5.3) mostra o esquema de interação para uma linha contendo p impurezas vizinhas dispostas perpendicularmente às superfícies de um filme ferromagnético com $N - 1$ camadas ($N - 1 = p$). As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si ($k \rightleftharpoons k'$) e com seus primeiros vizinhos ($k \rightleftharpoons k + mp$, $m = 1, 2, 3, 4$) do material puro, onde consideramos interações apenas entre camadas vizinhas. Temos portanto uma impureza em cada superfície do filme ($n = 1$ e $n = N - 1$) e uma impureza em cada camada na região

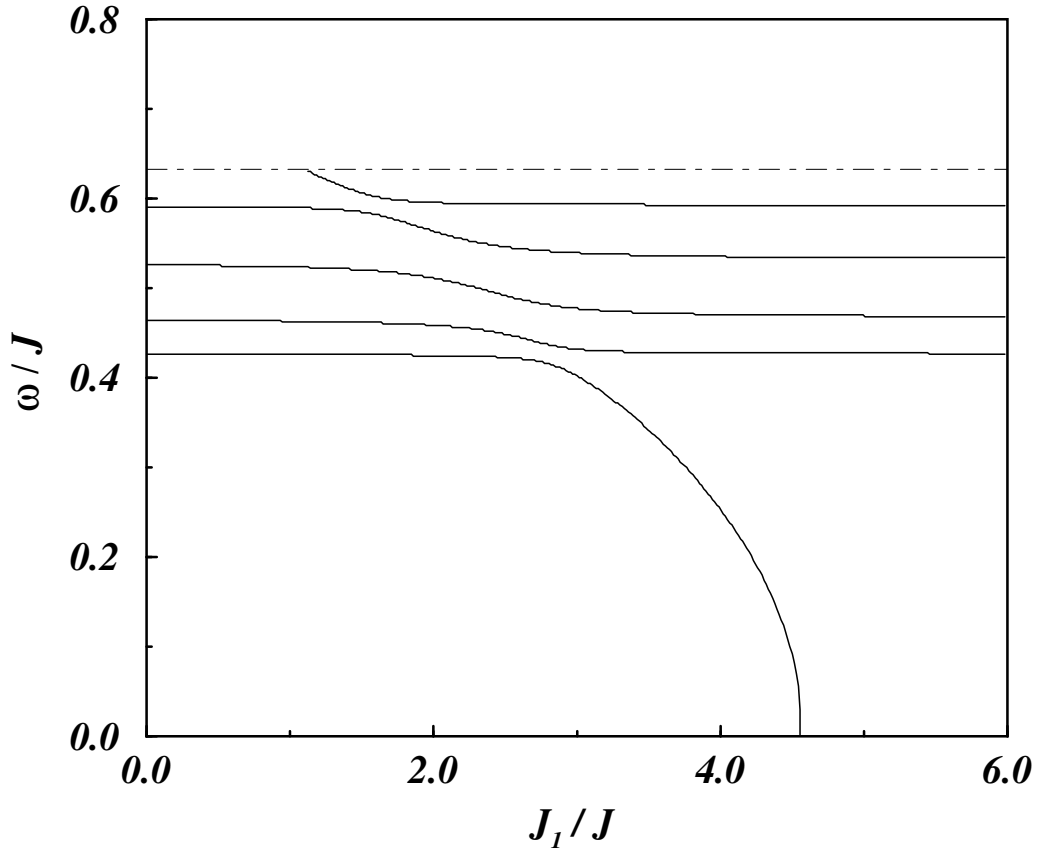


Figura 5.4: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

de volume ($2 \leq n \leq N - 2$). Neste caso, obtemos resultados numéricos para a frequência de ondas de spin calculada como função do parâmetro de troca (J_o) entre a impureza o e seus vizinhos no material puro, do acoplamento entre duas impurezas vizinhas J_I e do campo efetivo (h_o) que atua sobre uma dada impureza o .

A Fig.(5.4) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza localizada no sítio $o = 1$ e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com cinco camadas ($p = 5$). O parâmetro de troca entre as demais impurezas e seus vizinhos puros foi mantido constante, $J'_S = 1.5J$ se a impureza estiver na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. As impurezas estão acopladas entre si através de uma interação de troca constante $J_I = 0.25J$. O campo efetivo atuando sobre as impurezas é $h' = 0.65h$. O gráfico mostra um conjunto de cinco modos localizados

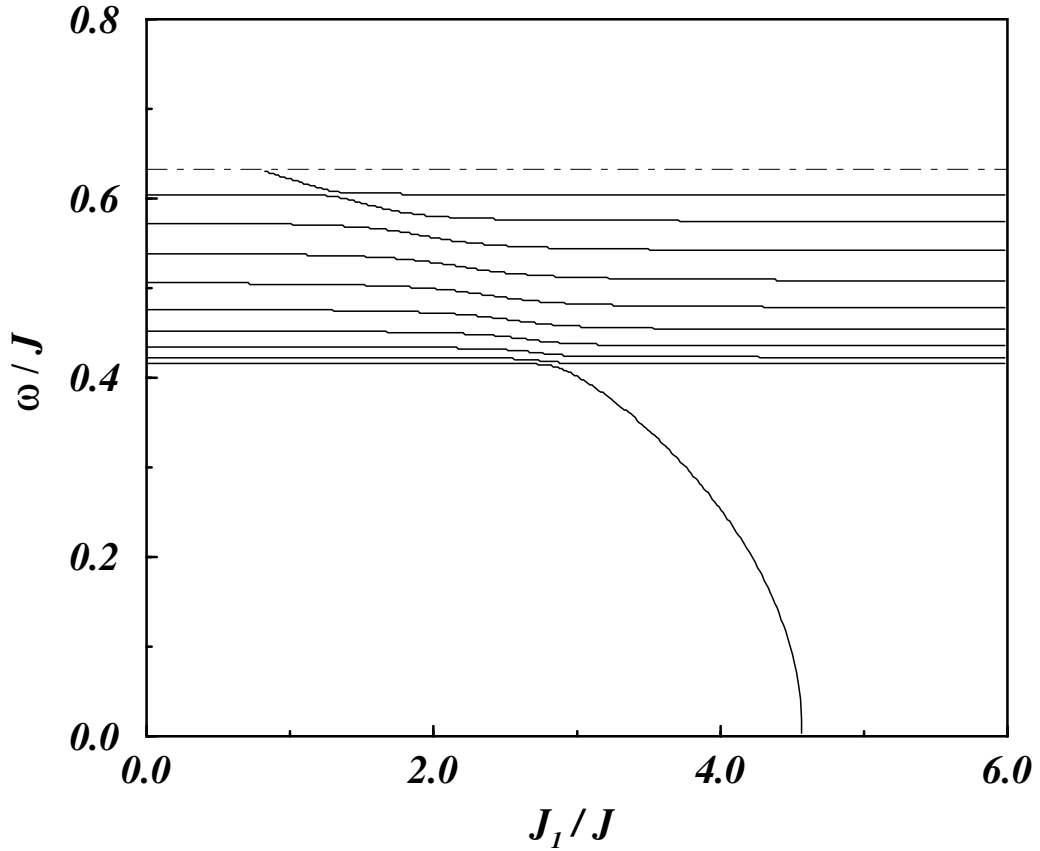


Figura 5.5: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 10 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

com frequências abaixo do limite inferior da banda de volume, sendo que para $J_1 < 1.1J$, apenas quatro modos têm frequências estabilizadas abaixo do limite inferior da banda de volume, para os valores de troca e campo considerados. Para $J_1 \approx 1.1J$ o quinto modo emerge da banda de volume com uma frequência que decai rapidamente. Esse modo então interage repulsivamente com os demais. A explicação está nos acoplamentos de troca entre as impurezas (J_I) e entre uma impureza e seus vizinhos puros (J'). A repulsão entre os modos é mais acentuada quando $1.3J \leq J_1 \leq 3.0J$. Para $J_1 \approx 2.7J$, o modo de mais baixa energia passa a decair rapidamente até se anular quando $J_1 \approx 4.6J$. Apartir daí teremos novamente quatro modos. Os limites de frequências para $J_1 = 0$ é o mesmo para $J_1 = 6.0J$.

Com o objetivo de observar o efeito do aumento do número de camadas nos limites de

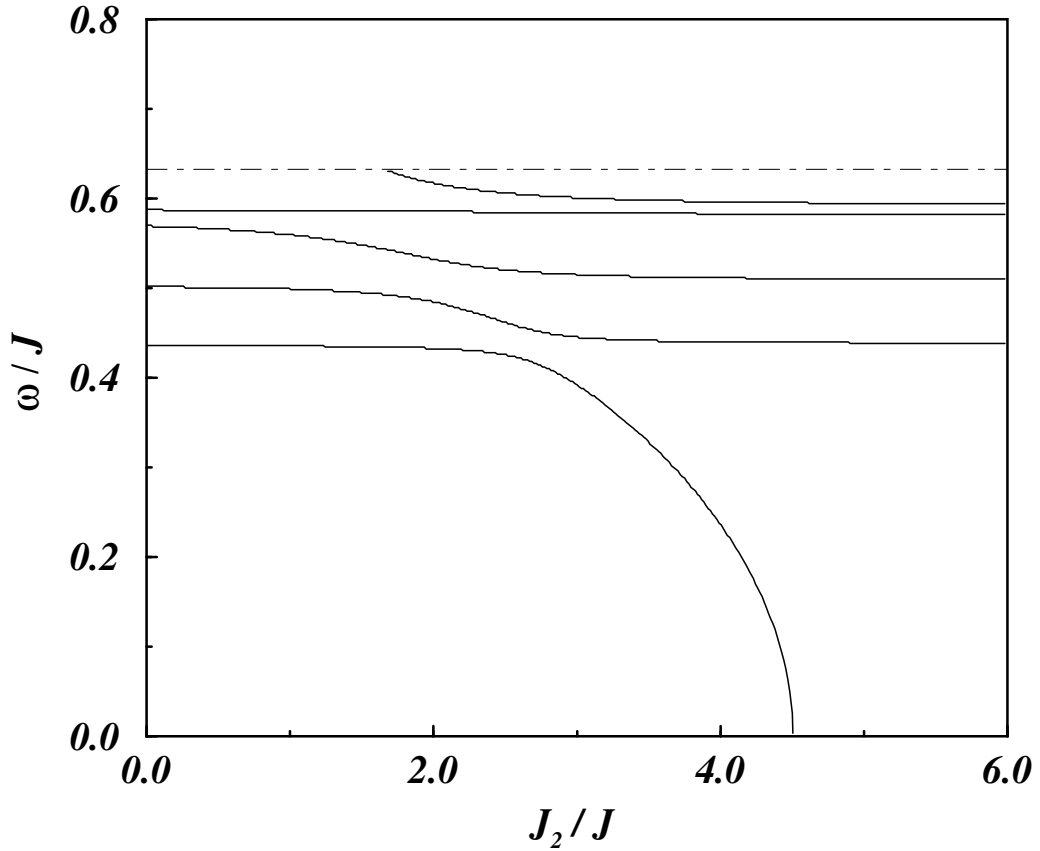


Figura 5.6: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_2 entre a impureza 2 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

troca e frequência analisados para um filme com cinco camadas, consideramos um filme ferromagnético com 10 camadas, Fig.(5.5). Verifica-se que apesar do aumento do número de modos o comportamento dos modos é análogo ao da Figura anterior. O aumento na densidade de modos, caracterizando a formação de uma banda, mantém praticamente invariante os valores de troca e frequência comentados anteriormente.

Na Fig.(5.6), temos as frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_2 entre a impureza 2 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas, onde os demais parâmetros, como na Fig.(5.4), foram mantidos constantes. Neste caso, verifica-se que um modo de frequência praticamente não é afetado pelo modo que emerge da banda de volume, para $J_2 \approx 1.7J$, com frequência pouco acima em relação aos casos anteriores, nem pelo modo com frequência imediatamente abaixo. Os demais modos

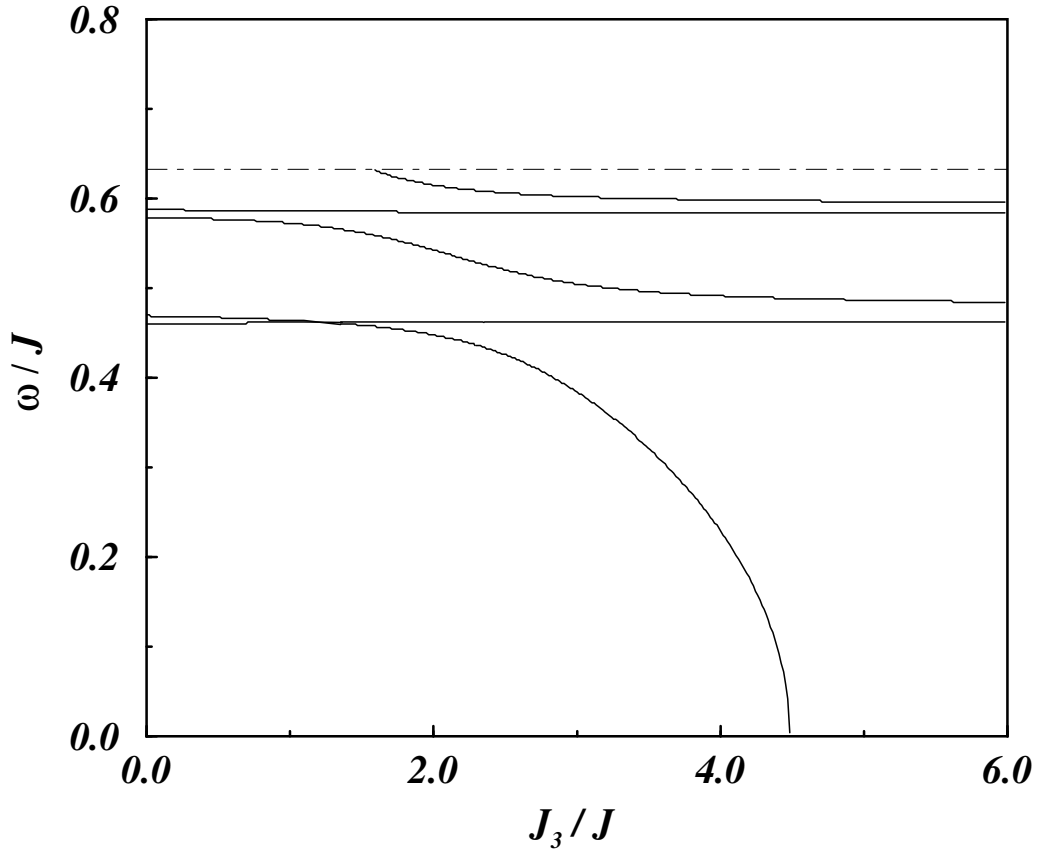


Figura 5.7: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_3 entre a impureza 3 e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com 5 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

interagem mais fortemente que no gráfico da Fig.(5.4) provocando um maior afastamento entre eles. Como um modo praticamente não interage com os demais, observa-se uma diminuição nos limites do espectro de frequências para $J_2 = 0$ e $J_2 = 6.0J$. Observamos um efeito semelhante na Fig.(5.7), onde variamos o parâmetro de troca entre a impureza que está na terceira camada J_3 e seus vizinhos no material puro, também para um filme com cinco camadas. Observa-se que os dois modos de maior frequência permanecem inalterados em relação ao gráfico anterior. Apenas três modos interagem repulsivamente, ou seja, dois modos têm energia constante. O efeito de afastamento entre os modos interagentes é maior que na Fig.(5.6). Neste caso, dois modos praticamente não interagem com os demais, observa-se novamente uma diminuição nos limites do espectro de frequências para $J_3 = 0$ e $J_3 = 6.0J$. O comportamento dos modos de frequência a partir de $J' \approx 2.7J$

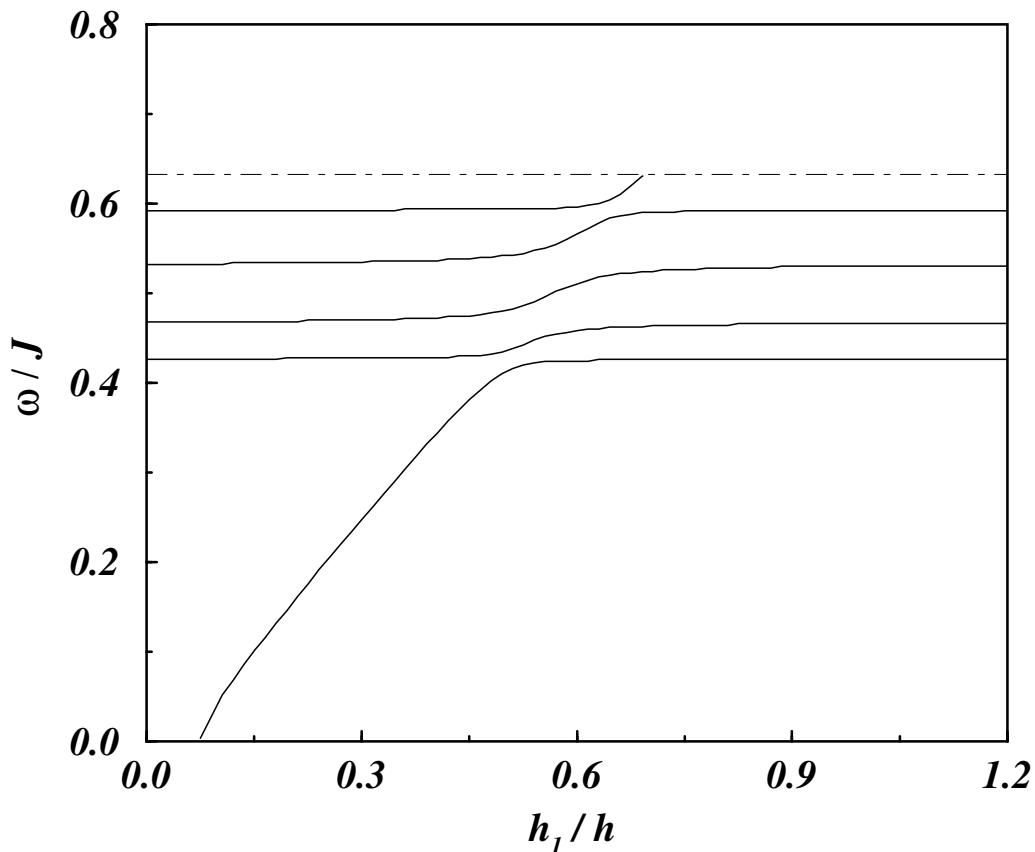


Figura 5.8: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_1 aplicado sobre a impureza 1 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

é semelhante em todos os resultados analisados até aqui.

Nas Figuras a seguir analisamos a influência do campo magnético local no espectro de freqüências de ondas de spin para modos de impurezas. A Fig.(5.8) mostra o comportamento dos modos de defeitos como função do parâmetro de campo efetivo aplicado sobre a impureza localizada na superfície de um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal (ver Fig.(5.3)). O campo efetivo aplicado sobre as demais impurezas foi mantido constante, $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre uma dada impureza e seus vizinhos são: $J'_S = 1.5J$ nas superfícies e $J' = 2.5J$ para impurezas na região de volume. As impurezas estão acopladas entre si através de uma interação de troca constante $J_I = 0.25J$. O gráfico mostra um conjunto de cinco modos localizados

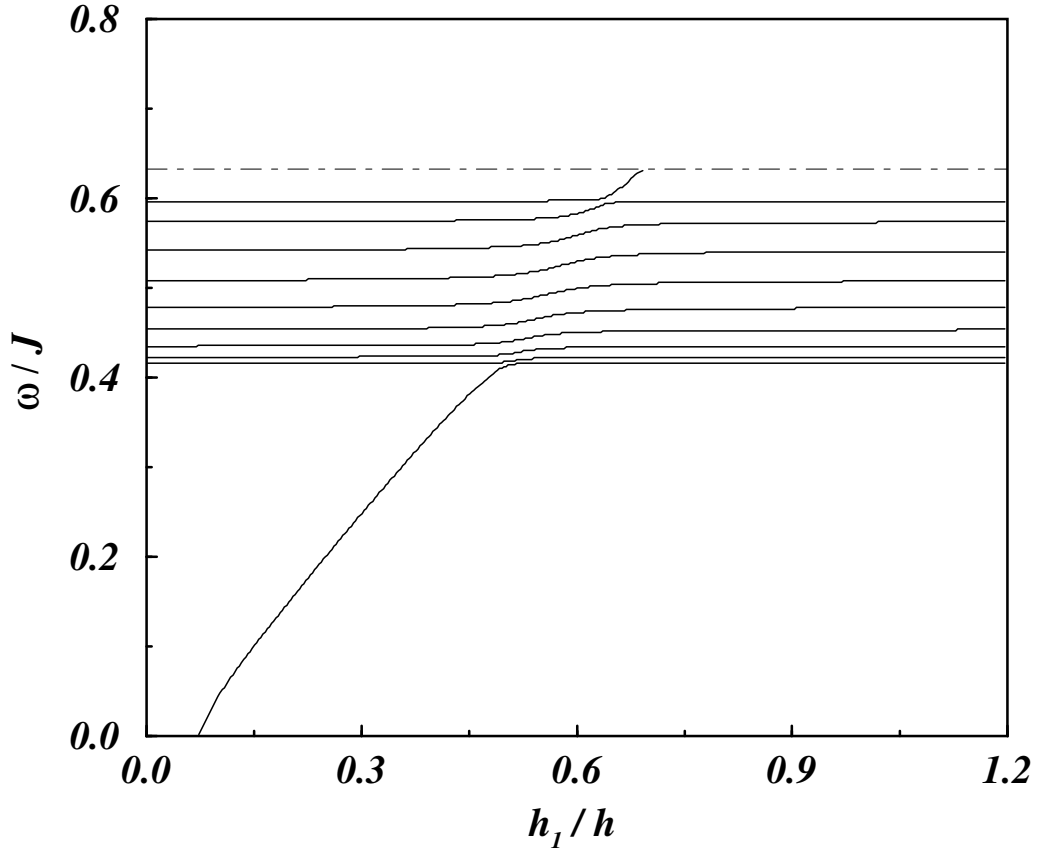


Figura 5.9: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_1 aplicado sobre a impureza 1 para o caso de em um filme ferromagnético com 10 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

com freqüências abaixo do limite inferior da banda de volume. Para $h_1 < 0.08h$, apenas quatro modos têm freqüências abaixo do limite inferior da banda de volume, para os valores de troca e campo considerados. Para $h_1 > 0.08h$ o quinto modo aparece com uma freqüência que cresce quase linearmente até $h_1 \approx 0.48h$, onde passa a interagir repulsivamente com os demais. Observa-se que a repulsão entre os modos é mais acentuada quando $0.48h \leq h_1 \leq 0.69h$; para $h_1 \approx 0.69h$, o modo de mais alta energia imerge na banda de volume. A partir daí teremos novamente quatro modos. Observamos que os limites de freqüências para $h_1 = 0$ é o mesmo para valores de h_1 acima de $0.9h$.

Na Fig.(5.9) consideramos um filme ferromagnético com 10 camadas. Apesar do aumento do número de modos o comportamento dos modos é análogo ao da Figura anterior. O aumento na densidade de modos, caracterizando a formação de uma banda, mantém

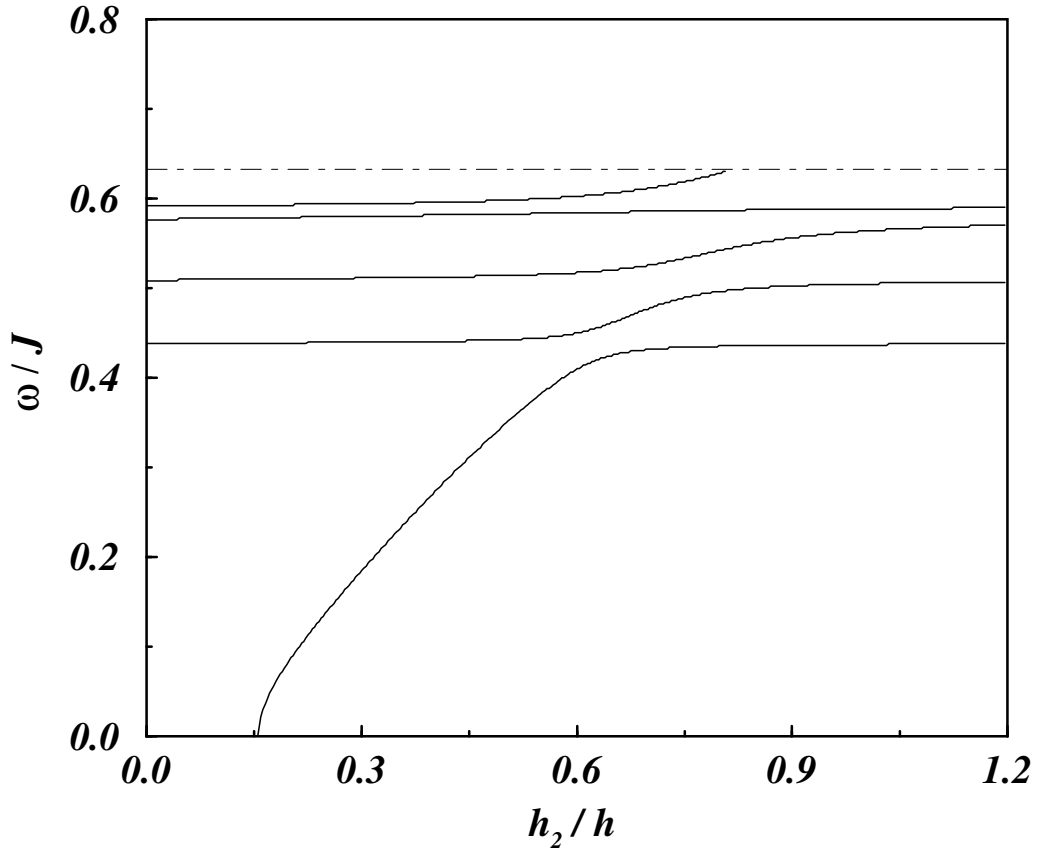


Figura 5.10: Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_2 aplicado sobre a impureza 2 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h_o = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

praticamente invariante os valores de campo local e frequência comentados anteriormente. O afastamento devido ao efeito repulsivo entre os modos diminui à medida que aumentamos o número de camadas do filme. Na Fig.(5.10), temos as frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo local h_2 aplicado na impureza localizada na segunda camada de um filme ferromagnético com 5 camadas, onde os demais parâmetros foram mantidos constantes. Verifica-se que um modo de frequência praticamente não é afetado pelos demais, como nos resultados para o parâmetro de acoplamento entre uma impureza e seus vizinhos puros no volume (Fig.(5.6)). Neste caso, obtém-se um resultado significativamente diferente de quando variamos o campo efetivo na primeira impureza. Observa-se que para $h_2 < 0.16h$, existem apenas quatro modos de defeitos. Para $h_2 > 0.16h$ o quinto modo aparece com uma frequência que cresce de zero até $h_2 \approx 0.60h$,

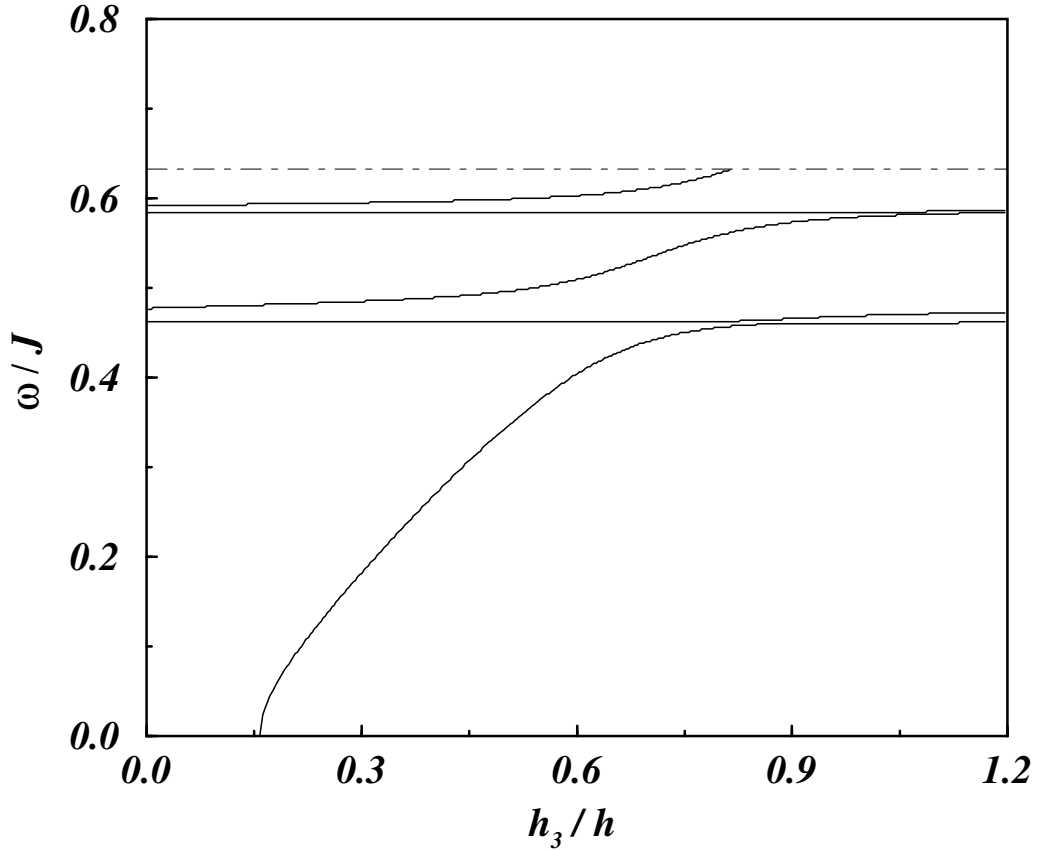


Figura 5.11: Frequências de ondas de spin localizadas em função do campo efetivo h_3 aplicado sobre a impureza 3 para o caso de em um filme ferromagnético com 5 camadas, mantendo constante o campo sobre as demais impurezas $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

onde passa a interagir repulsivamente com os demais. A repulsão entre os modos é mais acentuada que no caso anterior e se dá quando $0.60h \leq h_1 \leq 0.75h$; para $h_2 \approx 0.80h$, o modo de mais alta energia imerge na banda de volume. A partir daí teremos novamente quatro modos. Observamos que apesar do diferente comportamento dos modos em relação ao caso da Fig.(5.8), os limites de frequências para $0 < h_2 < 1.2h$ são praticamente os mesmos que para h_1 . Um efeito maior de repulsão entre os modos localizados pode ser obtido variando-se o campo aplicado na impureza da terceira camada, Fig.(5.11), para o mesmo intervalo de frequências da Figura anterior. Também como na Fig(5.10), a imersão do modo de mais alta energia se dá quando $h_2 \approx 0.80h$. Para esse caso, observamos dois modos com energia praticamente constante.

A Fig.(5.12) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro

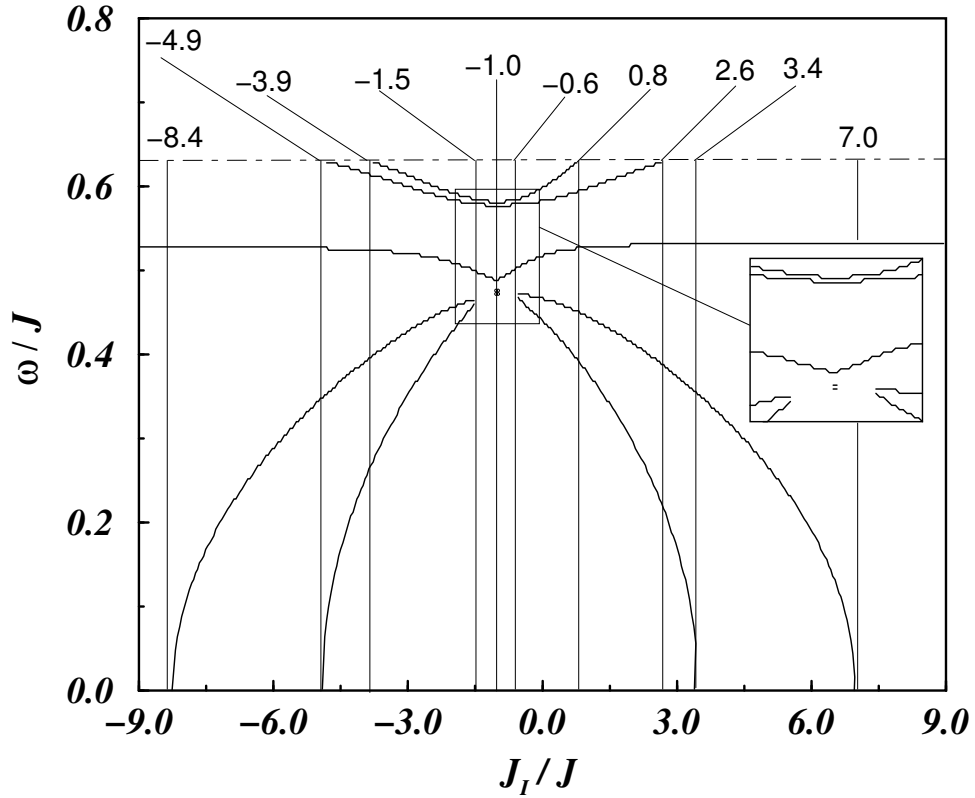


Figura 5.12: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre impurezas vizinhas em um filme ferromagnético com cinco camadas ($p = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas $h' = 0.65h$ e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos $J' = 2.5J$. Parâmetros no texto.

de troca entre as impurezas vizinhas em um filme ferromagnético com cinco camadas ($p = 5$). O parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos no volume de um material puro foi mantido constante, $J'_S = 1.5J$ se a impureza estiver na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. O campo efetivo atuando sobre as impurezas escolhido foi $h' = 0.65h$. O gráfico mostra um conjunto assimétrico de cinco modos localizados com frequências abaixo do limite inferior da banda de volume, sendo que para determinados valores de J_I , esse número pode variar, ou seja, podem ocorrer modos cujas frequências são degeneradas, como por exemplo, nos intervalos: $J_I < -8.4J$ e $J_I > 7.0J$, onde verifica-se a existência de apenas um modo; $-8.4J < J_I < -4.9J$ e $3.4J < J_I < 7.0J$, onde verifica-se a existência de apenas dois modos; $-1.5J < J_I < -1.0J$ e $-1.0J < J_I < -0.6J$, onde verifica-se a existência de três modos, e para $-4.9J < J_I < -3.9J$ e $0.8J < J_I < 2.6J$, onde verifica-se a existência de quatro modos. Para valores de J_I fora desses intervalos cinco modos podem ser observados (veja ampliação na Fig.(5.12)). Observa-se para todos os valores do parâmetro de acoplamento entre duas impurezas vizinhas um efeito repulsivo entre os modos, cuja separação aumenta à medida que $|J_I + 1.0J|$ aumenta.

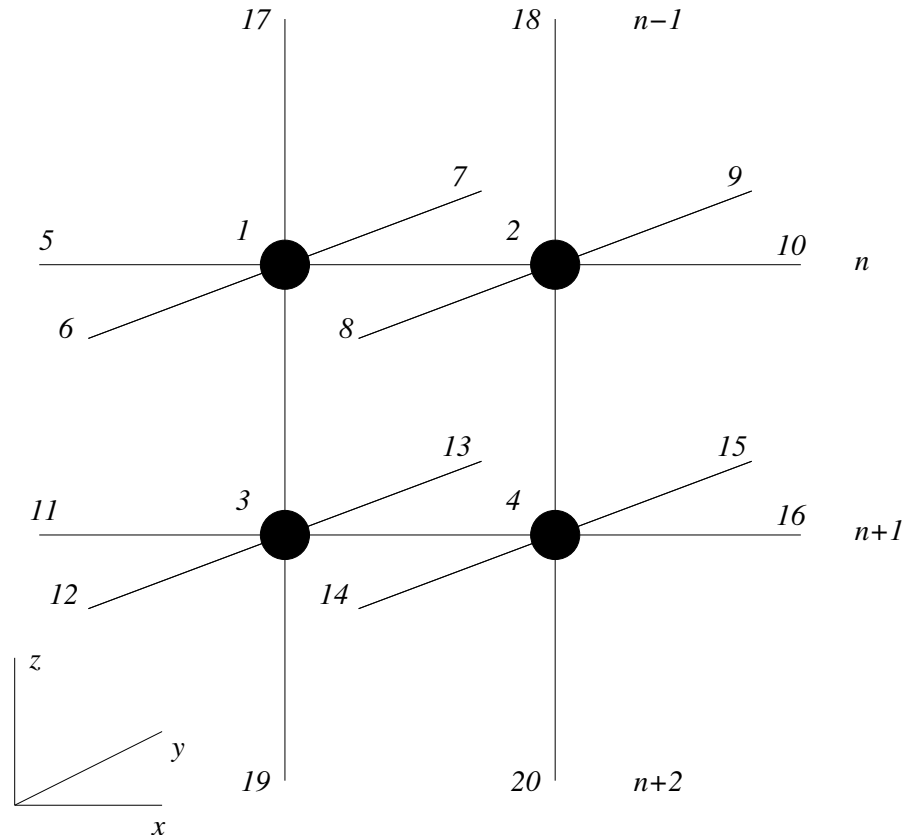
5.4.2 Caso 2: quatro impurezas no plano xz 

Figura 5.13: Representação do esquema de interação para quatro impurezas vizinhas no plano xz de um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas entre si e com seus primeiros vizinhos do material puro.

A Fig.(5.13) mostra o esquema de interação para um conjunto de quatro impurezas vizinhas no plano xz de um filme ferromagnético com seis camadas. A descrição do sistema é feita através do modelo de Ising com campo transversal, aplicado na direção x . As impurezas (círculos pretos) estão acopladas somente com seus primeiros vizinhos; os sítios vizinhos no material puro estão indicados de 5 a 20. Neste caso, estamos interessados em estudar a influência da posição das impurezas no espectro de excitações devido a mudanças no número de coordenação. Duas situações básicas são consideradas: uma quando as impurezas localizadas nos sítios 1 e 2 estão na superfície do filme, nesse caso não se incluem os sítios 17 e 18, e a outra quando as impurezas 1 e 2 estão na segunda camada. Obtemos resultados numéricos para as frequências de ondas de spin calculadas como função do parâmetro de troca (J') entre as impurezas e seus vizinhos no material

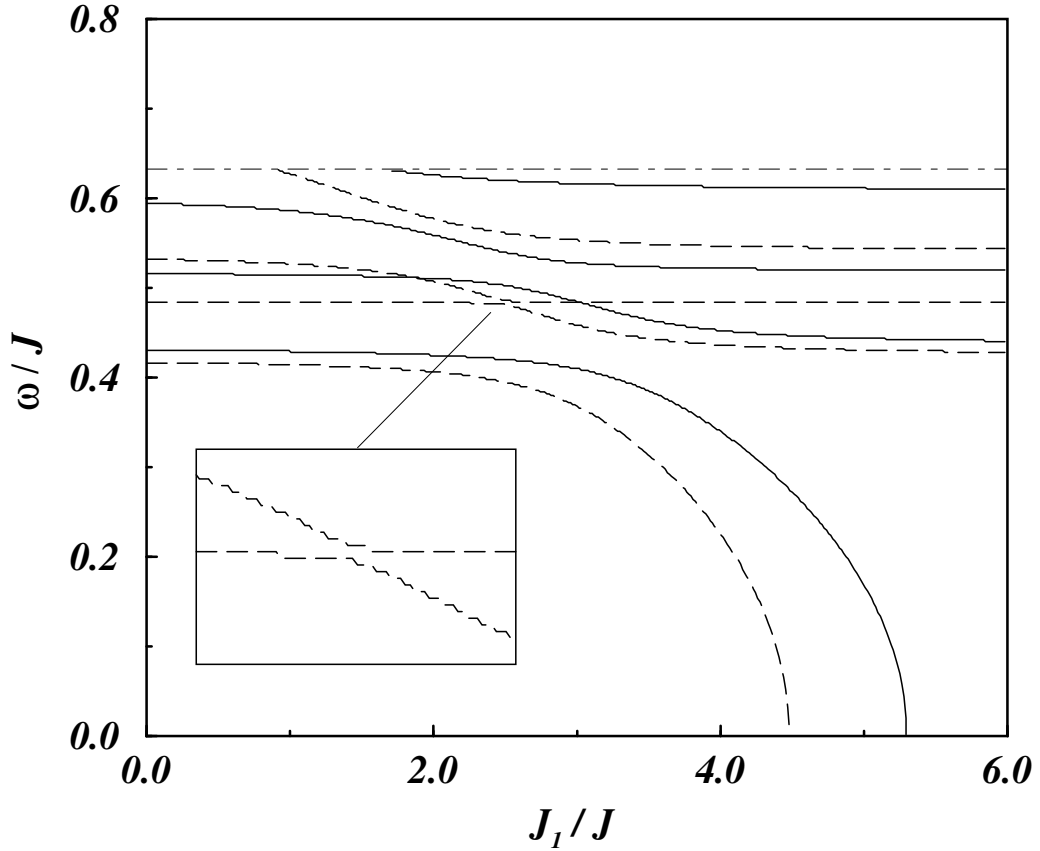


Figura 5.14: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xz de um filme ferromagnético com 6 camadas. Os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos bem como entre as impurezas foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

puro, do acoplamento entre duas impurezas vizinhas (J_I) e do campo efetivo (h') que atua sobre uma dada impureza.

A Fig.(5.14) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza localizada no sítio $o = 1$ e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com seis camadas. O parâmetro de troca entre as demais impurezas foi mantido constante, $J'_S = 1.5J$ par impurezas na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. As impurezas estão acopladas entre si através de uma interação de troca constante $J_I = 0.25J$ apenas para primeiros vizinhos. O campo efetivo atuando sobre as impurezas é $h' = 0.65h$. Os dois conjuntos de modos correspondem aos sub-casos: impurezas 1 e 2 na superfície do filme (linha sólida) e impurezas 1 e 2 na segunda ($n = 2$) camada do filme (linha tracejada). Verificamos novamente o efeito de repulsão gerado pelos acoplamentos

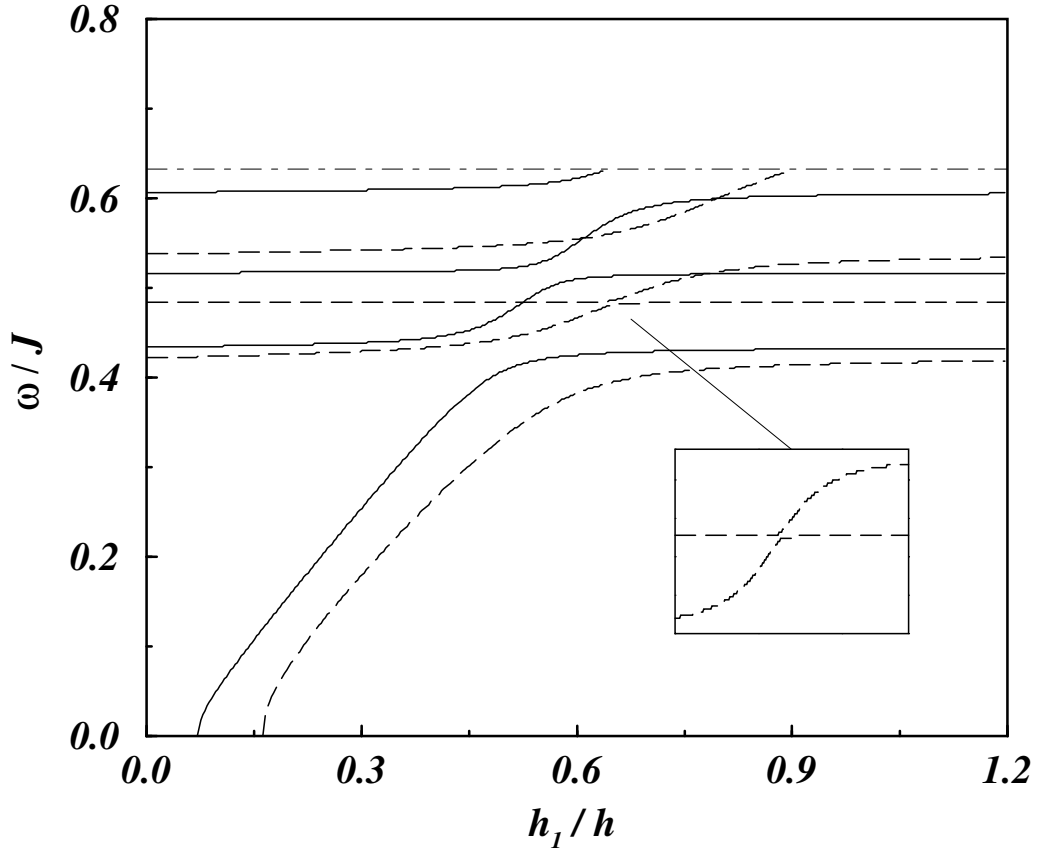


Figura 5.15: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de campo local h_1 aplicado sobre a impureza para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xz de um filme ferromagnético com 6 camadas. Os parâmetros de troca que envolvem as impurezas e seus vizinhos foram mantidos constantes. Parâmetros no texto.

de troca, nesse caso em menor intensidade em relação aos casos anteriores. A magnitude desse efeito depende da intensidade do acoplamento de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Quando as impurezas 1 e 2 estão na superfície, não há a presença dos vizinhos 17 e 18, ou seja, ocorre uma diminuição no número de coordenação; isso provoca uma maior separação entre os modos em comparação com a configuração na qual as impurezas 1 e 2 estão na segunda camada. Nesse caso verifica-se a aproximação de dois modos para $J_1 \approx 2.5J$ nos dois casos. Quando as impurezas 1 e 2 estão na superfície a frequência correspondente é de aproximadamente $0.52J$. Se elas estão na segunda camada, esse valor passa a ser $0.48J$.

Na Figura a seguir, analisamos a influência do campo magnético local no espectro de frequências de ondas de spin para modos de impurezas para a configuração com quatro

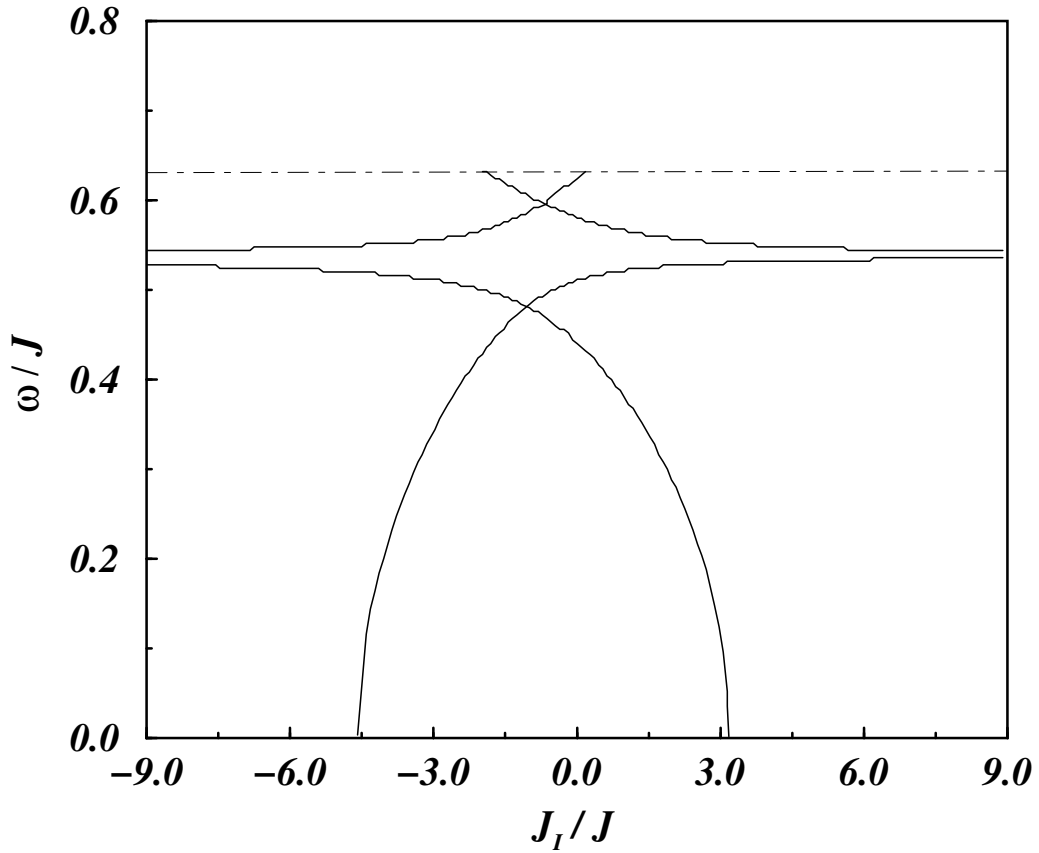


Figura 5.16: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas, para o caso no as impurezas 1 e 2 estão na superfície de um filme de seis camadas. Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.

impurezas no plano xz . A Fig.(5.15) mostra o comportamento dos modos de defeitos como função do parâmetro de campo efetivo aplicado sobre a impureza 1 para esse caso. O campo efetivo aplicado sobre as demais impurezas foi mantido constante, $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre uma dada impureza e seus vizinhos são: $J'_S = 1.5J$ nas superfícies e $J' = 2.5J$ para impurezas na região de volume. As impurezas estão acopladas entre si através de uma interação de troca constante $J_I = 0.25J$. Como na Figura anterior, os dois conjuntos de modos correspondem aos sub-casos: impurezas 1 e 2 na superfície do filme ($n = 1$, linha sólida) e impurezas 1 e 2 na segunda camada do filme ($n = 2$, linha tracejada). Verificamos novamente que o acoplamento de troca gera um modo de repulsão entre os modos. A magnitude desse efeito depende da intensidade do acoplamento de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Quando as impurezas 1 e 2 estão na superfície,

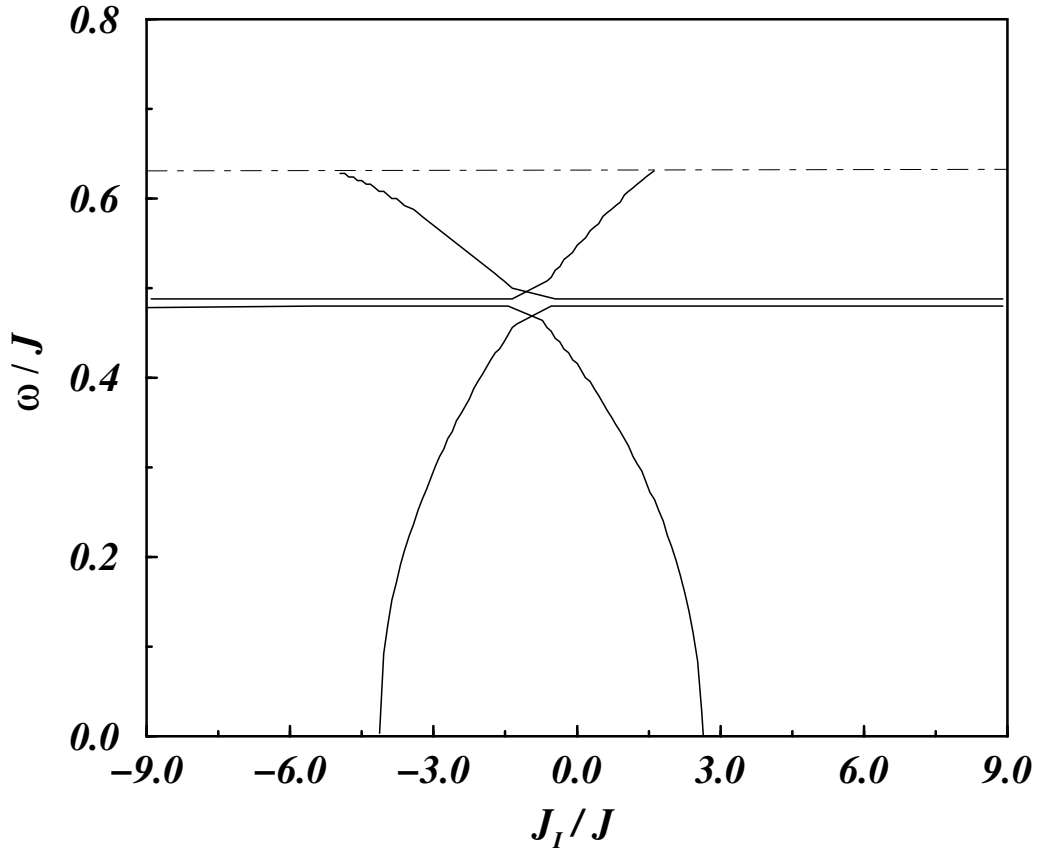


Figura 5.17: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_I entre as impurezas, (a) impurezas 1 e 2 na superfície do filme (b) impurezas 1 e 2 na segunda camada do filme ($N - 1 = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.

não há a presença dos vizinhos 17 e 18, ou seja, ocorre uma diminuição no número de coordenação; isso provoca uma maior separação entre os modos em comparação com a configuração na qual as impurezas 1 e 2 estão na segunda camada. Nesse caso verifica-se a aproximação de dois modos para $h_1 \approx 0.65h$, onde na ampliação verificamos que não ocorre cruzamento dos modos. Novamente verifica-se que quando as impurezas 1 e 2 estão na superfície a frequência correspondente é de aproximadamente $0.52J$. Se elas estão na segunda camada, esse valor passa a ser $0.48J$.

A Fig.(5.16) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre as impurezas vizinhas para o caso no qual se tem quatro impurezas vizinhas no plano xz em um filme ferromagnético com seis camadas ($N - 1 = 6$). Nesta Figura consideramos as impurezas 1 e 2 na superfície do filme e na Fig.(5.17b) com essas impure-

zas na segunda camada do filme. O parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos no volume de um material puro foi mantido constante, $J'_S = 1.5J$ se a impureza estiver na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. O campo efetivo atuando sobre as impurezas escolhido foi $h' = 0.65h$. Nas Figs.(5.16) e (5.17) observa-se um conjunto assimétrico de quatro modos localizados com frequências abaixo do limite inferior da banda de volume, onde as frequências de dois modos decaem com J_I , enquanto para os outros dois há um crescimento. Nesse caso não se observa o efeito repulsivo entre os modos. Verifica-se um comportamento assintótico para esses modos quando as impurezas 1 e 2 estão na primeira camada para $\omega \approx 0.52J$. Esse é o valor de frequência correspondente aos valores de J_1 e h_1 que aparecem nos comentários das Figuras anteriores. As mesmas observações podem ser feitas para o caso em que as impurezas 1 e 2 estão na segunda camada, no entanto não ocorre comportamento assintótico e a frequência dos modos decai para $\omega \approx 0.48J$, correspondente aos valores de J_1 e h_1 .

5.4.3 Caso 3: quatro impurezas no plano xy

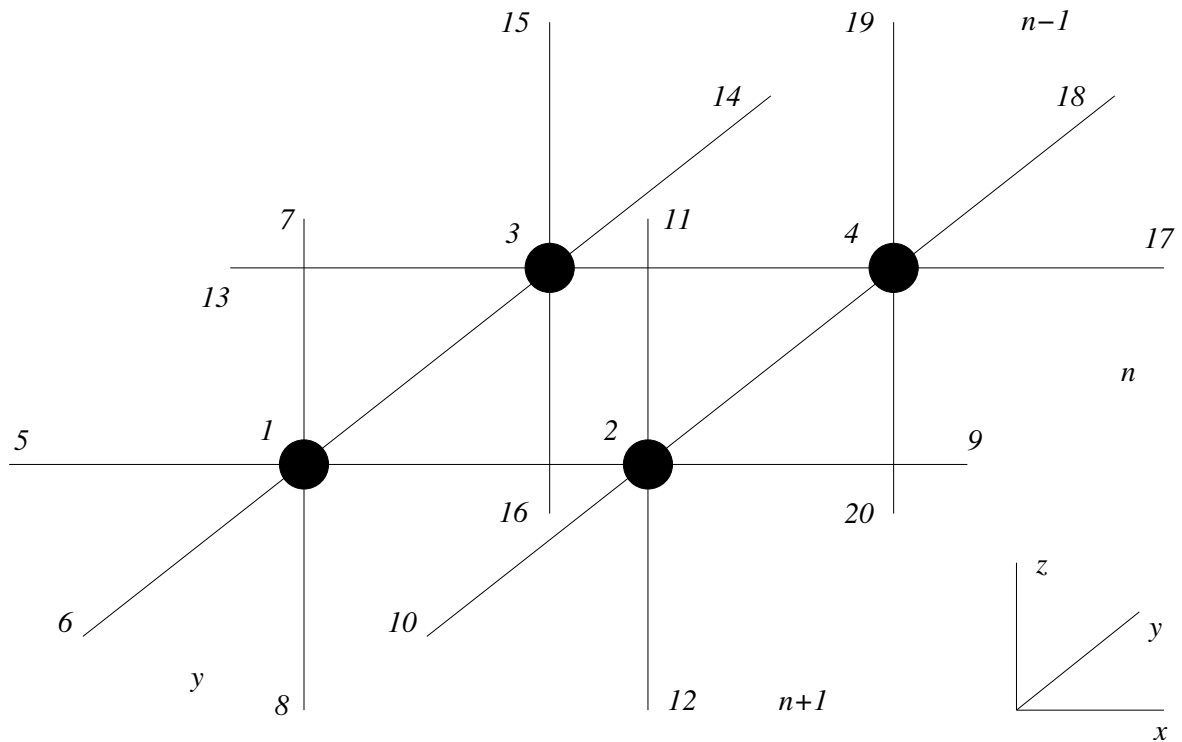


Figura 5.18: Representação do esquema de interação para quatro impurezas vizinhas no plano xy de um filme ferromagnético descrito pelo modelo de Ising com campo transversal. As impurezas (círculos pretos) estão acopladas somente com seus primeiros vizinhos do material puro $J_I = 0$.

A Fig.(5.18) mostra o esquema de interação para um conjunto de quatro impurezas vizinhas no plano xy de um filme ferromagnético com cinco camadas. Neste caso, consideramos as impurezas acopladas somente com seus primeiros vizinhos no material puro, ou seja, $J_I = 0$. Como no caso anterior, estamos interessados em estudar a influência da posição de cada impureza no espectro de excitações, nesse caso menos acentuada que no caso anterior, já que teremos quatro impurezas em uma camada. Duas situações básicas serão consideradas: uma quando as quatro impurezas estão na superfície do filme ($n = 1$, representada no gráfico pela linha sólida), nesse caso não se incluem os sítios 7, 11, 15 e 19, e a outra quando as quatro impurezas estão na segunda camada ($n = 2$, representada no gráfico pela linha tracejada). Obtemos resultados numéricos para as frequências de ondas de spin calculadas como função do parâmetro de troca (J') entre as impurezas e seus vizinhos no material puro, do campo efetivo (h') que atua sobre uma dada impureza e do acoplamento entre duas impurezas vizinhas (J_I).

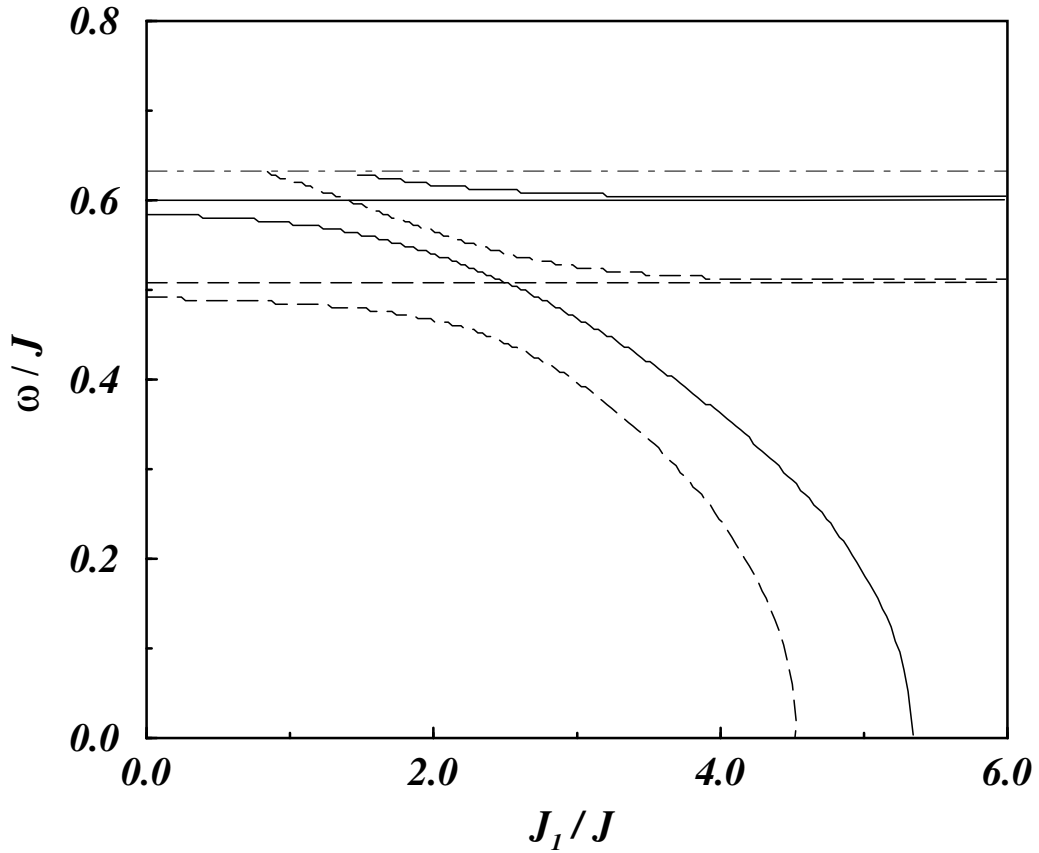


Figura 5.19: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre a impureza 1 e seus vizinhos puros para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xy de um filme ferromagnético com 5 camadas. Parâmetros no texto.

A Fig.(5.19) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza localizada no sítio $o = 1$ e seus vizinhos puros em um filme ferromagnético com cinco camadas considerando-se o acoplamento entre as impurezas nulo. O parâmetro de troca entre as demais impurezas e seus vizinhos é mantido constante, $J'_S = 1.5J$ na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. Observa-se nos dois casos (linha sólida e tracejada), três modos. Quando consideramos as quatro impurezas na superfície do filme, obtemos dois modos cuja freqüência é praticamente constante ($\omega \approx 0.6J$) e um modo que decai indo a zero para $J_1 \approx 4.5J$. Se as impurezas estão na segunda camada ($n = 2$), o comportamento dos modos é o mesmo, sendo que para esse caso a separação entre os modos é pouco maior. A freqüência do modo constante passa a ser $\omega \approx 0.5J$. O modo que decai vai a zero para $J_1 \approx 4.5J$. Verificamos uma repulsão menor entre os modos, como esperado, já que houve um decréscimo na energia de troca

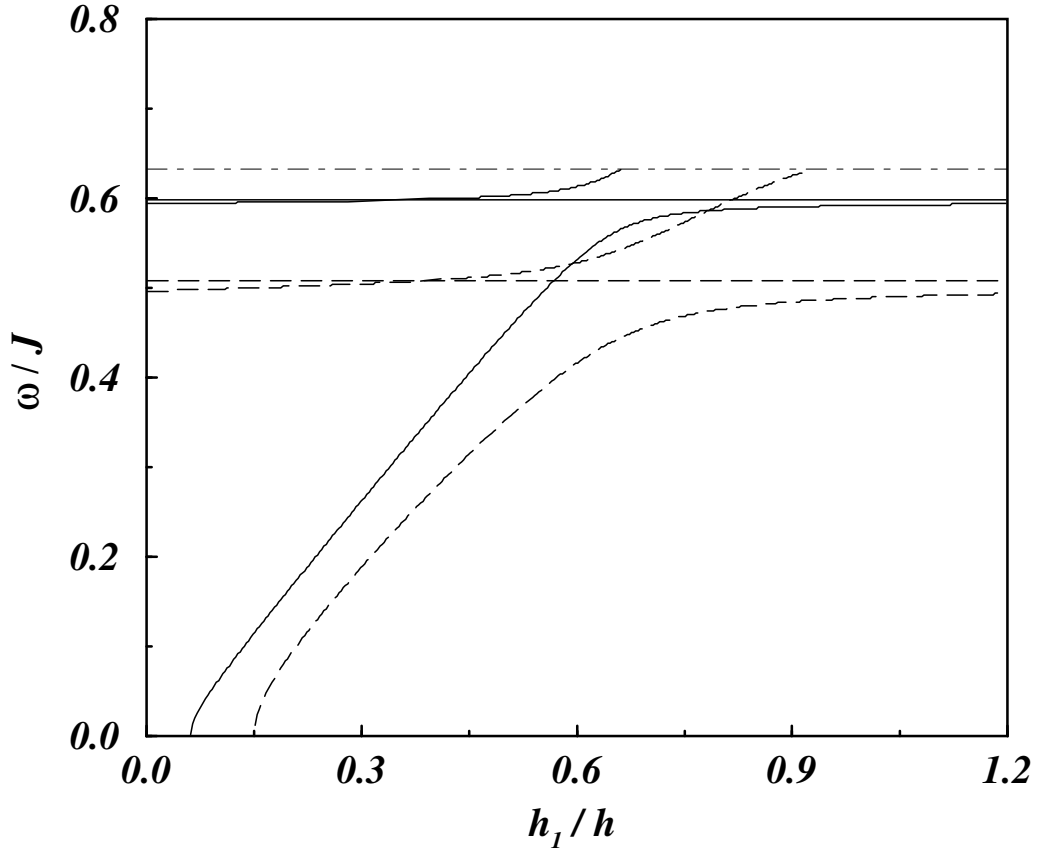


Figura 5.20: Frequências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de campo local h_1 aplicado sobre a impureza para o caso no qual tem-se quatro impurezas no plano xy de um filme ferromagnético com 5 camadas. Parâmetros no texto.

entre os modos.

Na Figura a seguir analisamos a influência do campo magnético local no espectro de frequências de ondas de spin para modos de impurezas para o Caso 3. A Fig.(5.20) mostra o comportamento dos modos de defeitos como função do parâmetro de campo efetivo aplicado sobre a impureza 1 para esse caso. O campo efetivo aplicado sobre as demais impurezas foi mantido constante, $h' = 0.65h$. Os parâmetros de troca entre uma dada impureza e seus vizinhos são: $J'_s = 1.5J$ nas superfícies e $J' = 2.5J$ para impurezas na região de volume. Como na Figura anterior, os dois conjuntos de modos correspondem aos sub-casos: quatro impurezas na superfície do filme ($n = 1$, linha sólida) e quatro impurezas na segunda camada do filme ($n = 2$, linha tracejada). Como comentado na Fig.(5.19), observa-se nos dois casos (linha sólida e tracejada), três modos. Quando consideramos as quatro impurezas na superfície do filme, obtemos dois modos cuja frequência

é praticamente constante ($\omega \approx 0.6J$) e um modo de maior frequência, que imerge na banda de volume para $h_1 \approx 0.65h$. Se as impurezas estão na segunda camada ($n = 2$), o comportamento dos modos é o mesmo, sendo que para esse caso a separação entre os modos é pouco maior. A frequência do modo constante cai para $\omega \approx 0.5J$. Nesse caso o modo imerge na banda de volume para $h_1 \approx 0.9h$.

A Fig.(5.21) mostra o comportamento dos modos localizados como função do parâmetro de troca entre as impurezas para o caso no qual se tem quatro impurezas vizinhas no plano xz em um filme ferromagnético com seis camadas ($N - 1 = 5$). Nesta Figura consideramos as impurezas 1 e 2 na superfície do filme e na Fig.(5.17b) com essas impurezas na segunda camada do filme. O parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos no volume de um material puro foi mantido constante, $J'_S = 1.5J$ se a impureza estiver na superfície e $J' = 2.5J$ nas demais camadas do filme. O campo efetivo atuando sobre as impurezas escolhido foi $h' = 0.65h$. Nas Figs.(5.16) e (5.17) observa-se um conjunto assimétrico de quatro modos localizados com frequências abaixo do limite inferior da banda de volume, onde as frequências de dois modos decaem com J_I , enquanto para os outros dois há um crescimento. Nesse caso não se observa o efeito repulsivo entre os modos. Verifica-se um comportamento assintótico para esses modos quando as impurezas 1 e 2 estão na primeira camada para $\omega \approx 0.52J$. Esse é o valor de frequência correspondente aos valores de J_I e h_1 que aparecem nos comentários das Figuras anteriores. As mesmas observações podem ser feitas para o caso em que as impurezas 1 e 2 estão na segunda camada, no entanto não ocorre comportamento assintótico e a frequência dos modos decai para $\omega \approx 0.48J$, correspondente aos valores de J_I e h_1 .

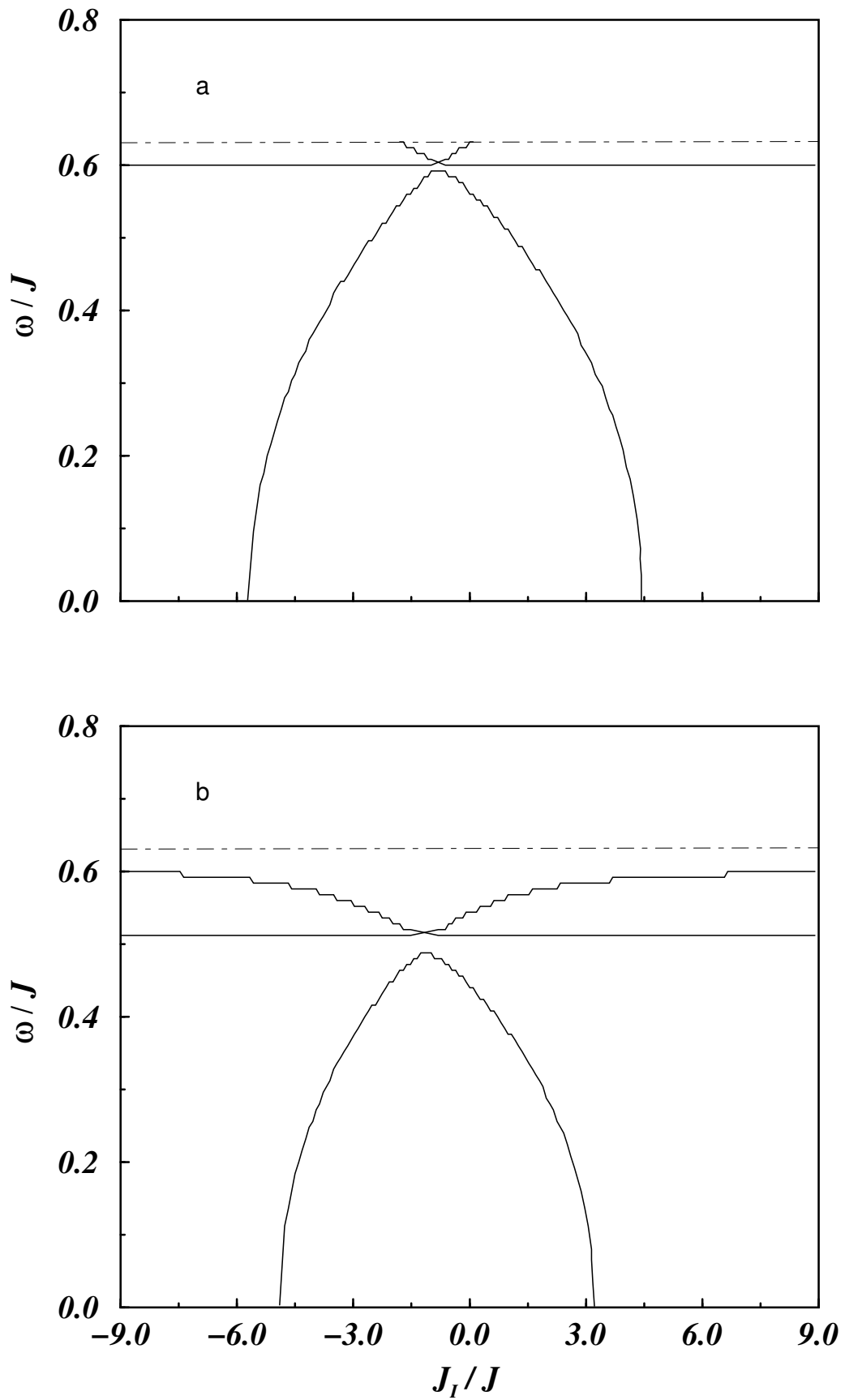


Figura 5.21: Freqüências de ondas de spin localizadas em função do parâmetro de troca J_1 entre as impurezas (a) quatro impurezas na superfície do filme (b) quatro impurezas na segunda camada do filme ($N-1 = 5$). Mantemos constantes os parâmetros de campo sobre as impurezas e os parâmetros de troca entre as impurezas e seus vizinhos. Parâmetros no texto.

6 *Conclusões*

Neste trabalho estudamos o espectro de ondas de spin relativas a impurezas magnéticas acopladas num ferromagnético semi-infinito e em um filme ferromagnético. Determinamos a equação de movimento para as funções de Green onde os operadores de spin são descritos pelo Hamiltoniano de Ising com campo transverso. Para o caso do ferromagneto semi-infinito, Capítulo 4, consideramos duas impurezas alinhadas sob orientações fisicamente diferentes: no eixo x e no eixo z . Para impurezas localizadas acopladas em um filme ferromagnético, Capítulo 5, consideramos três casos com diferentes disposições para as impurezas implantadas no material puro. Caso 1: linha contendo n impurezas acopladas na direção do eixo z , Caso 2: quatro impurezas no plano xz e Caso 3: quatro impurezas no plano xy . Em ambos os Capítulos obtemos resultados para as frequências dos modos defeituosos como função do parâmetro de troca entre as impurezas e seus vizinhos, do campo aplicado e do acoplamento de troca entre elas. Observamos que esses acoplamentos modificam o espectro em relação aos resultados obtidos para uma impureza simples [31], especialmente quando o parâmetro de acoplamento entre as impurezas e seus vizinhos no material puro são da mesma magnitude. Os resultados também mostram o efeito da orientação das impurezas nas frequências de ondas de spin localizadas especialmente quando as impurezas estão próximas ou na superfície.

Em ligas ferromagnéticas, excitações relativas a impurezas têm sido observadas através de espalhamento de nêutrons Tb-10%-Ho [62]. Estas medidas na presença de modos ressonantes indicam uma aparente anomalia na dispersão de ondas de spin em Tb puro. A presença de anomalias em espalhamentos de alta resolução pode, portanto, conter informações sobre a distribuição, acoplamento e orientação de impurezas magnéticas em ferromagnetos.

Baseado nos resultados exibidos nos Capítulos 4 e 5, temos como perspectivas para novos trabalhos a extensão desses estudos. Seria interessante um estudo mostrando a dependência da temperatura crítica nesses sistemas em relação ao número de impurezas inseridas no material puro. Outro estudo também a ser feito é o da densidade de estados de ondas de spin, análogo ao feito por Chen e Cottam [22] para um ferromagneto semi-

infinito no Hamiltoniano de Heisenberg. Uma análise mais detalhada da simetria para esses sistemas físicos pode ser obtida usando-se o Hamiltoniano de Heisenberg.

É importante observar que a técnica desenvolvida neste trabalho permite inserir impurezas nas mais variadas geometrias e sistemas físicos de interesse. Um fator limitante entretanto é o tempo dispendido nos cálculos computacionais.

No Apêndice G apresentamos a cópia do artigo relativo ao Capítulo 4 já publicado por este autor e colaboradores.

APÊNDICE A – Equação de Dyson

A equação de Dyson, Eq.(3.37), relaciona as matrizes \mathbf{G} e \mathbf{G}^0 . Considere inicialmente o caso de um sistema puro que $h_i = h$ e $J_i = J$ para qualquer i . Da Eq.(3.14) temos que

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2 - h^2}{h} G_{lm}^0 &= \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lm} - R_l^x \sum_j J_{lj} G_{jm}^0 & (A.1) \\ \frac{\omega^2 - h^2}{h} G_{lm}^0 \delta_{lj} &= \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lm} \delta_{lj} - R_l^x \sum_p J_{lp} \delta_{lj} G_{lm}^0 \\ \left[\frac{\omega^2 - h^2}{h} + R_l^x \sum_p J_{lp} \right] \delta_{lj} G_{lm}^0 &= \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lj} \delta_{lm} \end{aligned}$$

ou

$$(\tilde{\mathbf{G}}^0)^{-1} \tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{I}, \quad (A.2)$$

onde $\tilde{\mathbf{G}}^0$ e $\tilde{\mathbf{G}}$ são matrizes quadradas cujos elementos são dados por $(2\pi/R_l^x)G_{lm}^0$ e $(2\pi/R_l^x)G_{lm}$, respectivamente. e

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{G}}^0)_{lm}^{-1} &= \left[\frac{\omega^2 - h^2}{h} + R_l^x \sum_p J_{lp} \right] \delta_{lj} & (A.3) \\ (\tilde{\mathbf{G}}^0)_{lm}^{-1} &= \frac{\omega^2 - h^2}{h} \delta_{lj} + R_l^x \sum_p J_{lp} \delta_{lj}. \end{aligned}$$

Numa notação matricial

$$(\tilde{\mathbf{G}}^0)^{-1} = \mathbf{W}\mathbf{I} + \mathbf{U}. \quad (A.4)$$

Para o caso contendo uma impureza localizada, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2 - [h + (h' - h)\delta_{lo}]^2}{h + (h' - h)\delta_{lo}} G_{lm} &= \frac{R_l^x}{2\pi} \delta_{lm} - R_l^x \sum_j J_{lj} G_{jm} \\ &\quad - \sum_d (J' - J) R_l^x (G_{dm} \delta_{lo} + G_{om} \delta_{ld}) \end{aligned} \quad (A.5)$$

$$A_{lj}G_{lm} = \frac{R_l^x}{2\pi}\delta_{lm}\delta_{lj} - R_l^x \sum_p J_{lp}\delta_{lj}G_{lm} - \sum_d (J' - J)R_l^x(\delta_{lo}\delta_{jd} + \delta_{ld}\delta_{jo})G_{lm}$$

$$\begin{aligned} A_{lj}\tilde{G}_{lm} &= I_{lj} - U_{lj}\tilde{G}_{lm} - U'_{lj}\tilde{G}_{lm} \\ WI_{lj}\tilde{G}_{lm} + A_{lj}\tilde{G}_{lm} - WI_{lj}\tilde{G}_{lm} &= I_{lj} - U_{lj}\tilde{G}_{lm} - U'_{lj}\tilde{G}_{lm} \\ [W\mathbf{I} + \mathbf{U}]\tilde{\mathbf{G}} &= \mathbf{I} + [W\mathbf{I} - \mathbf{U}' - \mathbf{A}]\tilde{\mathbf{G}} \\ [(\tilde{\mathbf{G}}^0)^{-1} - \mathbf{V}]\tilde{\mathbf{G}} &= \mathbf{I} \end{aligned}$$

onde

$$V_{lj} = WI_{lj} - U'_{lj} - A_{lj} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} WI_{lj} &= \frac{\omega^2 - h^2}{h}\delta_{lj} \\ A_{lj} &= \frac{\omega^2 - [h + (h' - h)\delta_{lo}]^2}{h + (h' - h)\delta_{lo}}\delta_{lj} \\ U'_{lj} &= \sum_d (J' - J)R_l^x(\delta_{lo}\delta_{jd} + \delta_{ld}\delta_{jo}) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

ou

$$V_{lj} = \frac{(h' - h)(\omega^2 + hh')}{hh'}\delta_{lo}\delta_{lj} - \sum_d (J' - J)R_l^x(\delta_{lo}\delta_{jd} + \delta_{ld}\delta_{jo}) \quad (\text{A.8})$$

que é o potencial efetivo devido as impurezas.

Esse sistema pode ser representado matricialmente na forma:

$$\mathbf{X} = \mathbf{F}\mathbf{X} + \mathbf{D} \tag{B.4}$$

onde,

$$\mathbf{F} = (f_{ij}) = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \dots & \frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \dots & 0 \end{pmatrix} \tag{B.5}$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{c_1}{a_{11}} \\ \frac{c_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{c_n}{a_{nn}} \end{pmatrix} \tag{B.6}$$

Deseja-se estabelecer as condições para as quais o processo iterativo,

$$\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{F}\mathbf{X}^{(k-1)} + \mathbf{D} \tag{B.7}$$

convirja para a solução da Eq.(B.2), quando iniciada a aproximação, isto é:

$$\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{F}\mathbf{X}^{(0)} + \mathbf{D}$$

$$\mathbf{X}^{(2)} = \mathbf{F}\mathbf{X}^{(1)} + \mathbf{D}$$

.....

$$\mathbf{X}^{(k-1)} = \mathbf{F}\mathbf{X}^{(k-2)} + \mathbf{D}$$

$$\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{F}\mathbf{X}^{(k-1)} + \mathbf{D} \tag{B.8}$$

e, procedendo por indução,

$$\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{F}^k \mathbf{X}^{(0)} + (\mathbf{I} + \mathbf{F} + \mathbf{F}^2 + \dots + \mathbf{F}^{k-1}) \mathbf{D} \tag{B.9}$$

Agora, se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{F}^k = 0 \tag{B.10}$$

a série geométrica,

$$\mathbf{I} + \mathbf{F} + \mathbf{F}^2 + \dots + \mathbf{F}^{k-1} + \dots \quad (\text{B.11})$$

é convergente e igual a $(\mathbf{I} - \mathbf{F})^{-1}$. Conclui-se que, quando o limite na Eq.(B.10) é verificado, existe o limite:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{X} \quad (\text{B.12})$$

resultando que:

$$\mathbf{X} = (\mathbf{I} - \mathbf{F})^{-1} \mathbf{D} \quad (\text{B.13})$$

e, portanto,

$$\mathbf{X} = \mathbf{F}\mathbf{X} + \mathbf{D} \quad (\text{B.14})$$

Prova-se que a condição suficiente para que Eq.(B.14) se verifique é que:

$$\sum_{j=1}^n |f_{ij}| < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{B.15})$$

ou seja, que:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{B.16})$$

ou ainda,

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{B.17})$$

Para maior velocidade de convergência, calcula-se, a partir das equações acima, o valor de x_i , na aproximação $k + 1$, de modo que,

$$x_i^{(k+1)} = \frac{c_i}{a_{ii}} - \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (\text{B.18})$$

Isto significa que as últimas aproximações obtidas para x_1, x_2, \dots, x_{i-1} são empregadas no cálculo do novo valor de x_i .

O método iterativo descrito constitui o Método de Gauss-Seidel [59]. Como é inerente dos processos iterativos, os erros de arredondamento não se propagam ao longo do processo, o que torna o cálculo particularmente interessante para melhorar a solução

obtida por outro método.

APÊNDICE C – Matriz inversa - meio semi-infinito

No Capítulo 3, para um ferromagneto semi-infinito, usamos uma representação de matrizes em que precisamos determinar a inversa da matriz (\mathbf{A}^0). Então, denotando

$$\mathbf{B} = [\mathbf{A}^0]^{-1} \quad (\text{C.1})$$

onde,

$$\mathbf{A}^0 = \begin{pmatrix} d & -1 & 0 & \cdots \\ -1 & d & -1 & \cdots \\ 0 & -1 & d & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

com d definido através do parâmetro complexo x , como

$$d = x + x^{-1}, \quad |x| \leq 1 \quad (\text{C.3})$$

A inversa de \mathbf{A}^0 pode ser determinada por

$$\mathbf{B}\mathbf{A}^0 = \mathbf{1} \quad (\text{C.4})$$

Assim, obtemos seguinte relação de recorrência:

$$B_{jk} = \frac{b_{j-1,k} + b_{j+1,k} + \delta_{j,k}}{x + x^{-1}} \quad (\text{C.5})$$

O Método de Gauss-Seidel é então usado para a determinação de seus elementos, quando reescrevemos a Eq. (C.4), como

$$\mathbf{B} = (\mathbf{1d} + \mathbf{F})^{-1} \quad (\text{C.6})$$

onde,

$$\mathbf{F} = - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 1 & \ddots \\ 0 & 1 & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

A interatividade começa quando obtemos para $j > 1$, os elementos:

$$\begin{aligned} b_{j-1,1} &= x^{j-1,1} - \sum_{j=2}^n x^{j-1,j} \\ b_{j-1,2} &= x^{j-1,2} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n x^{j-2,j} \\ b_{j-1,3} &= x^{j-1,3} - \sum_{\substack{j=1,2 \\ j \neq 3}}^n x^{j-3,j} \\ &\vdots \\ b_{j-1,k} &= x^{j-1,k} - \sum_{\substack{j=1,k \\ j \neq k}}^n x^{j-k,j} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Portanto, quando passamos o limite "n" tendendo a infinito, temos a aproximação

$$\begin{aligned} b_{11} &= x \\ b_{12} &= x^2 \\ b_{13} &= x^3 \\ &\vdots \\ b_{1k} &= x^k \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

e, devido a simetria,

$$b_{j1} = x^j \quad (\text{C.10})$$

Estes resultados são originados do fato de que o elemento $b_{j-1,k} = 0$, para $j = 1$. Um exame mais detalhado dos pormenores é discutido com frequência nos trabalhos de Wax e Dewames, e Wolfram.

Portanto, a solução da Eq.(C.6) satisfaz a Eq.(C.5)

$$\begin{cases} (d + f)x^{k-j+1} = 1 \\ (d + f)x^{k+j-1} = 1 \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

ou simplesmente,

$$B_{j,k} = \frac{x^{j+k} - x^{|j-k|}}{x - x^{-1}} \quad (\text{C.12})$$

APÊNDICE D – Matriz inversa - meio finito

Para inversão de matrizes do tipo abaixo

$$\mathbf{A}^0 = \begin{pmatrix} d & -1 & 0 & \cdot & 0 \\ -1 & d & -1 & \cdot & 0 \\ 0 & -1 & d & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 \\ 0 & 0 & \cdot & -1 & d \end{pmatrix}_{n \times n} \quad (\text{D.1})$$

Novamente, denotaremos a sua inversa como,

$$\mathbf{B} = [\mathbf{A}^0]^{-1} \quad (\text{D.2})$$

e, como antes o parâmetro d é definido como:

$$d = x + x^{-1}, \quad |x| \leq 1 \quad (\text{D.3})$$

da qual obtivemos a seguinte relação de recorrência para sua inversa,

$$B_{n-j+1, n-k+1} = \frac{b_{n-j, n-k+1} + b_{n-j+2, n-k+1} + \delta_{jk}}{x + x^{-1}} \quad (\text{D.4})$$

E, usando o método de Gauss-Seidel, podemos reescrever (D.1), como

$$\mathbf{B} = (\mathbf{1d} + \mathbf{F})^{-1} \quad (\text{D.5})$$

onde,

$$\mathbf{F} = - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 0 & 0 & \cdot & 1 & 0 \end{pmatrix}_{n \times n} \quad (\text{D.6})$$

O processo de iteratividade é o mesmo do caso anterior. Porém, este caso, resulta num sistema de dois pares de equações, respectivamente,

$$\begin{cases} (d+f)x^{(n-k)+(n-j+1)} = \frac{(1-x^{2n+2})}{2} \\ (d+f)x^{(n-k+2)-(n-j+1)} = \frac{(1-x^{2n+2})}{2} \end{cases} \quad (\text{D.7})$$

$$\begin{cases} (d+f)x^{(n+k)-(n-j+1)} = \frac{(1-x^{2n+2})}{2} \\ (d+f)x^{(n+k+2)+(n-j+1)} = \frac{(1-x^{2n+2})}{2} \end{cases} \quad (\text{D.8})$$

onde, n é a ordem da matriz.

Portanto, após alguns algebrismos, encontramos o resultado como

$$B_{jk}^{(n)} = \frac{x^{j+k} - x^{|j-k|} + x^{2n+2-j-k} - x^{2n+2-|j-k|}}{(1-x^{2n+2})(x-x^{-1})} \quad (\text{D.9})$$

Esta expressão é absolutamente satisfeita para a relação de recorrência (D.4), escrita da forma:

$$B_{jk}^{(n)} = \frac{B_{j-1,k} + B_{j+1,k} + \delta_{n+1-j,n+1-k}}{x+x^{-1}} \quad (\text{D.10})$$

Portanto, no limite "n" tendendo a infinito devemos obter exatamente a matriz inversa encontrada no apêndice anterior.

APÊNDICE E – Função de Green - meio semi-finito

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{M} = \mathbf{1} \tag{E.1}$$

$$\begin{bmatrix} d + \Delta & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & d & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & d & -1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & d & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} & \dots \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & \dots \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & \dots \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{E.2}$$

Elementos da diagonal principal:

$$\begin{aligned} (d + \Delta)M_{11} - M_{21} &= 1 & M_{11} &= \frac{M_{21}+1}{d+\Delta} \\ -M_{12} + dM_{22} - M_{32} &= 1 & M_{22} &= \frac{M_{12}+M_{32}+1}{d} \\ -M_{23} + dM_{33} - M_{43} &= 1 & M_{33} &= \frac{M_{23}+M_{43}+1}{d} \end{aligned}$$

ou

$$M_{jj} = \frac{M_{j-1,j} + M_{j+1,j} + 1}{d + \Delta_{jj}} \quad \text{onde} \quad \Delta_{jj} = \begin{cases} \Delta, & j = 1 \\ 0, & j \neq 1 \end{cases} \tag{E.3}$$

Elementos fora da diagonal principal:

$$\begin{aligned} -M_{11} + dM_{21} - M_{31} &= 0 & M_{21} &= \frac{M_{11}+M_{31}}{d} \\ -M_{13} + dM_{23} - M_{33} &= 0 & M_{23} &= \frac{M_{13}+M_{33}}{d} \end{aligned}$$

Generalizando, temos:

$$M_{jk} = \frac{M_{j-1,k} + M_{j+1,k} + \delta_{jk}}{d + \Delta_{jk}} \quad \text{onde} \quad \Delta_{jk} = \begin{cases} \Delta, & j = 1 \\ 0, & j \neq 1 \end{cases} \tag{E.4}$$

Note que temos uma restrição para $j = 1$. Isso pode ser contornado se considerarmos o seguinte:

$$\begin{pmatrix} d & -1 & 0 & \dots \\ -1 & d & -1 & \dots \\ 0 & -1 & d & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{E.5})$$

$$\left[d \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \right] \mathbf{a} = \mathbf{1} \quad (\text{E.6})$$

$$(d\mathbf{1} - \mathbf{F})\mathbf{a} = \mathbf{1} \quad (\text{E.7})$$

Algebricamente, temos:

$$(d - f)a = 1 \quad (\text{E.8})$$

Substituindo $M \rightarrow a$ na Eq.(E.4) e fazendo $\Delta = 0$, temos:

Para a 1^a linha

Para a 2^a linha

$$\begin{aligned} \left(d - \frac{a_{21}}{a_{11}} \right) a_{11} &= 1 & \left(d - \frac{a_{11}}{a_{21}} - \frac{a_{31}}{a_{21}} \right) a_{21} &= 0 \\ \left(d - \frac{a_{22}}{a_{12}} \right) a_{12} &= 0 & \left(d - \frac{a_{12}}{a_{22}} - \frac{a_{32}}{a_{22}} \right) a_{22} &= 1 \\ \left(d - \frac{a_{23}}{a_{13}} \right) a_{13} &= 0 & \left(d - \frac{a_{13}}{a_{23}} - \frac{a_{33}}{a_{23}} \right) a_{22} &= 0 \\ \left(d - \frac{a_{j+1,k}}{a_{j,k}} \right) a_{j,k} &= \delta_{j,k} & \left(d - \frac{a_{j-1,k}}{a_{j,k}} - \frac{a_{j+1,k}}{a_{j,k}} \right) a_{j,k} &= \delta_{j,k} \end{aligned}$$

Definindo:

$$a_{j-1,k} = x_{j-1,k} = x^k, \quad (\text{E.9})$$

de modo que para $j=1$, temos:

$$\begin{aligned} a_{0,1} &= x & a_{1,1} &= a_{0,1} = x \\ a_{0,2} &= x^2 & \text{ou} & a_{1,2} = a_{0,2} = x^2 & \text{ou} & a_{1,k} &= x^k \\ a_{0,3} &= x^3 & & a_{1,3} = a_{0,3} = x^3 & & & \end{aligned}$$

$$M_{11} = \frac{x}{1+x\Delta}, \quad M_{12} = \frac{x^2}{1+x\Delta}, \quad M_{13} = \frac{x^3}{1+x\Delta},$$

$$M_{11} = \frac{M_{21} + 1}{d + \Delta} \Rightarrow \frac{x}{1 + x\Delta} = \frac{\frac{x^2}{1+x\Delta} + 1}{d + \Delta} \Rightarrow \begin{aligned} (d + \Delta)x &= x^2 + 1 + x\Delta \\ d &= x + x^{-1} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

$$M_{12} = \frac{M_{22}}{d + \Delta} \Rightarrow \frac{x^2}{1 + x\Delta} = \frac{M_{22}}{x + x^{-1} + \Delta}$$

$$M_{22} = \frac{x^3 + x + x^2\Delta}{1 + x\Delta} \quad (\text{E.11})$$

$$M_{13} = \frac{M_{23}}{d + \Delta} \Rightarrow \frac{x^3}{1 + x\Delta} = \frac{M_{23}}{x + x^{-1} + \Delta}$$

$$M_{23} = \frac{x^4 + x^2 + x^3\Delta}{1 + x\Delta} \quad (\text{E.12})$$

$$M_{23} = \frac{M_{13} + M_{33}}{d} \Rightarrow \frac{x^4 + x^2 + x^3\Delta}{1 + x\Delta} = \frac{\frac{x^3}{1+x\Delta}}{x + x^{-1}}$$

$$M_{33} = \frac{x^5 + x^3 + x + (x^4 + x^2)\Delta}{1 + x\Delta} \quad (\text{E.13})$$

Temos, então o caso geral:

$$M_{jk} = \left[\frac{x^{j+k} - x^{|j-k|}}{x - x^{-1}} + \frac{x^{j+k-1} - x^{|j-k+1|}}{x - x^{-1}} \Delta \right] \frac{1}{1 + x\Delta}$$

$$M_{jk} = \frac{1}{x + x^{-1}} \left[\frac{x^{j+k} - x^{|j-k|} + x^{j+k} x^{-1} \Delta - x^{|j-k|} x \Delta}{x - x^{-1}} \right] \quad (\text{E.14})$$

$$M_{jk} = \frac{1}{x + x^{-1}} \left[\frac{x^{j+k}(1 + x^{-1}\Delta)}{1 + x\Delta} - x^{|j-k|} \right] \quad (\text{E.15})$$

*APÊNDICE F – Green's function for a
magnetic impurity layer
in a ferromagnetic Ising
film with transverse field*

*APÊNDICE G – Localized magnetic
excitations of coupled
impurities in a
transverse Ising
ferromagnet*

Referências

- [1] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1963).
- [2] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids* (W. A. Benjamin, Inc. New York, 1964).
- [3] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1981).
- [4] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1990).
- [5] F. Bloch, *Z. Phys.* **61**, 206 (1930).
- [6] C. Herring e C. Kittel, *Phys. Rev.* **81**, 869 (1951).
- [7] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th edition ed. (John Wiley & Sons Inc., New York, 1996).
- [8] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [9] Y. Y. Peter e M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties* (Springer-Verlag, Berlin, 1976).
- [10] I. Guedes, N. J. Zaluzec, M. Grimsditch, V. Metlushko, P. Vavassori, B. Ilic, P. Neuzil, e R. Kumar, *Phys. Rev. B* **62**, 11719 (2000).
- [11] I. Guedes, M. Grimsditch, V. Metlushko, P. Vavassori, R. Camley, B. Ilic, P. Neuzil, e R. Kumar, *Phys. Rev. B* **66**, 14434 (2002).
- [12] S. Gopalan e M. G. cottam, *Phys. Rev. B* **42**, 10311 (1990).
- [13] W. Z. Shen e Z. Y. Li, *Phys. Status Solidi B* **171**, 493 (1992).
- [14] J. M. Wesselinowa, N. Teofilov, e W. Nolting, *Phys. Rev. B* **57**, 6508 (1998).
- [15] M. Berciu e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. B* **66**, 085207 (2002).
- [16] S. D. Sarma, E. H. Hwang, e A. Kaminski, *Phys. Rev. B* **67**, 155201 (2003).
- [17] A. Melissinos, *Principles of Modern Technology* (Cambridge University Press, New York, 1990).
- [18] R. Enderlein, *Microeletrônica* (Edusp, São Paulo, 1994).
- [19] E. Regis, *Nano* (Editora Rocco, Rio de Janeiro, 1997).
- [20] Y. Izyumov, *Proc. Phys. Soc.* **87**, 505 (1966).
- [21] R. A. Cowley e W. J. L. Buyers, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 406 (1972).

- [22] N. N. Chen e M. G. Cottam, *Phys. Rev. B* **44**, 7466 (1991).
- [23] N. N. Chen e M. G. Cottam, *Phys. Rev. B* **45**, 266 (1991).
- [24] R. N. C. Filho, U. M. S. Costa, e M. G. Cottam, *J. Magn. Magn. Mater.* **189**, 234 (1998).
- [25] R. V. Leite, J. M. P. Jr., e R. N. C. Filho, *J. Magn. Magn. Mater.* (2004).
- [26] N. N. Chen e M. G. Cottam, *Solid State Communications* **76**, 437 (1990).
- [27] U. M. S. Costa, R. N. C. Filho, e M. G. Cottam, *J. Magn. Magn. Mater.* **213**, 195 (2000).
- [28] R. V. Leite, B. T. F. Moraes, J. M. P. Jr., e R. N. C. Filho, *J. Magn. Magn. Mater.* **283**, 385 (2004).
- [29] D. N. Zubarev, *Sov. Phys. Uspekhi* **3**, 320 (1960).
- [30] B. A. Shiway e M. G. Cottam, *Phys. Status Solidi B* **134**, 597 (1986).
- [31] U. M. S. Costa, R. N. C. Filho, e M. G. Cottam, *J. Magn. Magn. Mater.* **189**, 234 (1998).
- [32] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1987).
- [33] P. W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*, 2th edition ed. (Oxford University Press, Oxford, 1983).
- [34] R. Kubo, *Statistical Mechanics* (Interscience Publishers, New York, 1965).
- [35] F. Reif, *Statistical Physics* (Berkeley Physics Course , V5, Mgraw-Hill Book Company, 1965).
- [36] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, 1986).
- [37] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics, A Set of Lectures* (Addison-Wesley Publishing Company, 1972).
- [38] R. Kubo, *J. Physics Soc.* **12**, 570 (1957).
- [39] N. N. Bogolyubov e S. V. Tyablikov, *Soviet Phys.-Doklady* **4**, 604 (1959).
- [40] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, 1980).
- [41] H. Cartan, *Théorie Élémentaire des Fonctions Analytiques* (Hermann, Paris, 1961).
- [42] D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 1987).
- [43] E. Hille, *Analytic Function Theory* (Chelsea Publications, 1976).
- [44] W. Lenz, *Z. Phys.* **21**, 613 (1920).
- [45] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).

-
- [46] R. Peierls, Proc. Cambridge Phil. Soc. **32**, 477 (1936).
- [47] H. A. Kramers e G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).
- [48] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 177 (1944).
- [49] S. G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967).
- [50] J. Oitmaa e M. Plischke, J. Phys. C: Solid State Phys. **9**, 2093 (1976).
- [51] R. Blinc e B. Zeks, *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics* (North-Holland, Amsterdam, 1974).
- [52] R. B. Stinchcombe, J. Phys. C **6**, 2459 (1973).
- [53] R. J. Elliott e A. P. Young, Ferroelectrics **7**, 23 (1974).
- [54] G. B. Arfken e H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 4th edition ed. (Academic Press, 1995).
- [55] R. Blinc e B. Zeks, J. Phys. C **17**, 1793 (1984).
- [56] M. G. Cottam e D. J. Lockwood, *Light Scattering in Magnetic Solids*, 4th edition ed. (John Wiley & Sons Inc., New York, 1986).
- [57] M. G. Cottam, D. R. Tilley, e B. Zeks, J. Phys. C **17**, 1793 (1984).
- [58] R. V. Leite, J. M. P. Jr., e R. N. C. Filho, J. Magn. Magn. Mater. **283**, 385 (2004).
- [59] V. N. Faddeeva, *Computational Methods of Linear Algebra* (Dover Publication, New York, 1959).
- [60] R. E. Dewames e T. Wolfram, Phys. Rev. **185**, 720 (1969).
- [61] M. G. Cottam, J. Phys. C **9**, 2121 (1976).
- [62] H. B. Moller, J. C. G. Houmann, e A. R. Machintosh, Phys. Rev. Lett. **19**, 372 (1967).