UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MÁRCIO DE MELO FREIRE

TEORIA DE FUNÇÕES DE GREEN PARA UMA IMPUREZA ISOLADA LOCALIZADA INTERSTICIALMENTE EM SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

FORTALEZA

2017

MÁRCIO DE MELO FREIRE

TEORIA DE FUNÇÕES DE GREEN PARA UMA IMPUREZA ISOLADA LOCALIZADA INTERSTICIALMENTE EM SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

Coorientador: Prof. Dr. Raimundo Valmir Leite Filho

FORTALEZA
2017

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)

F934t Freire, Márcio de Melo.
Teoria de funções de Green para uma impureza isolada localizada intersticialmente em sistemas ferromagnéticos / Márcio de Melo Freire. – 2017.
140 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física , Fortaleza, 2017.
Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

1. Função de Green. 2. Modelo de Heisenberg-Ising. 3. Ferromagnetos. 4. Ondas de spin. 5. Modos de impureza. I. Título.

CDD 530

MÁRCIO DE MELO FREIRE

TEORIA DE FUNÇÕES DE GREEN PARA UMA IMPUREZA ISOLADA LOCALIZADA INTERSTICIALMENTE EM SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 15/02/2017

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Raimundo Valmir Leite Filho
Universidade Estadual Vale do Acaraú (UVA)

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Luiz Ozorio de Oliveira Filho
Universidade Estadual Vale do Acaraú (UVA)

Aos meus pais, meus filhos e minha esposa

AGRADECIMENTOS

Ao professor Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela orientação.

Ao professor Raimundo Valmir Leite Filho, pela coorientação.

Aos professores do departamento de física, pelos conhecimentos repassados.

Aos professores do curso de física da UVA, em especial ao professor Luiz Ozorio de Oliveira Filho, pelos conhecimentos repassados.

Aos amigos Rivânia Maria, Leandro de Oliveira, Francisco Emanuel, Antôio Ribeiro, Naiara Cipriano, Mauricélio Bezerra, Tiago Muniz e Emanuel Wendell, pelo companheirismo.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Um formalismo da função de Green é usado para calcular o espectro de excitações associadas com uma impureza magnética localizada intersticialmente em diferentes estruturas ferromagnéticas descritas pelo modelo de Ising e de Heisenberg. No capítulo 3, descrevemos um ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita através do modelo de Ising. Neste caso, as excitações não-ressonantes (isto é, os modos de defeito fora da região das ondas de spin de volume e de superfície) e as excitações ressonantes (os modos de defeito dentro da região das ondas de spin de volume) são calculadas numericamente para a fase de alta-temperatura. Duas situações são analisadas, dependendo da posição da impureza em relação a seus vizinhos: a impureza está na superfície ($N = 1$); a impureza está na região de volume ($N \geq 2$). Nos demais capítulos, usamos o modelo de Heisenberg/Ising (onde passamos do modelo de Heisenberg para o de Ising através do controle de um parâmetro λ) para descrever os seguintes sistemas: ferromagneto de rede quadrada infinita (capítulo 4), ferromagneto de rede quadrada centrada infinita (capítulo 5), ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita (capítulo 6) e rede favo de mel infinita (capítulo 7), todos contendo uma impureza magnética localizada intersticialmente. Nos três primeiros casos, são calculados apenas os modos de defeito acima da banda de volume do material puro (modos ópticos). No capítulo 7, são analisados apenas os modos de defeito abaixo da banda de volume do material puro (modos acústicos).

Abstract

A Green's function formalism is used to calculate the expectrum of excitations associated with an interstitial magnetic impurity in different ferromagnetic structures described by the Ising and Heisenberg models. In the chapter 3 the non-resonant excitations of the system due to impurity (i.e, the defect modes outside the region of the bulk and surface spin waves) and the resonant excitations (the defect modes inside the region of the bulk and surface spin waves) are calculated numerically for the high-temperature phase. Two situations are analysed, depending on the position of the impurity: the impurity is on the surface ($N = 1$) and the impurity is in the bulk region ($N \geq 2$). In the others chapters we use the model Ising/Heisenberg (where we can go from Heisenberg model to Ising model, by controlling the value of a parameter λ) to describe the following systems: ferromagnet with an infinite square lattice (Chap. 4), ferromagnet with an infinite face-centered square lattice (Chap. 5), ferromagnet with an infinite body-centered cubic lattice (Chap. 6) and ferromagnet with an infinite honey-comb lattice (Chap. 7), all the systems with a magnetic interstitial impurity. For the first tree cases, only the optical

defect modes are calculated, and for the last one, only the acoustic modes are calculated.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Gráfico da função degrau ou função de Heaveside. 24
Figura 2 – Contorno de integração da Eq.2.36 para valores negativos da variável tempo. 37
Figura 3 – Contorno de integração da Eq.2.36 para valores positivos da variável tempo. 37
Figura 4 – Ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita. 48
Figura 5 – Ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita contendo uma impureza intersticial na camada $n = 1$, por exemplo. 54
Figura 6 – A impureza pode ocupar qualquer posição dentro da região A. 59
Figura 7 – Frequências dos modos de defeito versus campo aplicado (h'/h), no caso de $N = 10$, para diferentes valores de $(p; k)$: (0,3;0,0) para a linha contínua, (0,3;0,3) para a linha pontilhada, (0,49;0) para a linha tracejada e (0,49;0,49) para a linha traço-pontilhada. Assumimos que $J_S/J = 1,0$. 63
Figura 8 – Frequências dos modos de defeitos versus interação de troca (J'/J), no caso de $N = 10$, para diferentes valores de $(p; k)$: (0,3;0) para a linha contínua, (0,3;0,3) para a linha pontilhada, (0,49;0) para a linha tracejada e (0,49;0,49) para a linha traço-pontilhada. Assumimos que $J_S/J = 1,0$, $h'/h = 1,5$. 63
Figura 9 – Frequências dos modos de defeito versus interação de troca no caso de $N = 10$ para diferentes valores de h'/h: $h'/h = 1,5$ para a linha tracejada, $h'/h = 1,8$ para a linha pontilhada e $h'/h = 2,0$ para a linha contínua. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,3; 0,3)$. 64
Figura 10 – Frequências dos modos de defeito versus campo aplicado no caso de $N = 10$ para diferentes valores de J'/J: $J'/J = 1,5$ para a linha contínua, $J'/J = 1,8$ para a linha pontilhada e $J'/J = 2,0$ para a linha tracejada. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,49; 0,49)$. 64
Figura 11 – Frequências dos modos de defeito versus interação de troca no caso de $N = 1$ para diferentes valores de h'/h: $h'/h = 1,5$ para a linha tracejada, $h'/h = 1,8$ para a linha pontilhada e $h'/h = 2,0$ para a linha contínua. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,3; 0,3)$. 65

Figura 12 – Frequências dos modos de defeito versus interação de troca para $h'/h = 1,0$ no caso de $N = 1$ e para diferentes valores de J_S/J: $J_S/J = 1,0$ para a linha contínua, $J_S/J = 1,3$ para a linha pontilhada e $J_S/J = 1,35$ para a linha tracejada. 65
Figura 13 – Modos associados com uma impureza intersticial na camada da superfície ($N = 1$). Gráfico da frequência ω (energia) versus interação de troca J', mostrando ambos os modos de defeito e os modos ressonantes. O limite inferior da banda de volume está indicada por uma linha horizontal em $\omega/J \approx 0,63$, e o limite superior está também indicada por uma linha horizontal, mas em $\omega/J \approx 1,26$. 67
Figura 14 – Modos de impureza mostrados próximos do limite inferior da banda de volume da onda de spin na presença de um modo de superfície (considerando $J_S/J = 0,74$), assumindo que a impureza está na camada da superfície ($N = 1$). 67
Figura 15 – Modos de impureza mostrados próximos do limite inferior da banda de volume da onda de spin na presença de um modo de superfície acústico (tomando $J_S/J = 1,251$), assumindo que a impureza está na camada da superfície ($N = 1$). 68
Figura 16 – Ferromagneto de rede quadrada infinita. 70
Figura 17 – Ferromagneto de rede quadrada infinita contendo uma impureza intersticial. 71
Figura 18 – Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede quadrada infinita, e seus quatro primeiro vizinhos. 75
Figura 19 – Impureza intersticial e seus quatro primeiro vizinhos num ferromagneto de rede quadrada infinita. 77
Figura 20 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ. 79
Figura 21 – Frequências de ondas de spin em função de λ para diferentes valores de $q_x a/\pi$. 79
Figura 22 – Gráfico do contorno para os efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre a frequência (energia) ω/J 80
Figura 23 – Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 1,0$ e alguns valores de λ. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita. 80
Figura 24 – Frequências de ondas de spin como função de h'/h, para $J'/J = 0,2$, $S'/S = 1,0$ e $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita. 81

Figura 25 – Frequências de ondas de spin como funcao de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita. Tomamos o valor $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). 81
Figura 26 – Frequências de ondas de spin como função de λ, para $h'/h = 2.0$, $S'/S = 1,0$ e $J'/J = 0,04$. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita. 82
Figura 27 – Ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. 85
Figura 28 – Ferromagneto de rede quadrada centrada infinita contendo uma impureza intersticial (círculo na cor preta). 86
Figura 29 – Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede quadrada centrada infinita, e seus quatro primeiro vizinhos. 87
Figura 30 – Impureza intersticial e seus cinco primeiro vizinhos, num ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. 89
Figura 31 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ. Tomamos o valor fixo $q_y = 0$. 91
Figura 32 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ. Tomamos o valor $q_y = 2\pi$. 91
Figura 33 – Frequências de ondas de spin como funçãoo de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e alguns valores de λ. Modos localizados p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. . 92
Figura 34 – Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e alguns valores de λ. Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. 92
Figura 35 – Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Tomamos o valor fixo $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). 93
Figura 36 – Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Tomamos o valor $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). 93
Figura 37 – Frequências de ondas de spin como função de λ, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e o valor de $J'/J = 0,05$. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. 94
Figura 38 – Ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita. 96

Figura 39 – Ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita contendo uma impureza intersticial (círculo na cor preta). 97
Figura 40 – Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita, e seus oito primeiro vizinhos. 98
Figura 41 – Impureza intersticial (círculo na cor preta) e seus nove primeiros vizinhos, num ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita. 100
Figura 42 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e os valores fixos de $q_y = 0$ e $q_z = 2\pi$. 103
Figura 43 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ, e os valores fixos $q_y = q_z = 2\pi$. 103
Figura 44 – As energias dos modos de defeito ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 3,5$ em uma amostra ferromagnética com $S = 2$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, versus interação de troca. Demais parâmetros encontram-se no texto. 104
Figura 45 – As energias dos modos de impureza ópticos associados com alguns tipos de impurezas em uma amostra ferromagnética com $S = 2$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, versus interação de troca. $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3,5$ (linha tracejada). 104
Figura 46 – As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 3,5$ em uma amostra ferromagnética de $S = 2$ para um valor $J'/J = 0,038$, versus campo aplicado na impureza. 105
Figura 47 – As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 2$ em uma amostra ferromagnética de $S = 1,5$, em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, plotados contra J'/J. 105
Figura 48 – As energias dos modos de impureza ópticos associados com alguns tipos de impurezas em uma amostra ferromagnética com$S = 1,5$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, versus interação de troca. $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3,5$ (linha tracejada). 106
Figura 49 – As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 2$ em uma amostra ferromagnética com $S = 1,5$, para um valor $J'/J = 0,063$, versus campo aplicado na impureza. Demais parâmetros são dados no texto. 106

Figura 50 – Ferromagneto de rede favo de mel infinita pura. Um sítio qualquer l, situado na sub-rede A (círculos em branco), e seus três primeiros vizinhos (1, 2 e 3), situados na sub-rede B (círculos em cinza). 109
Figura 51 – Ferromagneto de rede favo de mel infinita impura. Uma impureza intersticial o (círculo em preto), no centro de um dos hexágonos, e seus seis primeiros vizinhos (três na sub-rede A e três na sub-rede B). 112
Figura 52 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e o valor fixo de $q_y = 0$, para um ferromagneto com $S = 1$ 114
Figura 53 – Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e o valor fixo de $q_y = 0$, para um ferromagneto com $S = 2$ 115
Figura 54 – Gráfico do contorno para os efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre a frequência (energia) ω/J, para um ferromagneto com $S = 1$.115
Figura 55 – As energias dos modos de impureza acústicos associados a uma impureza intersticial de $S'/S = 1,5$ em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (com número quântico de spin $S = 1$) em um campo magnético externo de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J. 116
Figura 56 – As energias dos modos de impureza acústicos associados a diferentes impurezas intersticiais: $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S'/S = 2$ (linha contínua), em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (com número quântico de spin $S = 1$) em um campo magnético externo na impureza de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J. 116
Figura 57 – As energias dos modos de impureza acústicos associados a uma impureza intersticial de $S'/S = 1,5$ em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (outro material com número quântico de spin $S = 2$) em um campo magnético externo, na impureza, de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J. 118
Figura 58 – As energias dos modos de impureza acústicos associados a diferentes impurezas intersticiais: $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S' = 2$ (linha contínua), em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (outro material com número quântico de spin $S = 2$) em um campo magnético externo, na impureza, de valor $h = 0,55$, plotados contra J'/J. 118
Figura 59 – A semi-infinite ferromagnet with a (001) surface and a simple-cubic structure. 3
Figura 60 – A semi-infinite ferromagnet with a (001) surface and a simple-cubic structure, with an isolated single interstitial magnetic impurity located in the surface layer, for instance. 4

Figura 61 – The impurity can occupies any position in the region A. 7
Figura 62 – Calculated values of ω/J for the defect modes in the case of $N = 10$ plotted against h'/h for different values of (p, k) (solid curve, (0.3;0); dotted curve, (0.3;0.3); dashed curve, (0.49;0); dot-dashed curve (0.49;0.49). It has been assumed that $J_S/J = 1.0$, $J'/J = 1.5$ and others parameters are given in the text. 9
Figura 63 – Calculated values of ω/J for the defect modes in the case of $N = 10$ plotted against J'/J for different values of (p, k) (solid curve, (0.3;0); dotted curve, (0.3;0.3); dashed curve, (0.49;0); dot-dashed curve (0.49;0.49). It has been assumed that $J_S/J = 1.0$, $h'/h = 1.5$ and others parameters are given in the textJ'/J 9
Figura 64 – Calculated values of ω/J for the defect modes in the case of $N = 10$ plotted against J'/J for different values of h'/h (dashed curve, $h'/h = 1.5$; dotted curve, $h'/h = 1.8$; solid curve, $h'/h = 2.0$. It has been assumed a fixed value for p and k: $(p, k) = (0.3; 0.3)$ 10
Figura 65 – Calculated values of ω/J for the defect modes in the case of $N = 10$ plotted against h'/h for different values of J'/J (solid curve, $J'/J = 1.5$; dotted curve, $J'/J = 1.80$; dashed curve, $J'/J = 2.0$. It has been assumed a fixed value for p and k: $(p, k) = (0.49; 0.49)$. 10
Figura 66 – As in 64, but for the case of $N = 1$ 10
Figura 67 – Calculated values of ω/J for the defect modes in the case of $N = 1$ plotted against J'/J for $h'/h = 2.0$ and for different values of J_S/J (solid curve, $J_S/J = 1.0$; dotted curve, $J_S/J = 1.3$; dashed curve, $J_S/J = 1.34$). 11
Figura 68 – Modes associated with an impurity spin in the surface layer ($N = 1$) plotted for the energy ω and showing both the defect and resonance modes. The lower edge of the bulk band is indicated by the horizontal line at $\omega/J \approx 0.63$, and the upper one, is at $\omega/J \approx 1.26$. 13
Figura 69 – Impurity modes shown near the lower edge of the bulk spin-wave band and below in the presence of an optical surface mode (taking $J_S/J = 0.74$), assuming the impurity to be in the surface layer ($N = 1$). Others parameters are given in the text. 13
Figura 70 – Impurity modes shown near the lower edge of the bulk spin-wave band and below in the presence of an acoustic surface mode (taking $J_S/J = 1.251$), assuming the impurity to be in the surface layer ($N = 1$). Others parameters are given in the text. 13

SUMÁRIO

Resumo 6

Abstract 6

1 INTRODUÇÃO 15

1.1 O Modelo de Heisenberg 18

1.2 O Modelo de Ising 20

2 FUNÇÕES DE GREEN EM MECÂNICA ESTATÍSTICA . . 22

2.1 Funções de Green Retardada, Avançada e Causal 22

2.2 Equações de Evolução para as Funções de Green 26

2.3 Funções de Correlação Temporal 27

2.4 Representação Espectral Para as Funções de Correlação Temporal 29

2.5 Representações Espectrais para G_r e G_a 34

2.6 Representação Espectral para G_C 44

3 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE CÚBICA SIMPLES SEMI-INFINITA 47

3.1 Introdução 47

3.2 Modelo e Formalismo da Função de Green 47

3.3 Os modos de Impureza 58

3.4 Resultados Numéricos 62

3.5 Modos Ressonantes 66

4 IMPUREZA INTERSTICIAL NUM FERROMAGNETO DE REDE QUADRADA INFINITA 69

4.1 Introdução 69

4.2 Modelo e Formalismo da função de Green 70

4.3 Modos de impureza e resultados numéricos 77

5 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE QUADRADA CENTRADA INFINITA 84

5.1 Introdução 84

5.2 Modelo e formalismo da função de Green 84

5.3 Modos de impureza e resultados numéricos 88

6 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE CÚBICA DE CORPO CENTRADO INFINITA 95
6.1 Introdução 95
6.2 Modelo e formalismo da função de Green 95
6.3 Modos de impureza e resultados numéricos 100
7 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE FAVO DE MEL INFINITA 108
7.1 Introdução 108
7.2 Modelo e formalismo da função de Green 108
7.3 Modos de impureza e resultados numéricos 113
8 CONCLUSÕES 120
REFERÊNCIAS 123
APÊNDICE A – EQUAÇÃO DE DYSON 129
APÊNDICE B – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 4.20 131
APÊNDICE C – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 4.25 133
APÊNDICE D – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 7.6 135
APÊNDICE E – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 7.20 137
APÊNDICE F – GREEN'S FUNCTIONS THEORY FOR AN INTERSTITIAL MAGNETIC IMPURITY IN A TRANSVERSE ISING FERROMAGNET 139
ABSTRACT 140
REFERÊNCIAS 15

1 INTRODUÇÃO

O magnetismo tem sido observado desde a antiguidade,sendo foco de muitas descobertas responsáveis por uma série de conquistas em diversos ramos como na medicina, informática, telecomunicações, etc. Esse grande leque de aplicações se deve aos materiais magnéticos que apresentam propriedades importantes e com finalidades bem definidas.

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 íons 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 íons, onde predomina a interação de um íon 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 íon. 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 fônon.

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 mágnons. 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: são vazios pontuais causados pela ausência de átomos em algumas posições na rede cristalina.

Átomos substitucionais: são defeitos provocados pela presença de átomos estranhos nos próprios vértices da rede cristalina.

Átomos intersticiais: são defeitos provocados pela presença de átomos estranhos nos interstícios da rede cristalina. Em cristais iônicos, tais defeitos são inteiramente responsáveis pela condutividade elétrica e podem alterar profundamente suas propriedades ópticas e, em particular, sua cor.

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 e dentro dos limites da banda de frequências de excitação para um cristal puro. Estes modos são chamados de modos de defeito e modos ressonantes, respectivamente. 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 [1]. Recentemente, muitos trabalhos relativos ao estudo de impurezas em sistemas ferromagnéticos e antiferromagnéticos de Heisenberg, usando a técnica de funções de Green (F.G.) para determinar os modos de impurezas, foram publicados [2]-[7]. Estudos experimentais incluem o espalhamento inelástico da luz [8]. Trabalhos relativos ao estudo de impurezas de um sistema ferromagnético descritos pelo modelo de Ising com campo transverso [9]-[19], e pelo modelo Heisenberg/Ising [70],também foram publicados.

Neste trabalho estudamos o espectro de ondas de spin relativas a uma impu-

reza intersticial localizada em sistemas ferromagnéticos, descritos pelos modelos de Ising e de Heisenberg. Para tanto, 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 deste trabalho. Introduzimos a teoria de F.G. em física da matéria condensada, um método matemático estabelecido por Zubarev [30], cuja aplicação é direcionada para a solução de problemas em sistemas ferromagnéticos. Seguimos, também, a referência [31].

No capítulo 3, fazemos o desenvolvimento do modelo e formalismo da função Green para um sistema ferromagnético de rede cúbica simples semi-infinita, seguindo as referências [11, 18] e aplicamos a técnica de F.G., fundamentada no capítulo 2, para calcular o espectro de excitações para uma impureza intersticial localizada na face que está no plano paralelo à superfície da rede cúbica simples semi-infinita. Faremos com que a posição desta impureza varie, de modo que ela possa ocupar todos os pontos possíveis dentro desta face. Determinamos a equação de movimento para as F.G., onde o sistema é descrito através do modelo de Ising com campo transverso. Como consideramos apenas interações entre primeiros vizinhos, a interação da impureza será com os quatro sítios dos vértices da face em questão. Primeiramente obtemos resultados para as frequências dos modos defeituosos não ressonantes (modos acústicos), como função do parâmetro de troca entre a impureza e seus vizinhos e do campo magnético aplicado. Em seguida empregamos os resultados das funções de Green, aqui encontrados, para estudar os modos ressonantes, ou seja, os modos localizados dentro da banda de volume do material puro.

Nos capítulos 4, 5, 6 e 7, utilizamos o modelo de Heisenberg/Ising para descrever estruturas ferromagnéticas de redes: quadrada infinita, quadrada centrada infinita, cúbica de corpo centrado infinita, favo de mel infinita, respectivamente. Neste modelo, podemos passar do modelo de Heisenberg para o modelo de Ising através do controle de um parâmetro λ (para $\lambda = 1$, temos o modelo de Heisenberg e para $\lambda = 0$, temos o modelo de Ising). Também aplicamos a técnica de F.G. para calcular o espectro de excitações para uma impureza localizada intersticialmente nas estruturas ferromagnéticas apresentadas.

1.1 O Modelo de Heisenberg

Para compreender a origem da interação de troca em uma rede de spin vamos inicialmente considerar apenas dois elétrons localizados em sítios vizinhos em uma rede de spin ou, por simplicidade, uma corrente 1D. A função de onda do total de dois elétrons pode ser construída a partir de funções de ondas eletrônicas individuais, que consistem de uma parte devida a função de onda de spin e uma parte devida a função de onda orbital.

A condição de simetria do princípio de exclusão de Pauli é então satisfeito se a função de onda orbital antissimétrica é multiplicada por uma função de onda de spin simétrica, ou vice-versa. A competição entre a interação coulombiana de repulsão eletrostática para dois elétrons em uma rede de spin e combinações possíveis para o estado fundamental faz a energia de interação entre os dois spins $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{S}_j$ depender de sua orientação relativa, que é usualmente expressa em termos do seu produto escalar. O Hamiltoniano do sistema é então dado pelo seguinte termo de troca de Heisenberg:

$$H_{Heisenberg} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \tag{1.1}$$

onde $J_{i,j}$ é conhecida como a constante de troca entre os sítios mais próximos i e j. O valor de $J_{i,j}$ é usualmente obtido experimentalmente. Essencialmente, ele depende do grau de sobreposição das funções de onda eletrônicas. Quando $J_{i,j}$ é maior que zero, os spins na rede estão preferencialmente alinhados paralelamente que é a configuração ferromagnética. Quando $J_{i,j}$ é menor que zero, os spins na rede estão alinhados anti-paralelamente, o que caracteriza a configuração antiferromagnética. O Hamiltoniano de Heisenberg é formalmente similar ao Hamiltoniano *tight biding,* pois ambos são dominados por interações entre primeiros vizinhos [81, 82, 83, 84, 85] .

Desde que o elétron tenha um momento magnético dado por $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\mathbf{S}/\hbar$ (μ_B é o magneto de Bohr, e g é chamado o fator de Landé, sendo igual a 2 para um elétron livre), quando ele é submetido a um campo externo $\mathbf{h}$ sua energia potencial U devida ao campo é

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{h}. \tag{1.2}$$

A presença de um campo magnético desloca a energia do elétron por uma quantidade proporcional à componente do momento angular de spin na direção z ao longo do campo magnético. Isto é chamado o efeito Zeeman [86], e sua contribuição ao Hamiltoniano total é

$$H_{Zeeman} = -g\mu_B h\sum_i S_i^z. \tag{1.3}$$

O Hamiltoniano total para a rede de spin, incluindo o termo de troca de Heisenberg e o termo de energia Zeeman pode ser escrito como segue:

$$H_{Total} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B h\sum_i S_i^z. \tag{1.4}$$

1.2 O Modelo de Ising

Na tentativa de explicar o ferromagnetismo com bases não fenomenológicas, Lenz [61] 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 [62] 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

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i h_i S_i^z, \tag{1.5}$$

onde J é a constante de troca, h é o campo aplicado em todos os sítios e S_i^z é a componente z do spin nos sítios $i = 1, 2, 3, \cdots, N$ 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. 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 magnetização espontânea para temperaturas suficientemente baixas, como mostrado por Peierls [63]. A temperatura crítica do modelo bidimensional foi determinada exatamente por Kramers e Wannier [64]. Onsager [65] 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 [66].

No estudo de excitações magnéticas, o modelo de Ising com campo transverso 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 $TbVO_4$ [67]. Um estudo de revisão

do modelo foi feito por Blinc e Zeks [9], [69] e por Elliott e Young [71]. Aliado à técnica das F.G., o modelo de Ising com campo transverso tem sido amplamente aplicado para estudar a propagação de ondas de spin em sistemas magnéticos.

2 FUNÇÕES DE GREEN EM MECÂNICA ESTATÍSTICA

Na física teórica tem-se diversas classes de funções de Green [21, 22, 23, 24, 25, 26]. A diferença entre elas está na forma de tomarmos os valores médios dos produtos de operadores que aparecem. Se a média for tomada no estado fundamental do sistema, tem-se as funções de Green de teoria de campos [27, 28]. Se a média for tomada sobre um ensemble estatístico, tem-se as funções de Green da mecânica estatística ou termodinâmica. Destacamos que na maioria dos casos basta considerar as funções que dependem de dois tempos, tanto retardadas quanto avançadas.

Neste capítulo estabeleceremos as definições e propriedades das funções de Green, obtendo as equações de evolução para as mesmas. Introduziremos as funções de correlação temporal e representações espectrais.

2.1 Funções de Green Retardada, Avançada e Causal

Podemos considerar em mecânica estatística, assim como em teoria quântica de campos, diferentes tipos de funções de Green, entre elas a função de Green causal de duplo tempo $G_c(t,t')$, definida em termos do valor médio do produto $\hat{T}$ de operadores, ou as funções de Green retardada e avançada,$G_r(t,t')$ e $G_a(t,t')$.

Definimos as funções de Green retardada $G_r(t,t')$, avançada $G_a(t,t')$ e causal $G_c(t,t')$ da seguinte forma [29, 30, 31]:

$$G_r(t,t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_r = -i\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle; \tag{2.1a}$$

$$G_a(t,t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_a = i\theta(t'-t)\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle; \tag{2.1b}$$

$$G_c(t,t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_c = -i\langle T\{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\}\rangle, \tag{2.1c}$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A}$ é o comutador ou anticomutador dos operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$. O sinal de η é escolhido positivo ou negativo dependendo do que for mais conveniente para o problema. Usualmente escolhe-se o sinal positivo se $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são operadores de Bose (para bósons, temos $\eta = 1$ e a relação entre os operadores será de comutação) e o negativo, se eles são operadores de Fermi (para férmions, temos $\eta = -1$ e a relação entre os operadores será de anticomutação)[32, 31]. Porém, esta não é a única escolha possível.

Nestas definições das funções de Green, aparece a relação $\langle\hat{A}\hat{B}\rangle$ {ou $\langle\hat{B}\hat{A}\rangle$} que corresponde ao valor médio estatístico do produto de operadores. Esta média é feita sobre o ensemble grão-canônico [33, 34].

Ensemble é definido como sendo uma coleção de sistemas físicos, idênticos entre

si e preparados nas mesmas condições macroscópicas, que se encontram nos diferentes microestados acessíveis. O ensemble grão-canônico possui um volume definido em contato com uma fonte térmica com a qual também troca partículas.

A média feita sobre o ensemble grão-canônico é expressa em termos do traço (soma dos elementos da diagonal principal de uma matriz) deste produto. Assim, o valor médio estatístico de um operador $\hat{X}$ é dado por [31]

$$\langle \hat{X} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{X}\}}{\Theta}, \tag{2.2}$$

onde

$$\Theta = \mathrm{Tr}\{\ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\}$$

é a função de grão-partição, sendo $\hat{H}$ o operador Hamiltoniano independente do tempo e $\hat{N}$, o operador número total de partículas do sistema. O parâmetro β é dado por $\beta = 1/k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta. μ é o potencial químico [33, 34].

A aplicação do ensemble grão-canônico é muito conveniente quando o número total de partículas precisa ser levado em consideração e, também, o número de ocupação dos diferentes estados são independentes.

A dependência temporal dos operadores fica explicada por trabalharmos na representação de Heisenberg e sua equação de movimento é satisfeita por estes operadores, de modo que

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}\hat{A}e^{\frac{-i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} = e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}, \tag{2.3}$$

onde usamos uma unidade de medida na qual $\hbar = 1$ e definimos $\hat{\mathcal{H}}$ como

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu\hat{N}. \tag{2.4}$$

As funções de Green contêm, também, a função degrau ou função de Heaveside [35] definida como sendo $\theta(t) = 1$, para $t > 0$ e $\theta(t) = 0$, para $t < 0$, conforme mostra a Fig. 1.

Derivando esta função no ponto $t = 0$, sua derivada tende ao infinito, caracterizando a função delta de Dirac. Matematicamente temos

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t) \tag{2.5}$$

e

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} \delta(t)dt \tag{2.6}$$

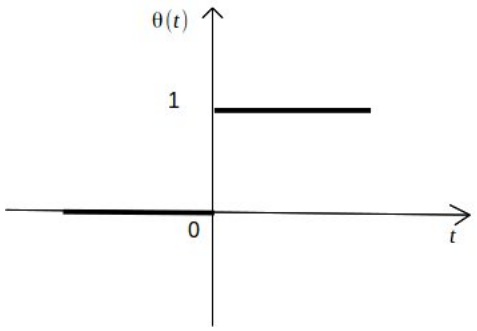

Figura 1: Gráfico da função degrau ou função de Heaveside.

Na função de Green causal aparece o operador de ordenamento temporal $\hat{T}$, de modo que

$$\hat{T}\{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\} = \hat{A}(t)\hat{B}(t'),$$

para $t > t'$ e

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

para $t < t'$, ou ainda:

$$\hat{T}\{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\} = \theta(t-t')\hat{A}(t)\hat{B}(t') + \eta\theta(t'-t)\hat{B}(t')\hat{A}(t). \tag{2.7}$$

Devido a função degrau, as funções de Green (retardada, avançada e causal) não estão definidas em $t = t'$.

Podemos verificar que tais funções de Green dependem de t e t' através da diferença $t - t'$ calculando o valor médio estatístico de $\hat{A}(t)\hat{B}(t')$. Vejamos.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle &= \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{A}(t)\hat{B}(t')\}}{\Theta} \\
&= \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}\}}{\Theta} \\
&= \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}\}}{\Theta} \\
&= \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}(t-t')}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')}\hat{B}\}}{\Theta} \\
&= \frac{\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{A}(t-t')\hat{B}\}}{\Theta},
\end{aligned} \tag{2.8}$$

onde usamos a propriedade de que os operadores podem ser permutados ciclicamente dentro do traço. Então podemos escrever

$$\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \equiv F_{AB}(t-t'). \tag{2.9}$$

Considerando que as funções de Green contêm termos do tipo $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle$ e $\langle \hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle$ podemos escrever

$$\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_{r,a,c} = \langle\langle \hat{A}(t-t'); \hat{B}\rangle\rangle_{r,a,c} = \langle\langle \hat{A}; \hat{B}(t'-t)\rangle\rangle_{r,a,c}. \tag{2.10}$$

Assim as funções de Green, em estatística, não dependem somente do tempo mas, também, da temperatura, de modo que, quando esta tende a zero nas Eqs. 2.1, teremos as funções de Green da teoria de campo. Estas funções são as funções de Green causais de tempo múltiplo e são definidas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} &G_C(\vec{X}_1 t_1, \cdots, \vec{X}_n t_n, \vec{X}'_1 t'_1, \cdots, \vec{X}'_n t_n) \\ &\equiv \langle 0|\hat{T}\{\psi(\vec{X}_1 t_1)\cdots\psi(\vec{X}_n t_n)\psi^\dagger(\vec{X}'_1 t'_1)\psi^\dagger\cdots\psi^\dagger(\vec{X}'_n t'_n)|0\rangle, \end{aligned}$$

onde $\hat{T}$ é o operador de ordenamento temporal, definido como anteriormente, e $|0\rangle$ é o estado fundamental do sistema. $\psi(\vec{X}_n t_n)$ e $\psi^\dagger(\vec{X}_n t_n)$ são funções de campo na segunda quantização [26, 27, 32] na representação de Heisenberg

$$\psi(\vec{X}, t) = \sum_k a_k(t)\varphi_k(\vec{X})$$

e

$$\psi^\dagger(\vec{X}, t) = \sum_k a_k^\dagger(t)\varphi_k^*(\vec{X}).$$

a_k e $a_k^\dagger$ são os operadores de aniquilação e destruição (operadores de Fermi ou Bose), $\varphi_k(\vec{X})$ é um conjunto ortogonal completo de funções de uma partícula.

A função de Green retardada é definida somente para $t > t'$ e representa uma informação que foi emitida no tempo t' sendo recebida no instante t, posterior a t'. Já a função de Green avançada é definida apenas para $t < t'$ e representa uma informação que foi emitida num tempo t' e que é recebida no instante t, anterior a t', apresentando, assim, dificuldades quanto a uma interpretação física, sendo, portanto, uma ferramenta matemática que eventualmente pode ser utilizada como artifício de cálculo em algum problema específico. E quanto a função de Green causal, ela está definida para qualquer valor não-nulo de $t - t'$.

Essas funções são muito convenientemente aplicadas em estatística quântica para problemas envolvendo um sistema de muitas partículas interatuantes. Os operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ podem ser de diferentes tipos, tais como os operadores de criação ou de destruição e seus produtos, operador densidade, dentre outros. A escolha dos operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ é determinada pelas condições do problema.

2.2 Equações de Evolução para as Funções de Green

Podemos obter um conjunto de equações para as funções de Green. Como estamos trabalhando na representação de Heisenberg, os operadores satisfazem sua equação de movimento de modo que

$$i\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}], \tag{2.11}$$

onde $\hat{A}(t)$ é um operador qualquer dependente do tempo e $\hat{\mathcal{H}}$ é o hamiltoniano do sistema dado pela Eq. 2.4. No lado direito desta equação usamos a forma explícita do Hamiltoniano e as relações de comutação para operadores. Então, para $G_r(t,t')$, teremos:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_r(t,t')}{dt} &= i\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_r \\
&= i\frac{d}{dt}\{-i\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle\} \\
&= \frac{d\theta(t-t')}{dt}\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \theta(t-t')\langle[\frac{d\hat{A}(t)}{dt}, \hat{B}(t')]\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \theta(t-t')\langle[-i(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)), \hat{B}(t')]\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \{-i\theta(t-t')\langle[(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}A(t)), \hat{B}(t')]\rangle\} \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle \hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_r.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Podemos fazer o mesmo procedimento para $G_a(t,t')$, o que nos fornece:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_a(t,t')}{dt} &= i\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_a \\
&= i\frac{d}{dt}\{i\theta(t'-t)\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle\} \\
&= -\frac{d\theta(t'-t)}{dt}\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle - \theta(t'-t)\langle[\frac{d\hat{A}(t)}{dt}, \hat{B}(t')]\rangle \\
&= -\frac{d[\theta(t'-t)}{dt}\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle - \theta(t'-t)\langle[-i(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)), \hat{B}(t')]\rangle \\
&= -\{-\delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle\} + i\theta(t'-t)\langle(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)), \hat{B}(t')]\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + i\theta(t'-t)\langle[\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle \hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_a.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

E finalmente podemos fazer o mesmo procedimento para $G_c(t,t')$, o que nos

dá:

$$
\begin{aligned}
i\frac{dG_c(t,t')}{dt} &= i\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_c \\
&= i\frac{d}{dt}(-i\langle \hat{T}\{\hat{A}(t),\hat{B}(t')\}\rangle) \\
&= \frac{d}{dt}\langle\theta(t-t')\hat{A}(t)\hat{B}(t')+\eta\theta(t'-t)\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \\
&= \frac{d\theta(t-t')}{dt}\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle+\theta(t-t')\langle\frac{d\hat{A}(t)}{dt}\hat{B}(t')\rangle \\
&+ \eta\frac{d\theta(t'-t)}{dt}\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle+\eta\theta(t'-t)\langle\hat{B}(t')\frac{d\hat{A}(t)}{dt}\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle - i\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}]\hat{B}(t')\rangle \\
&- \eta\delta(t-t')\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle - i\eta\theta(t-t')\langle\hat{B}(t')[(\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}]\rangle \\
&= \delta(t-t')(\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle-\eta\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle) \\
&- i(\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}]\hat{B}(t')\rangle - i\eta\theta(t'-t)\langle\hat{B}(t')[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}]\rangle) \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]\rangle - i\langle\hat{T}[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}]\hat{B}(t')\rangle \\
&= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}-\hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_c. \qquad (2.14)
\end{aligned}
$$

Aqui usamos o fato de que

$$\frac{d\theta(t'-t)}{dt} = -\frac{d\theta(t-t')}{dt}.$$

As Eqs. 2.12, 2.13 e 2.14 podem ser escritas como uma única, dada por

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_k = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}-\hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_k \qquad (2.15)$$

onde $k=\{r,a,c\}$.

As funções de Green do lado direito da Eq. 2.15 são, geralmente falando, de ordem mais alta que as iniciais, ou seja, na equação de movimento para o par de operadores temos uma função de Green de três operadores.

As soluções da cadeia de equações contidas na Eq. 2.15 são exatas e são geralmente extremamente complicadas. Pode-se, algumas vezes, por algum método aproximativo, desacoplar esta cadeia, isto é, reduzí-la a um conjunto finito de equações, que pode ser então resolvido.

2.3 Funções de Correlação Temporal

Já vimos anteriormente que

$$\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle = \langle\hat{A}(t-t')\hat{B}(0)\rangle = \langle\hat{A}(0)\hat{B}(t'-t)\rangle \equiv F_{AB}(t-t').$$

Chamamos de função de correlação temporal a média sobre o ensemble grão-canônico do produto de operadores na representação de Heisenberg, ou seja,

$$F_{AB}(t-t') \equiv \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \tag{2.16}$$

e

$$F_{BA}(t-t') \equiv \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle. \tag{2.17}$$

Diferentemente das funções de Green (r, a, c), que não estão definidas para $t = t'$ devido ao fator $\theta(t-t')$, as funções de correlação temporal estão, também, definidas neste caso. Assim, de acordo com a definição, temos

$$F_{AB}(0) = \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t)\rangle = \langle \hat{A}(t-t)\hat{B}(0)\rangle = \langle \hat{A}(0)\hat{B}(0)\rangle. \tag{2.18}$$

Como exemplo vamos considerar o Hamiltoniano para um sistema de partículas idênticas interatuantes[32] dado por

$$\hat{H} = \sum T_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\sum_{m,n,p,q} \langle mn|V|pq\rangle a_m^\dagger a_n^\dagger a_q a_p, \tag{2.19}$$

onde

$$\langle mn|V|pq\rangle = \sum_{ij} V_{ij}\langle l_m|k_i\rangle\langle k_i|l_p\rangle\langle l_n|k_j\rangle\langle k_j|l_q\rangle. \tag{2.20}$$

A energia do sistema corresponde ao valor médio termodinâmico do Hamiltoniano $\hat{H}$, que calculado fica:

$$\begin{aligned} E \equiv \langle \hat{H}\rangle &= \sum_k T_k\langle a_k^\dagger a_k\rangle + \frac{1}{2}\sum_{m,n,p,q}\langle mn|V|pq\rangle\langle a_m^\dagger a_n^\dagger a_q a_p\rangle \\ &= \sum_k T_k\langle \hat{\eta}_k\rangle + \frac{1}{2}\sum_{m,n,p,q}\langle mn|V|pq\rangle\langle \hat{A}\hat{B}\rangle, \end{aligned}$$

onde fizemos $\hat{A} = a_m^\dagger a_n^\dagger$, $\hat{B} = a_q a_p$ e $\hat{\eta}_k = a_k^\dagger a_k$. $\hat{\eta}_k$ é o número de ocupação do modo k e a e $a^\dagger$ são os operadores destruição e criação, respectivamente.

Desta forma, concluímos que para obter a energia do sistema, é necessário conhecer as funções de correlação $\langle a_k^\dagger a_k\rangle$ e $\langle a_n^\dagger a_n^\dagger a_q a_p\rangle$, que são bem conhecidas em física estatística.

O valor $\langle a_k^\dagger a_k\rangle$ dá a verdadeira distribuição de momento das partículas e $\langle a_n^\dagger a_n^\dagger a_q a_p\rangle$ descreve a correlação entre duas partículas. O conhecimento da função distribuição de uma partícula nos permite avaliar, em geral, os valores médios de quantidades dinâmicas aditivas, a função distribuição de pares de caráter binário etc.

As funções de correlação temporal 2.16 e 2.17 satisfazem as equações

$$\begin{aligned} i\frac{dF_{BA}(t-t')}{dt} &= i\frac{d\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle}{dt} \\ &= \left\langle i\hat{B}(t')\frac{d\hat{A}(t)}{dt}\right\rangle \\ &= \left\langle i\hat{B}(t')\frac{1}{i}\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}(t)-\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{A}(t)\}\right\rangle \\ &= \langle\hat{B}(t')\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}(t)-\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{A}(t)\}\rangle \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} i\frac{dF_{AB}(t-t')}{dt} &= i\frac{d\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle}{dt} \\ &= \left\langle i\frac{d\hat{A}(t)}{dt}\hat{B}(t')\right\rangle \\ &= \left\langle i\frac{1}{i}\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}(t)-\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{A}(t)\}\hat{B}(t')\right\rangle \\ &= \langle\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}(t)-\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{A}(t)\}\hat{B}(t')\rangle, \end{aligned}$$

que foram obtidas pela diferenciação com respeito a t e pela utilização da equação de movimento de Heisenberg para os operadores. Notemos que desde que as 2.16 e 2.17 não sejam descontínuas em $t = t'$, as equações acima não têm o termo singular $\delta(t-t')$ que ocorre na Eq. 2.15 para as funções de Green.

As funções de correlação podem ser avaliadas também pela integração direta destas equações, a qual deve ser adicionada ainda as condições de contorno, ou indiretamente pela avaliação, primeiramente, das equações 2.15.

O segundo método que devemos usar é consideravelmente mais simples, desde que o faça mais fácil para satisfazer as condições de contorno usando teoremas espectrais (Sec. 2.4).

2.4 Representação Espectral Para as Funções de Correlação Temporal

Levando em consideração que as funções de Green dependem do tempo através da diferença $t - t'$, podemos introduzir expansões em auto-estados que representam um conjunto completo de soluções para as funções de Green, ou seja, podemos através de uma transformada de Fourier [36] passar da dependência temporal para o espaço das frequências e escrever o espectro.

Para resolver as equações para as funções de Green é importante ter estas representações espectrais, que suplementam o conjunto de equações, com as condições de

contorno adequadas.

Denotemos o auto estado de $\hat{\mathcal{H}}$ por $|\nu\rangle$ de modo que

$$\hat{\mathcal{H}}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \tag{2.21}$$

onde a 2.21 é a equação de autovalor, sendo E_ν o autovalor (auto energia) do operador Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$. Assim teremos, para a função de correlação temporal $F_{BA}(t-t')$:

$$\begin{aligned}
F_{BA}(t-t') &= \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{B}(t')\hat{A}(t)\} \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}Be^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}\} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_\nu \langle\nu|e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\nu\rangle \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_\nu \langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_\nu \langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}\left(\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|\right)e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu} \langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}|\mu\rangle\langle\mu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu} e^{iE_\nu t'}e^{-iE_\mu t'}\langle\nu|\hat{B}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{A}|\nu\rangle e^{iE_\mu t}e^{-iE_\nu t'}e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu} \langle\nu|\hat{B}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{A}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\mu-E_\nu)t}e^{-i(E_\mu-E_\nu)t'} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu} \langle\nu|\hat{B}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{A}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\mu-E_\nu)(t-t')}.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Aqui introduzimos o operador unitário $\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|$ que, obviamente, não altera em nada o resultado. Desta forma escrevemos a função de correlação temporal em termos das energias de excitação do sistema.

Podemos fazer o mesmo para $F_{AB}(t-t')$. Vejamos.

$$\begin{aligned}
F_{AB}(t-t') &= \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{A}(t)\hat{B}(t')\} \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu}\langle\nu|e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}|\nu\rangle \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu}\langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu}\langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}\left(\sum_{\mu}|\mu\rangle\langle\mu|\right)e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}\hat{B}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\mu\rangle\langle\mu|e^{i\hat{\mathcal{H}}t'}Be^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}e^{iE_\nu t}e^{-iE_\mu t}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{iE_\mu t'}e^{-iE_\nu t'}e^{-\beta E_\nu} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\nu-E_\mu)t}e^{-i(E_\nu-E_\mu)t'} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\nu-E_\mu)(t-t')} \qquad (2.23)
\end{aligned}$$

Na equação Eq. 2.22 podemos trocar ν por μ e vice-versa, sem perda de generalidade, o que nos leva à seguinte relação:

$$\begin{aligned}
F_{BA}(t-t') &= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{B}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{A}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\mu-E_\nu)(t-t')} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}e^{i(E_\nu-E_\mu)(t-t')} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\mu}e^{-\beta E_\nu}e^{\beta E_\nu}e^{i(E_\nu-E_\mu)(t-t')} \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}e^{i(E_\nu-E_\mu)(t-t')}e^{-\beta(E_\mu-E_\nu)}. \qquad (2.24)
\end{aligned}$$

Assim, encontramos uma relação entre as funções de correlação temporal, de modo que

$$F_{BA}(t-t') = F_{AB}(t-t')e^{-\beta(E_\mu-E_\nu)}. \qquad (2.25)$$

Vamos introduzir a transformada de Fourier $J_{BA}(\omega)$ tal que

$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}d\omega, \qquad (2.26)$$

com sua transformada inversa dada por

$$J_{BA}(\omega) = J(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(t-t')e^{i\omega(t-t')}dt. \tag{2.27}$$

Fazendo $\tau = t - t'$, de modo que $dt = d\tau$ e usando a Eq. 2.24 teremos:

$$\begin{aligned}
J_{BA}(\omega) &= J(\omega) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(\tau)e^{i\omega(\tau)}d\tau \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}e^{i(E_\nu-E_\mu)(\tau)}\right]e^{i\omega(\tau)}d\tau \\
&= \frac{1}{\Theta}\frac{1}{2\pi}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau}e^{i(E_\nu-E_\mu)\tau}d\tau \\
&= \frac{1}{\Theta}\frac{1}{2\pi}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_\mu-E_\nu+\omega]\tau}d\tau.
\end{aligned}$$

A integral que aparece na equação acima pode ser calculada da seguinte maneira:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_\mu-E_\nu-\omega]\tau}d\tau = \int_0^{2\pi}\cos(E_\mu-E_\nu-\omega)\tau]d\tau - i\int_0^{2\pi}\text{sen}[(E_\mu-E_\nu-\omega)\tau]d\tau$$

Para $\omega \neq E_\mu - E_\nu$, teremos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_\mu-E_\nu-\omega]\tau}d\tau = \frac{1}{E_\mu-E_\nu-\omega}([\text{sen}\phi]_0^{2\pi} + i[\cos\phi]_0^{2\pi}) = 0.$$

Para $\omega = E_\mu - E_\nu$, teremos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_\mu-E_\nu-\omega]\tau}d\tau = \int_0^{2\pi}\cos 0 d\phi - i\int_0^{2\pi}\text{sen}0 d\phi = [\phi]_0^{2\pi} = 2\pi$$

desta forma podemos concluir que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_\mu-E_\nu-\omega]\tau}d\tau = 2\pi\delta(E_\mu-E_\nu-\omega). \tag{2.28}$$

Assim a expressão para $J(\omega)$ torna-se:

$$\begin{aligned}
J(\omega) &= \frac{1}{\Theta}\frac{1}{2\pi}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}2\pi\delta(E_\mu-E_\nu-\omega) \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}\delta(E_\mu-E_\nu-\omega).
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Analogamente, teremos para a transformada de Fourier de $F_{AB}(t-t')$,

$$F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \tag{2.30}$$

com sua transformada inversa dada por (usando a Eq. 2.23):

$$\begin{aligned}
J_{AB}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F_{AB}(t-t') e^{i\omega(t-t')} dt \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F_{AB}(\tau) e^{i\omega(\tau)} d\tau \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t-t')}\right] e^{i\omega\tau} d\tau \\
&= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\nu}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_\nu - E_\mu + \omega)} d\tau \\
&= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\mu} e^{-\beta E_\nu} e^{\beta E_\mu} 2\pi\delta(E_\nu - E_\mu + \omega) \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\nu,\mu}\langle\nu|\hat{A}|\mu\rangle\langle\mu|\hat{B}|\nu\rangle e^{-\beta E_\mu}\delta(E_\nu - E_\mu + \omega) e^{\beta(E_\mu - E_\nu)} \\
&= J_{BA}(\omega) e^{\beta(E_\mu - E_\nu)} = J(\omega) e^{\beta\omega}.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Desta forma podemos escrever as seguintes relações:

$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \tag{2.32}$$

e

$$F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega\tau} d\omega. \tag{2.33}$$

.

As equações Eqs. 2.32 e 2.33 são as requeridas representações espectrais para as funções de correlação temporal, onde $J(\omega)$ é a densidade espectral da função $F_{BA}(t,t')$. Como exemplo, podemos fazer $\hat{A} \equiv a$ e $\hat{B} \equiv a^\dagger$. Desta forma teremos:

$$F_{a^\dagger a}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{a^\dagger a}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega$$

e

$$\begin{aligned}
J_{a^\dagger a}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F_{a^\dagger a}(\omega) e^{i\omega\tau} d\tau \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}\langle\mu|a^\dagger|\nu\rangle\langle\nu|a|\mu\rangle e^{-\beta E_\mu}\delta(E_\mu - E_\nu - \omega) \\
&= \frac{1}{\Theta}\sum_{\mu,\nu}|\langle\nu|a|\mu\rangle|^2 e^{-\beta E_\mu}\delta(E_\mu - E_\nu - \omega)
\end{aligned}$$

Assim $J_{a^\dagger a}(\omega)$ é definida positiva. Outra propriedade das funções de correlação é a seguinte:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A}(t)\hat{B}(0)\rangle &= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\mathcal{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{B}] \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{B}e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}e^{\beta\hat{\mathcal{H}}}\right] \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{B}e^{i(t+i\beta)\hat{\mathcal{H}}}\hat{A}e^{-i(t+i\beta)\hat{\mathcal{H}}}\right] \\
&= \frac{1}{\Theta}\,\mathrm{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}}\hat{B}\hat{A}(t+i\beta)] \\
&= \langle \hat{B}(0)\hat{A}(t+i\beta)\rangle. \qquad (2.34)
\end{aligned}$$

Desta forma, a Eq. 2.33 pode ser obtida a partir da Eq. 2.32 através da substituição $t-t' \to t-t'+i\beta$, ou seja,

$$\begin{aligned}
F_{AB}(t-t') &= F_{BA}(t-t'+i\beta) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega(t-t'+i\beta)}d\omega \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega(t-t')}e^{\beta\omega}d\omega \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega.
\end{aligned}$$

2.5 Representações Espectrais para G_r e G_a

Consideremos agora as representações espectrais para as funções de Green retardada e avançada. Podemos obtê-las facilmente por meio das representações espectrais para as funções de correlação temporal.

Primeiro faremos para $G_r(t-t')$. Podemos introduzir a componente de Fourier da mesma através da relação

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E)e^{-iE(t-t')}dE \qquad (2.35)$$

Ou

$$G_r(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E)e^{-iE\tau}dE,$$

onde $\tau = t-t'$ e $G_r(E)$ é a componente de Fourier da função de Green retardada $G_r(t-t')$ que é dada por

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{iE\tau}d\tau, \qquad (2.36)$$

cuja equação geral de movimento se obtêm pela substituição da (2.35) na (2.15), ou seja,

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

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle \hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_E e^{-iE(t-t')}dE &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')}dE\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]\rangle \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}];\hat{B}(t')\rangle\rangle_E e^{-iE(t-t')}dE \Rightarrow \end{aligned}$$

$$E\langle\langle \hat{A}(t);\hat{B}(t')\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}];\hat{B}(t')\rangle\rangle_E. \tag{2.37}$$

Utilizando a definição de $G_r(t-t')$, teremos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{iE\tau}d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\{-i\theta(\tau)\langle[\hat{A}(t-t'),\hat{B}(0)]\rangle\}e^{iE\tau}d\tau \\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(\tau)\{\langle\hat{A}(t-t')\hat{B}(0) - \eta\hat{B}(0)\hat{A}(t-t')\rangle\}e^{iE\tau}d\tau \\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(\tau)\{\langle\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)\rangle - \eta\langle\hat{B}(0)\hat{A}(\tau)\rangle\}e^{iE\tau}d\tau, \end{aligned}$$

que contém as funções de correlação temporal. Como

$$\langle\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega$$

e

$$\langle\hat{B}(0)\hat{A}(\tau)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega,$$

teremos:

$$\begin{aligned} G_r(E) &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(\tau)\left[\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega - \eta\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega\right]e^{iE\tau}d\tau \\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(\tau)\left[\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega\tau}(e^{\beta\omega}-\eta)d\omega\right]e^{iE\tau}d\tau \\ &= -i\int_{-\infty}^{\infty}d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{iE\tau}e^{-i\omega\tau}\theta(\tau)d\tau \\ &= -i\int_{-\infty}^{\infty}d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(E-\omega)\tau}.\theta(\tau)d\tau \end{aligned}$$

Para tornar mais simples esta expressão, faremos uso da representação integral de $\theta(\tau)$. Como já vimos antes, podemos escrever esta função descontínua em termos da

função delta de Dirac, $\delta(\tau)$, ou seja,

$$\theta(\tau) = \int_{-\infty}^{\tau} \delta(\tau')d\tau' = \int_{-\infty}^{\tau} e^{\epsilon\tau'}\delta(\tau')d\tau',$$

onde $\epsilon \to 0$ ($\epsilon > 0$).

Porém uma das representações para a função delta de Dirac é dada por [38]

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iX\tau}dX.$$

Desta forma, $\theta(\tau)$ torna-se:

$$\begin{aligned}
\theta(\tau) &= \int_{-\infty}^{\tau} e^{\epsilon\tau'}\delta(\tau')d\tau' \\
&= \int_{-\infty}^{\tau} e^{\epsilon\tau'}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iX\tau'}dX\right]d\tau' \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dX\int_{-\infty}^{\tau} e^{\epsilon\tau'}e^{-iX\tau'}d\tau' \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dX\int_{-\infty}^{\tau} e^{(\epsilon-iX)\tau'}d\tau' \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dX\left[\frac{1}{\epsilon-iX}e^{(\epsilon-iX)\tau'}\right]_{-\infty}^{\tau} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{\epsilon-iX}dX \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X+i\epsilon}dX. \qquad (2.38)
\end{aligned}$$

Verifica-se que a função definida desta maneira tem, de fato, as propriedades da função descontínua $\theta(\tau)$. Devemos considerar X como uma variável complexa. Como o integrando contém polo ($X = -i\epsilon$), a (2.38) será resolvida através do método dos resíduos [37].

Quando $\tau < 0$, o contorno deve ser fechado por cima, não encerrando a singularidade (vide Fig. 2). De acordo com o teorema de Cauchy [37] a integral é nula, ou seja,

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X+\epsilon}d\tau = 0.$$

Quando $\tau > 0$, o contorno deve ser fechado por baixo, encerrando a singularidade (vide Fig. 3. Assim, pelo teorema do resíduo, teremos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X+i\epsilon}dX = -2\pi i Res f(-i\epsilon),$$

onde o sinal de menos é devido o fato da integração está sendo feita no sentido horário e

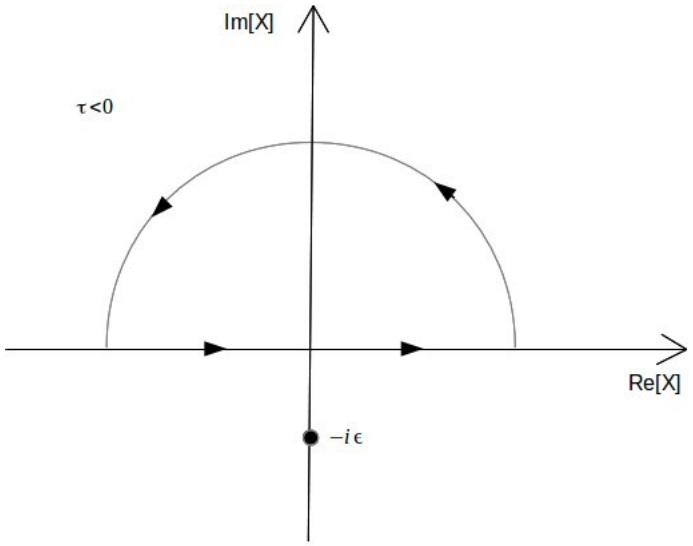

Figura 2: Contorno de integração da Eq.2.36 para valores negativos da variável tempo.

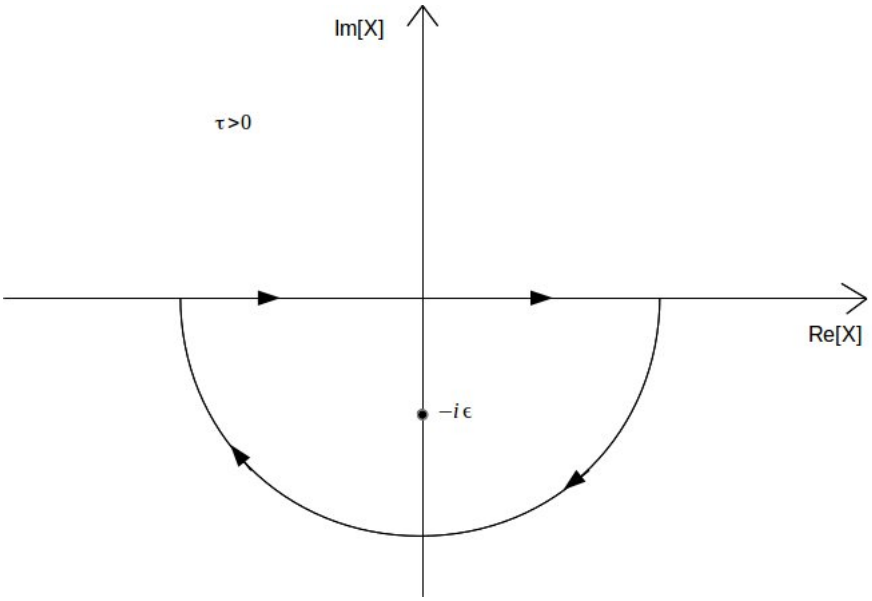

Figura 3: Contorno de integração da Eq.2.36 para valores positivos da variável tempo.

$Resf(a)$ é o resíduo da função no ponto de singularidade, ou seja, $X = a$, e é dado por:

$$Resf(a) = \lim_{X \to a} (X - a) f(X).$$

Assim teremos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X + i\epsilon} dX &= -2\pi i \lim_{\epsilon \to 0^+} \lim_{X \to -\epsilon i} (X + \epsilon i) \frac{e^{-iX\tau}}{X + \epsilon i} \\ &= -2\pi i \lim_{\epsilon \to 0^+} e^{-i(-\epsilon i)\tau} \\ &= -2\pi i \lim_{\epsilon \to 0^+} e^{-\epsilon\tau} = -2\pi i \end{aligned}$$

e $\theta(\tau)$, será igual a unidade, ou seja,

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-iX\tau}}{X+\epsilon i}dX = \frac{i}{2\pi}(-2\pi i) = 1.$$

Teremos, então, a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau}\theta(\tau)d\tau &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau}d\tau\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-iX\tau}}{X+i\epsilon}dX \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dX}{X+i\epsilon}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau}e^{-iX\tau}d\tau \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dX}{X+i\epsilon}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega-X)\tau}d\tau \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dX}{X+i\epsilon}2\pi\delta(E-\omega-X) \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty}\delta(E-\omega-X)\frac{dX}{X+i\epsilon} \\
&= \frac{i}{E-\omega+i\epsilon}.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Desta forma, $G_r(E)$ transforma-se em:

$$\begin{aligned}
G_r(E) &= -i\int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau}\theta(\tau)d\tau \\
&= -i\int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{1}{2\pi}\frac{i}{E-\omega+i\epsilon} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega+i\epsilon}.
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Este resultado mostra a relação entre $G_r(E)$ e a função de correlação temporal através de $J(\omega)$.

Analogamente podemos introduzir a componente de Fourier $G_a(E)$ para a função de Green avançada, ou seja,

$$G_a(t,t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_a(E)e^{-iE(t-t')}dE \;\; = \;\; \int_{-\infty}^{\infty} G_a(E)e^{-iE(\tau)}dE.$$

Utilizando a definição de função de Green avançada a componente de Fourier

$G_a(E)$ torna-se:

$$\begin{aligned}
G_a(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_a(\tau)e^{iE\tau}d\tau \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} i\theta(-\tau)\langle[\hat{A}(t-t'),\hat{B}(0)]\rangle e^{iE\tau}d\tau \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau)\langle\hat{A}(t-t')\hat{B}(0)-\eta\hat{B}(0)\hat{A}(t-t'))\rangle e^{iE\tau}d\tau \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau}\left[\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega-\eta\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega\right]\theta(-\tau) \\
&= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)d\omega\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i(\omega-E)\tau}\theta(-\tau).
\end{aligned}$$

Porém,

$$\theta(-\tau)=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{iX\tau}}{X+i\epsilon}dX.$$

Desta forma, $G_a(E)$ torna-se:

$$\begin{aligned}
G_a(E) &= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)d\omega\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i(\omega-E)\tau}\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{iX\tau}}{X+i\epsilon}dX \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)d\omega\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dX}{X+i\epsilon}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega+X)}d\tau \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)d\omega\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dX}{X+i\epsilon}2\pi\delta(E-\omega+X) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega-i\epsilon}. \qquad (2.41)
\end{aligned}$$

As equações para $G_r(E)$ e $G_a(E)$ podem ser escritas como uma única equação, ou seja,

$$G_{r,a}(E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega\pm i\epsilon}, \qquad (2.42)$$

onde o índice r corresponde ao sinal $+$ e o índice a corresponde ao sinal $-$.

Até agora temos considerado E como uma quantidade real. A função $G_{r,a}(E)$ pode ser analiticamente contínua no plano complexo E. Assim, assumindo que E seja complexo, teremos:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega}=G_r(E)$$

se $Im[E]>0$ e

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega}=G_r(E) \qquad (2.43)$$

se $Im[E]<0$

Podemos ver que $G_r(E)$ pode ser analiticamente estendida ao plano complexo

$Im(E) > 0$ da seguinte maneira:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{iE\tau}d\tau,$$

onde $G_r(\tau) = 0$ para $\tau < 0$.

Fazendo $E = \alpha + \beta i$, com $\beta > 0$, teremos:

$$G_r(\alpha + i\beta) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{i(\alpha+i\beta)\tau}d\tau = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{i\alpha\tau}e^{-\beta\tau}d\tau.$$

Então $e^{-\beta\tau}$ desempenha o papel de um fator de corte que faz $G_r(E)$ e suas derivadas com respeito a E convergirem sob hipóteses suficientemente gerais sobre a função $G_r(\tau)$.

Podemos, similarmente, ver que que a função $G_a(E)$ pode ser analiticamente contínua dentro do plano complexo $Im[E] < 0$. Vejamos.

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_a(\tau)e^{iE\tau}d\tau.$$

com $G_a(\tau) = 0$ para $\tau > 0$. Fazendo $E = \alpha + i\beta$, com $\beta < 0$, teremos:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} G_a(\tau)e^{i(\alpha+i\beta)\tau}d\tau = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} G_a(\tau)e^{i\alpha\tau}e^{-\beta\tau}d\tau.$$

Novamente o termo $e^{-\beta\tau}$ faz o papel de um fator de corte.

Se conhecermos a função $G(E)$, podemos encontrar também a intensidade espectral $J(\omega)$, ou seja,

$$G(E^+) - G(E^-) \equiv G(E + i\epsilon) - G(E - i\epsilon),$$

onde $E^+_- = E \pm i\epsilon$. Desta forma teremos:

$$\begin{aligned} G(E^+) - G(E^-) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega} - \eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E^+ - \omega} \\ &- \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega} - \eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E^- - \omega} \end{aligned} \tag{2.44}$$

Para resolver a Eq. 2.42 usaremos a identidade de Dirac [24] dada por:

$$\frac{1}{X \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{X}\right) \mp i\pi\delta(X), \tag{2.45}$$

onde $\epsilon \to 0^+$ $(\epsilon > 0, \epsilon \to 0)$, X é uma variável real e P denota o valor principal na integração sobre X (parte principal da integral)[37].

A parte principal da integral de uma função $f(x)$, num intervalo $a \leq x \leq b$,

contínua neste intervalo, exceto no ponto x_0 ($a \leq x_0 \leq b$), é dada por:

$$P\int_a^b f(x)dx = \lim_{\delta\to 0}\left[\int_a^{x_0-\delta} f(x)dx + \int_{x_0-\delta}^{b} f(x)dx\right]. \tag{2.46}$$

O significado desta identidade pode ser percebido considerando a seguinte integral, no limite quando $\epsilon \to 0$:

$$\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX,$$

de modo que $f(X)$ não tem singularidades no eixo real. O resultado desta integral será:

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX &= P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + i\pi\int_{-\infty}^{\infty}\delta(X)f(X)dX \\ &= P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + i\pi f(0).\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX &= \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\int_{-\infty}^{-r}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX + \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\int_{-r}^{r}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX \\ &+ \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\int_{r}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX.\end{aligned}$$

Assumimos, sem perda de generalidade, que $\epsilon \ll r$. Então

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX &= \lim_{r\to 0}\left[\int_{-\infty}^{-r}\frac{f(X)}{X}dX + \int_{r}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX\right] \\ &+ \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\int_{r}^{\infty}\frac{[f(0)+Xf'(0)+\cdots]}{X-i\epsilon}dX.\end{aligned}$$

As duas primeiras integrais do lado direito correspondem à parte principal da integral e para o último termo fez-se uma expansão em série de Taylor [38] em torno da origem. Uma vez que ϵ é extremamente pequeno, consideraremos apenas o primeiro termo da expansão. Logo,

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX = P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + f(0)\lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\int_{-r}^{r}\frac{dX}{X-i\epsilon}. \tag{2.47}$$

Calculemos a última integral à direita.

$$\begin{aligned}\int_{-r}^{r}\frac{dX}{X-i\epsilon} &= \ln(X-i\epsilon)|_{-r}^{r} = \ln\left(\frac{r-i\epsilon}{-r-i\epsilon}\right) = \ln\left(\frac{ir+\epsilon}{-ir+\epsilon}\right) \\ &= \ln\left(\frac{1+ir/\epsilon}{1-ir/\epsilon}\right).\end{aligned} \tag{2.48}$$

Agora, podemos utilizar a seguinte relação [39]

$$\tanh^{-1} x = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right), \tag{2.49}$$

de modo que

$$\ln\left(\frac{1+ir/\epsilon}{1-ir/\epsilon}\right) = 2\tanh^{-1}(ir/\epsilon).$$

Porém, se usarmos $\tanh^{-1}(ix) = i\tan^{-1} x$, teremos

$$\ln\left(\frac{1+ir/\epsilon}{1-ir/\epsilon}\right) = 2i\tan^{-1}(r/\epsilon).$$

Assim a Eq. 2.48 torna-se:

$$\int_{-r}^{r}\frac{dX}{X-i\epsilon} = \ln\left(\frac{1+ir/\epsilon}{1-ir/\epsilon}\right) = 2i\tan^{-1}(r/\epsilon). \tag{2.50}$$

Logo a Eq.2.47 fica

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X-i\epsilon}dX &= P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + 2if(0)\lim_{\epsilon\to 0}\lim_{r\to 0}\tan^{-1}(r/\epsilon) \\
&= P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + 2if(0)\frac{\pi}{2} \\
&= P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(X)}{X}dX + i\pi f(0).
\end{aligned} \tag{2.51}$$

O que mostra a equação 2.45.

Agora, utilizando tal identidade, com $f(X) = (e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)$ e $X = E-\omega$, a Eq. 2.42 torna-se:

$$\begin{aligned}
G(E^+) - G(E^-) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega+i\epsilon} - \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega-i\epsilon} \\
&= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} - i\pi\int_{-\infty}^{\infty}d\omega(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\delta(E-\omega)\right] \\
&- \frac{1}{2\pi}\left[P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} + i\pi\int_{-\infty}^{\infty}d\omega(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\delta(E-\omega)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} - \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} \\
&- \frac{1}{2\pi}i\pi(e^{\beta E}-\eta)J(E) - \frac{1}{2\pi}i\pi(e^{\beta E}-\eta)J(E) \\
&= -i(e^{\beta E}-\eta)J(E)
\end{aligned} \tag{2.52}$$

e podemos, então, escrever a seguinte relação para $J(\omega)$:

$$J(\omega) = i\frac{G(E^+)-G(E^-)}{e^{\beta\omega}-\eta} = i\frac{G(\omega+i\epsilon)-G(\omega-i\epsilon)}{e^{\beta\omega}-\eta}. \tag{2.53}$$

Com este resultado, podemos escrever a função de correlação temporal $F_{BA}(t-t')$ da seguinte forma:

$$F_{BA}(t-t') = i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(E^+) - G(E^-)}{e^{\beta\omega} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \tag{2.54}$$

Desta maneira concluímos que o conhecimento da função de Green permite obter a função de correlação temporal, e a componente de Fourier de $G_r(t-t')$ pode ser dada por

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E^+ - \omega} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon} \\ &= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} - i\pi(e^{\beta E} - \eta) J(E)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi} P\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} - \frac{i}{2}(e^{\beta E} - \eta) J(E), \end{aligned} \tag{2.55}$$

de modo que

$$Im[G_r(\omega)] = -\frac{1}{2}(e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega)$$

e

$$\begin{aligned} Re[G_r(E)] &= \frac{1}{2\pi} P\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(E) \frac{d\omega}{E - \omega} \\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{1}{2}(e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega)\right] \frac{d\omega}{\omega - E} \\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Im[G_r(\omega)]}{\omega - E} d\omega, \end{aligned} \tag{2.56}$$

que é a relação entre as partes real e imaginária da função de Green retardada.

Analogamente, para $G_a(E)$, teremos:

$$\begin{aligned} G_a(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E^- - \omega} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\epsilon} \\ &= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} + i\pi(e^{\beta E} - \eta) J(E)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi} P\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} + \frac{i}{2}(e^{\beta E} - \eta) J(E), \end{aligned}$$

de modo que

$$Im[G_a(\omega)] = \frac{1}{2}(e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega)$$

e

$$\begin{aligned} Re[G_a(E)] &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} \\ &= -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{2}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\right]\frac{d\omega}{\omega-E} \\ &= -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Im[G_a(\omega)]}{\omega-E}d\omega. \end{aligned} \tag{2.57}$$

Temos aqui uma conexão entre as partes real e imaginária da função de Green avançada.

2.6 Representação Espectral para G_C

Trataremos, agora, da representação espectral para a função de Green causal. Consideremos a componente $G_C(E)$ de $G_C(t-t')$ de modo que

$$G_C(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_C(E)e^{-iE\tau}dE$$

e

$$G_C(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_C(\tau)e^{iE\tau}d\tau,$$

onde E é real.

Temos as seguintes relações:

$$G_C(t,t') = -i[\theta(t-t')\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle + \eta\theta(t'-t)\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle],$$

que é a definição da função de Green causal;

$$F_{AB}(t-t') \equiv \langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega;$$

$$F_{BA}(t-t') \equiv \langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega.$$

As duas últimas relações são as funções de correlação temporal, já vistas anteriormente. Assim, usando-as, calcularemos a componente de Fourier $G_C(E)$. Vejamos.

$$\begin{aligned} G_C(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\{-i[\theta(t-t')\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle + \eta\theta(t'-t)\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)]\rangle\}e^{iE\tau}d\tau \\ &= -\frac{i}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)e^{\beta\omega}e^{-i\omega\tau}d\omega e^{iE\tau}\theta(\tau)d\tau + \eta\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega e^{iE\tau}\theta(-\tau)d\tau\right) \\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)e^{\beta\omega}d\omega\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(E-\omega)\tau}\theta(\tau)d\tau + \eta\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)d\omega\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(E-\omega)\tau}\theta(-\tau)d\tau. \end{aligned}$$

Fazendo uso da Eq. 2.39, teremos:

$$\begin{aligned} G_C(E) &= -\frac{i}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}d\omega\frac{i}{E-\omega+i\epsilon}+\eta\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)d\omega\frac{i}{\omega-E-i\epsilon}\right] \\ &= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}\frac{d\omega}{E-\omega+i\epsilon}-\eta\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega-i\epsilon}\right]. \end{aligned}$$

Utilizando novamente a Eq. 2.45, teremos:

$$\begin{aligned} G_C(E) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}d\omega\left[P\left(\frac{1}{E-\omega}\right)-i\pi\delta(E-\omega)\right] \\ &- \frac{1}{2\pi}\eta\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)d\omega\left[P\left(\frac{1}{E-\omega}\right)+i\pi\delta(E-\omega)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}\frac{d\omega}{E-\omega}-\frac{1}{2\pi}i\pi\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)e^{\beta\omega}\delta(E-\omega)d\omega \\ &- \frac{1}{2\pi}\eta P\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega}-\frac{1}{2\pi}i\pi\eta\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\delta(E-\omega)d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\beta\omega}\frac{d\omega}{E-\omega}-\frac{\eta}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} \\ &- \frac{1}{2\pi}i\pi J(E)e^{\beta E}-\frac{\eta}{2\pi}i\pi J(E) \\ &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega}-\eta)\frac{d\omega}{E-\omega}-\frac{i}{2}J(E)e^{\beta E}-\frac{i\eta}{2}J(E) \\ &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega}-\frac{iJ(E)}{2}(e^{\beta\ E}+\eta), \end{aligned}$$

de modo que a parte imaginária de $G_C(E)$ será

$$Im[G_C(E)] = -\frac{1}{2}J(E)(e^{\beta E}+\eta)$$

e sua parte real será dada por

$$\begin{aligned} Re[G_C(E)] &= \frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega} \\ &= \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}[-\frac{1}{2}J(\omega)(e^{\beta\omega}+\eta)]\frac{(e^{\beta\omega}-\eta)}{(e^{\beta\omega}+\eta)}\frac{d\omega}{\omega-E} \\ &= \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(e^{\beta\omega}-\eta)}{(e^{\beta\omega}+\eta)}\frac{Im[G_C(\omega)]}{\omega-E}d\omega, \end{aligned} \tag{2.58}$$

que é a relação entre as partes real e imaginária da componente de Fourier $G_C(E)$.

Pelas definições das funções de Green retardada, avançada e causal, podemos ver que elas dependem não apenas do tempo, mas também da temperatura. Quando a temperatura é diferente de zero os valores esperados do estado fundamental são substituídos pelas médias térmicas sobre um ensemble termodinâmico apropriado. As funções de Green que nos permitem calcular tais médias têm propriedades mais complicadas do

que as funções de green para temperatura zero, porém existe analogia entre elas.

Vamos considerar a função de Green térmica, na qual a variável tempo é substituída pela variável temperatura. Esta tem uma teoria de pertubação análoga à função de Green vista anteriormente, e ela nos permite determinar as propriedades termodinâmicas de equilíbrio do sistema. Para discutir excitações e a resposta do sistema a uma perturbação externa precisamos de uma função de Green dependente do tempo a uma temperatura T. A relação entre os dois tipos de função de Green é discutida na referência [25].

Consideremos, por exemplo, a função de Green térmica

$$G^T(\sigma) = \langle T[A(\sigma)B(0)]\rangle = \theta(\sigma)\langle A(\sigma)B(0)\rangle + \theta(-\sigma)\langle B(0)A(\sigma)\rangle, \tag{2.59}$$

onde σ é uma variável de temperatura. Pode-se mostrar que ([25]) a função de Green retardada $G^R(\omega)$ pode ser obtida formalmente a partir de $-\beta G^T(\overline{\mu})$ pela substituição da variável imaginária $-i\overline{\mu}$ pela variável complexa $\omega + i\epsilon$, onde $0 \leq \sigma \leq \beta$.

3 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE CÚBICA SIMPLES SEMI-INFINITA

3.1 Introdução

Neste capítulo utilizaremos o modelo de Ising com campo transverso para descrever um ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita. Através do formalismo da função de Green, estudaremos os estados localizados associados a uma impureza acrescentada intersticialmente no sistema. Esta impureza se localizará em uma das faces da rede cúbica, paralela à superfície. Tal face pode está na n-ésima camada ($n = 1, 2, 3 \cdots$) a partir da superfície.

No estudo de excitações magnéticas, o modelo de Ising com campo transverso 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 $TbVO_4$ [67]. Aliado à técnica das F.G., o modelo de Ising com campo transverso tem sido amplamente aplicado para estudar a propagação de ondas de spin em sistemas magnéticos.

3.2 Modelo e Formalismo da Função de Green

O sistema sob estudo é um ferromagneto semi-infinito com uma superfície (001) e uma estrutura cúbica simples (constante de rede a). Qualquer sítio da rede tem um vetor posição $\mathbf{r} = (x, y, z) = a(l, m, n)$ com inteiros l, m, n, que assumem os valores $-\infty < l < \infty$, $-\infty < m < \infty$, $1 < n < \infty$. Assim, $n = 1$ denota a camada da superfície (vide Fig. 59). Uma impureza magnética intersticial isolada é introduzida no meio, à distância $(N-1)a$ da superfície (onde $N \geq 1$) (vide Fig. 60). O Hamiltoniano de Ising na presença de um campo aplicado, usado para descrever o sistema puro, é

$$H_0 = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i h_i S_i^x, \tag{3.1}$$

onde S_i^x e S_i^z são as componentes x e z do operador de spin no sítio i, tendo número quântico $S = \frac{1}{2}$ em qualquer lugar. A dupla somatória é feita sobre os pares de sítios de primeiros vizinhos. A interação de troca entre estes primeiros vizinhos J_{ij}, para o material puro, assume o valor J_S se ambos os spins estão na camada de superfície e J, se ambos estão dentro do volume. A troca entre a impureza e seus vizinhos é denotada por J' se os vizinhos estão dentro do volume e J'_S, se eles estão na camada da superfície. O campo

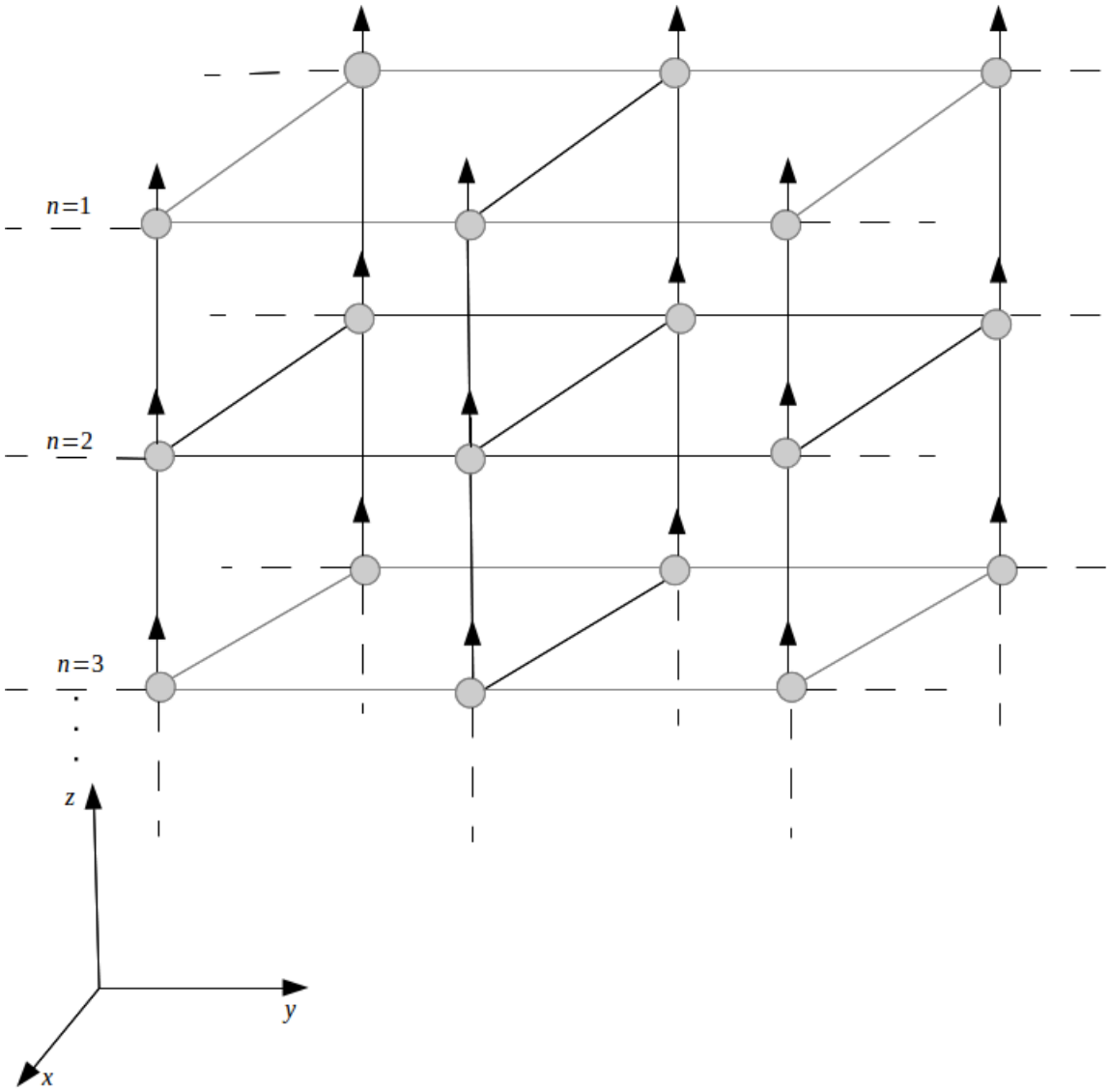

Figura 4: Ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita.

magnético transverso h_i assume o valor h' na impureza, h_S, se o sítio está na camada de superfície e h se este sítio está na região de volume.

Para obter a relação de dispersão para o sistema de Ising com uma impureza, primeiro avaliamos as funções de Green retardadas da forma $\langle\langle S_l^\alpha; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega$, onde α e β são componentes cartesianas, e ω é um índice de frequência. Estas funções de Green devem satisfazer a equação geral de movimento (ver Eq. 2.37)

$$\omega\langle\langle S_l^\alpha; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[S_l^\alpha, S_m^\beta]\rangle + \langle\langle[S_l^\alpha, H_0]; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega \tag{3.2}$$

onde o comutador no último termo pode ser avaliado usando aproximação de desacoplamento RPA (Random Phase Approximation) em sua forma generalizada [11]-[52]. Essa aproximação consiste basicamente em desprezar as correlações entre as componentes transversais e longitudinais do operador de spin em pontos distintos da rede. Para o nosso caso

teremos:

$$\langle\langle S_i^\gamma S_l^\alpha; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega = \langle S_i^\gamma\rangle\langle\langle S_l^\alpha; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega + \langle S_l^\alpha\rangle\langle\langle S_i^\gamma; S_m^\beta\rangle\rangle_\omega. \tag{3.3}$$

É conveniente reescrever o Hamiltoniano como

$$H = H_0 + H', \tag{3.4}$$

onde H_0 é o hamiltoniano do modelo de Ising transverso para o sistema puro e H', é a perturbação devida a impureza intersticial.

Para o sistema puro, uma transição de fase de segunda ordem é prevista, a uma temperatura T_C que é dada por [11]

$$T_C = \tanh\left(\frac{h}{2k_B T_C}\right) = \frac{h}{3J}. \tag{3.5}$$

Para o sistema com uma impureza pode ser (dependendo de h' e J') que a temperatura crítica T_C^i total em alguns casos seja maior que T_C. Para $T < T_C^i$ a orientação média de spin em cada sítio pode ter componentes nas direções x e z, enquanto que para $T > T_C^i$, ela se concentra ao longo da direção x. Neste trabalho nos concentramos no caso de $T > T_C^i$, por simplicidade.

Calculemos agora as funções de Green para o sistema puro (isto é, avaliada usando H_0) na fase de alta temperatura. Como o Hamiltoniano de Ising envolve as componentes de spin na direção z, a (3.2) nos fornece

$$\omega\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[S_l^z, S_m^z]\rangle + \langle\langle[S_l^z, H_0]; S_m^z\rangle\rangle_\omega. \tag{3.6}$$

Quaisquer que sejam l e m, o primeiro termo se anula na (3.6), pois

$$[S_l^z, S_m^z] = 0. \tag{3.7}$$

Usando a (3.1), o comutador do segundo termo da (3.6) fica

$$\begin{aligned}
[S_l^z, H_0] &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^z S_i^z S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^z) - \sum_i h_i(S_l^z S_i^x - S_i^x S_l^z) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^z S_i^z S_j^z - S_i^z S_l^z S_j^z + S_i^z S_l^z S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^z) - \sum_i h_i(S_l^z S_i^x - S_i^x S_l^z) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}([S_l^z, S_i^z]S_j^z + S_i^z[S_l^z, S_j^z]) - \sum_i h_i[S_l^z, S_i^x] \\
&= -\sum_i i h_i S_l^y \delta_{li},
\end{aligned}$$

ou

$$[S_l^z, H_0] = -i h_l S_l^y, \tag{3.8}$$

onde usamos o resultado $[S_l^z, S_i^x] = i\hbar S_l^y \delta_{il}$, com $\hbar = 1$. Assim a (3.6) torna-se, para $i = l$,

$$\omega\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \langle\langle [S_l^z, H_0]; S_m^z\rangle\rangle_\omega = -ih_l\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega. \tag{3.9}$$

Assim, a evolução da F.G $\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle$ forneceu outra F.G., $\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle$, cuja evolução temporal é dada por

$$\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle [S_l^y, S_m^z]\rangle + \langle\langle [S_l^y, H_0]; S_m^z\rangle\rangle_\omega, \tag{3.10}$$

onde o comutador do segundo termo no segundo membro é dado por, usando a (3.1),

$$\begin{aligned}
[S_l^y, H_0] &= S_l^y H_0 - H_0 S_l^y \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^y S_i^z S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^y) - \sum_i h_i(S_l^y S_i^x - S_i^x S_l^y) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^y S_i^z S_j^z - S_i^z S_l^y S_j^z + S_i^z S_l^y S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^y) - \sum_i h_i(S_l^z S_i^x - S_i^x S_l^z) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}([S_l^y, S_i^z]S_j^z + S_i^z[S_l^y, S_j^z]) - \sum_i h_i[S_l^y, S_i^x] \\
&= -\frac{i}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^x S_j^z \delta_{li} + S_i^z S_l^x \delta_{lj}) + i\sum_i h_i S_l^z \delta_{li} \\
&= -\frac{i}{2}\sum_j J_{lj} S_l^x S_j^z - \frac{i}{2}\sum_i J_{li} S_i^z S_l^x + ih_l S_l^z.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Levando este resultado à (3.10), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega &= \frac{i}{2\pi}\langle S_l^x\rangle\delta_{lm} + ih_l\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega \\
&- \frac{i}{2}\sum_j J_{lj}\langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega - \frac{i}{2}\sum_i J_{li}\langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z\rangle\rangle_\omega.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Para resolver esta equação deve-se escrever a equação de movimento para a função de ordem mais alta $\langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega$ e $\langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z\rangle\rangle_\omega$). Esta por sua vez conterá uma função de Green de ordem mais alta e se obtem uma cadeia de equações de movimento. Para encontrar a função de interesse é necessário introduzir aproximações que desacoplam as equações. Aqui utilizaremos a aproximação RPA (Eq. 3.3) para desacoplá-la. Assim teremos, fazendo a troca $j \to i$ (índices mudos),

$$\begin{aligned}
\langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega &\simeq \langle S_l^x\rangle\langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega + \langle S_j^z\rangle\langle\langle S_l^x; S_m^z\rangle\rangle_\omega \\
&= \langle S_l^x\rangle\langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega
\end{aligned} \tag{3.13}$$

e

$$\begin{aligned}\langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z\rangle\rangle_\omega &\simeq \langle S_i^z\rangle\langle\langle S_l^x; S_m^z\rangle\rangle_\omega + \langle S_l^x\rangle\langle\langle S_i^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega \\ &= \langle S_l^x\rangle\langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \tag{3.14}$$

pois o valor médio da componente em z do número quântico de spin se anula para este caso onde a temperatura é superior à temperatura crítica. Levando as (3.14)e (3.13) à (3.12), obtemos a expressão

$$\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \frac{i}{2\pi}\langle S_l^x\rangle\delta_{lm} + ih_l\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega - i\sum_j J_{lj}\langle S_l^x\rangle\langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega. \tag{3.15}$$

Voltemos agora à equação (3.9), ou seja,

$$\omega\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega = -ih_l\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega,$$

ou

$$\omega^2\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega = -ih_l\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega. \tag{3.16}$$

Substituindo esta equação (3.16) na (3.15), obtemos a expressão

$$(\omega^2 - h^2)G_{lm}^0(\omega) = \frac{hR_l^x}{2\pi}\delta_{lm} - hR_l^x\sum_j J_{lj}G_{lm}^0(\omega), \tag{3.17}$$

onde $h = h_l, R_l^x = \langle S_l^x\rangle$, $G_{lm}^0(\omega) = \langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega$ e $G_{jm}^0(\omega) = \langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega$.

Vamos considerar, agora, que os spins estão arranjados numa rede cúbica simples semi-infinita (com espaçamento a) e onde os eixos coordenados x, y e z são paralelos as arestas do cubo.

Usemos a propriedade da invariância translacional paralela à superfície para escrever as funções de Green

$$G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}_\parallel} G_{\mathbf{q}_\parallel}^0(\omega)e^{i\mathbf{q}_\parallel\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R'})}, \tag{3.18}$$

$$G_{\mathbf{q}_\parallel}^0(\omega) = \sum_{\mathbf{R}-\mathbf{R'}} G_{lm}^0(\omega)e^{-i\mathbf{q}_\parallel\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R'})}, \tag{3.19}$$

onde N é o número total de sítios em cada camada, $\mathbf{r}_l = (\mathbf{R}, z)$, $\mathbf{r}_m = (\mathbf{R'}, z')$, com $\mathbf{R}$ e $\mathbf{R'}$ denotando vetores bidimensionais no plano xy, e $\mathbf{q}_\parallel = (q_x, q_y)$ é um vetor de onda bidimensional. Os índices das camadas são denotados por n e n' (iguais a $1, 2, 3, \cdots$), definidos por $z = (n-1)a$ e $z = (n'-1)a$, onde a e o parâmetro de rede.

É conveniente definir as seguintes somas para as interações de troca:

$$\nu_n^{(1)}(\mathbf{q}_\parallel) = \sum_{\delta_1} J_{lj} e^{i\mathbf{q}_\parallel \cdot \delta_1} \tag{3.20}$$

e

$$\nu_n^{(2)}(\mathbf{q}_\parallel) = \sum_{\delta_2} J_{lj} e^{i\mathbf{q}_\parallel \cdot \delta_2}, \tag{3.21}$$

onde δ_1 é um vetor conectando qualquer sítio l na camada n com seus primeiros vizinhos, também na camada n, enquanto δ_2 é um vetor conectando qualquer sítio l na camada n com seus primeiros vizinhos nas camadas adjacentes. As séries de equações da função de Green representadas pela (3.17) podem agora ser expressas na forma matricial como

$$\mathbf{A}\mathbf{G}^0_{n,n'} = -\frac{\delta_{nn'}}{2\pi J}, \tag{3.22}$$

onde, no caso de um meio semi-infinito, $\mathbf{A}$ e $\mathbf{G}^0$ são matrizes de dimensão infinita, dadas por [11]

$$\mathbf{G}^0_{nn} = G^0_{nn'}(\mathbf{q}_\parallel, \omega), \tag{3.23}$$

com

$$G^0_{nn'}(\mathbf{q}_\parallel, \omega) = \frac{1}{2\pi J(X - X^{-1})} \left(X^{|n-n'|} - \frac{1 + X^{-1}\Delta}{1 + X\Delta} X^{n+n'} \right) \tag{3.24}$$

e

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} d+\Delta & -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & d & 0 & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & d & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & d & -1 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & d & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}$$

onde n e n' são índices de camada ($n, n' = 1, 2, 3, \cdots$) para sítios r_l e r_m, e X é uma variável complexa (com $|X| \leq 1$) satisfazendo

$$X + X^{-1} = d = \frac{h^2 - 4hJR^x\gamma_2(q_\parallel) - \omega^2}{hJR^x}, \tag{3.25}$$

com

$$\gamma_2(q_\parallel) = \frac{1}{2}[\cos(q_x a) + \cos(q_y a]. \tag{3.26}$$

O parâmetro Δ depende das propriedades da superfície e é dado por

$$\Delta = \frac{\omega^2(h_S R^x_S - hR^x) - hh_S(hR^x_S - h_S R^x)}{hh_S R^x R^x_S} - 4\gamma_2(q_\parallel)\left(\frac{J_S}{J} - 1\right). \tag{3.27}$$

Usamos a notação $R^x_l = \langle S^x_l \rangle$ que pode tomar dois valores possíveis para

o sistema puro: $R_l^x = \frac{1}{2}\tanh(h_S/2k_BT) = R_S^x$ quando o sítio l está na superfície ou $R_l^x = \frac{1}{2}\tanh(h/2k_BT) = R^x$, quando o sítio l não está na superfície.

As funções de Green $G^0_{nn'}(\mathbf{q},\omega)$, dadas pela Eq. 3.24, contém uma descrição para os modos de volume e de superfície, juntamente com seus fatores apropriados esperados. De acordo com [11], os modos de volume podem ser obtidos fazendo-se $X = e^{iq_z a}$, onde q_z é uma componente real do vetor de onda, perpendicular à superfície. Da Eq. 3.25 obtemos a seguinte relação de dispersão para as ondas de spin de volume

$$\omega = [h^2 - 4hR^x J\gamma(\mathbf{q}_\parallel) - (X + X^{-1})hR^x J]^{1/2}. \tag{3.28}$$

Inserindo $X = e^{iq_z a}$ na equação acima teremos

$$\omega_B(\mathbf{q}_\parallel) = \{h^2 - 2hR^x J[\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)]\}^{1/2}, \tag{3.29}$$

onde $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_\parallel, q_z)$ é um vetor de onda tridimensional. Esta expressão é reconhecida como um resultado padrão 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, o que nos leva a

$$\omega = [h^2 - 4hR^x J\gamma(q) - (\Delta + \Delta^{-1})hR^x J]^{1/2}, \tag{3.30}$$

onde Δ é uma função de ω, conforme Eq. 3.27.

Dependendo dos parâmetros, 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 é simplificado a

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

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

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

A frequência dos modos de superfície e de volume foi amplamente discutida por Shiwai e Cottam [11].

Consideremos agora o sistema impuro, contendo uma impureza intersticial, que pode ocupar qualquer posição dentro de uma das faces da rede cúbica simples, paralela à superfície (vide Fig.60). Para a perturbação H' devida à impureza, há dois casos diferentes

a considerar. Primeiro quando a impureza está na região de volume (com índice de camada $N \geq 2$), H' é dado simplesmente por

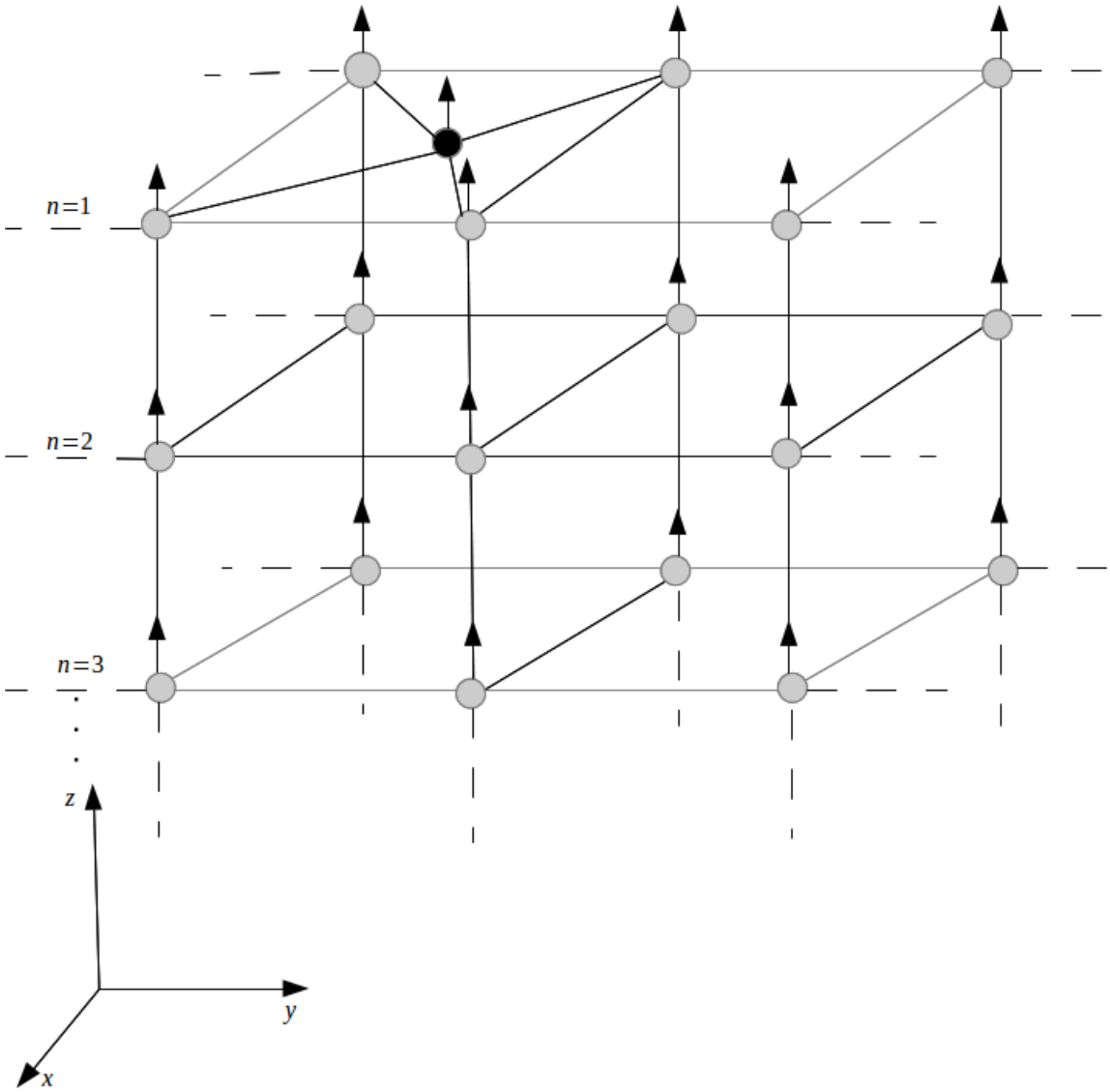

Figura 5: Ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita contendo uma impureza intersticial na camada $n = 1$, por exemplo.

$$H' = -\sum_{d} J'_{od} S^z_d S^z_z - h' S^x_o, \tag{3.33}$$

onde a soma é feita sobre os quatro primeiros vizinhos da impureza, ou seja, os sítios ocupando os vértices da face onde esta impureza está localizada.

Se a impureza está na superfície, o Hamiltoniano será dado por

$$H' = -\sum_{d} J_{S_{od}} S^z_d S^z_z - h' S^x_o. \tag{3.34}$$

A impureza também tem quatro primeiros vizinhos: todos eles (d) na camada de superfície.

Usando as equações (3.1), (3.2), (3.4), obtemos a expressão:

$$\omega\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \langle\langle [S_l^z, H_0]; S_m^z\rangle\rangle_z + \langle\langle [S_l^z, H']; S_m^z\rangle\rangle_z, \tag{3.35}$$

onde H' é dado pela (3.33).

O comutador do primeiro termo no segundo membro da (3.35) já foi calculado anteriormente e é dado pela (3.11). Para o comutador do segundo termo, temos:

$$\begin{aligned}[S_l^z, H'] &= -\sum_d J'_{od}(S_l^z S_d^z S_0^z - S_d^z S_0^z S_l^z) - h'(S_l^z S_o^x - S_o^x S_l^z) \\ &= -h'[S_l^z, S_o^x],\end{aligned}$$

ou

$$[S_l^z, H'] = -ih' S_l^y \delta_{lo}. \tag{3.36}$$

Substituindo as (3.8) e (3.36) na (3.35), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega &= -ih\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega - ih'\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega \delta_{l0} \\ &= -i(h + h'\delta_{l0})\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega.\end{aligned} \tag{3.37}$$

Vemos que a evolução temporal da F.G. $\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega$ deu origem a outra F.G., $\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega$, cuja evolução temporal é dada por:

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

ou

$$\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega = \frac{i}{2\pi}\langle S_l^x\rangle + \langle\langle [S_l^y, H_0]; S_m^z\rangle\rangle_\omega + \langle\langle [S_l^y, H']; S_m^z\rangle\rangle_\omega, \tag{3.38}$$

onde

$$\begin{aligned}[S_l^y, H_0] &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^y S_i^z S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^y) - \sum_i h_i(S_l^y S_i^x - S_i^x S_l^y) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_l^y S_i^z S_j^z - S_i^z S_l^y S_j^z + S_i^z S_l^y S_j^z - S_i^z S_j^z S_l^y) - \sum_i h_i(S_l^y S_i^x - S_i^x S_l^y) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}([S_l^y, S_i^z]S_j^z + S_i^z[S_l^y, S_j^z]) - \sum_i h_i[S_l^y, S_i^x] \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(iS_l^x S_j^z \delta_{li} + iS_i^z S_l^x \delta_{lj}) + i\sum_i h_i S_l^z \delta_{li},\end{aligned}$$

ou

$$[S_l^y, H_0] = -\frac{i}{2}\sum_j J_{lj} S_l^x S_j^z - \frac{i}{2}\sum_i J_{li} S_i^z S_l^x + ihS_l^z. \tag{3.39}$$

E

$$\begin{aligned}
[S_l^y, H'] &= -\sum_d J'_{od}(S_l^y S_d^z S_o^z - S_d^z S_o^z S_l^y) - h'(S_l^y S_o^x - S_o^x S_l^y) \\
&= -\sum_d J'_{od}(S_l^y S_d^z S_o^z - S_o^z S_l^y S_d^z + S_o^z S_l^y S_d^z - S_o^z S_d^z S_l^y) - h(S_l^y S_o^x - S_o^x S_l^y) \\
&= -\sum_d J'_{od}([S_l^y, S_d^z] S_o^z + S_d^z [S_l^y, S_o^z]) - h'[S_l^y, S_o^x],
\end{aligned}$$

ou

$$[S_l^y, H'] = -i \sum_d J'_{od}(S_l^x S_o^z \delta_{ld} + S_d^z S_l^x \delta_{lo}) + i h' S_l^z \delta_{lo}. \tag{3.40}$$

Substituindo as (3.40) e (3.39) na (3.38), obtemos:

$$\begin{aligned}
\omega \langle\langle S_l^y; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= \frac{i}{2\pi} \langle S_l^x \rangle \delta_{lm} - \frac{i}{2} \sum_j J_{lj} \langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
&- \frac{i}{2} \sum_i J_{li} \langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega - i \sum_d J'_{od} \langle\langle S_l^x S_o^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \delta_{ld} \\
&- i \sum_d J'_{od} \langle\langle S_d^z S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega \delta_{lo} + i h' \langle\langle S_l^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \delta_{lo}.
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Novamente, usemos a aproximação RPA para desacoplar as funções de Green, ou seja,

$$\begin{aligned}
\langle\langle S_l^x S_j^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_j^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega + \langle S_j^z \rangle \langle\langle S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
&= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_j^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega
\end{aligned} \tag{3.42}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle S_i^z S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega + \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_i^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
&= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_i^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega
\end{aligned} \tag{3.43}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle S_l^x S_o^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_o^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega + \langle S_o^z \rangle \langle\langle S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
&= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_o^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega
\end{aligned} \tag{3.44}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle S_d^z S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega &= \langle S_d^z \rangle \langle\langle S_l^x; S_m^z \rangle\rangle_\omega + \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_d^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega \\
&= \langle S_l^x \rangle \langle\langle S_d^z; S_m^z \rangle\rangle_\omega,
\end{aligned} \tag{3.45}$$

onde $\langle S_i^z \rangle = 0$ (a orientação média da componente de spin na direção z é nula) e trocamos

i por j na (3.42). Assim a (3.41) torna-se:

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle S_l^y; S_m^z\rangle\rangle_\omega &= \frac{i}{2\pi}\langle S_l^x\rangle\delta_{lm} - i\sum_j J_{lj}R_l^x\langle\langle S_j^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega \\ &- iR_l^x\sum_d J'_{od}(\langle\langle S_o^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega\delta_{ld} + \langle\langle S_d^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} \\ &+ ih'\langle\langle S_l^z; S_m^z\rangle\rangle_\omega\delta_{lo}. \end{aligned} \tag{3.46}$$

Substituindo este resultado na (3.37), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}\frac{\omega^2 - (h + h'\delta_{lo})h'\delta_{l0}}{h + h'\delta_{lo}}G_{lm}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\langle S_l^x\rangle\delta_{lm} + \sum_j J_{lj}R_l^x G_{jm}(\omega) \\ &+ R_l^x\sum_d J'_{od}(G_{om}(\omega)\delta_{ld} \\ &+ G_{dm}(\omega)\delta_{lo}). \end{aligned} \tag{3.47}$$

A Eq. 3.47 possui funções de Green que estão acopladas em sítio diferentes na rede. Como não há mais simetria de translação, estas funções não podem mais ser desacopladas através da introdução da transformada de Fourier das funções de Green no espaço. Porém, a Eq. (3.47) pode ser escrita em forma matricial (ver Apêndice A), ou seja,

$$[(\mathbf{G}^0)^{-1} - \mathbf{V}]\mathbf{G} = \mathbf{I}. \tag{3.48}$$

A vantagem de usar funções de Green é agora evidente, pois a Eq. 3.48 tem a forma de uma equação de Dyson, que pode ser resolvida com métodos similares àqueles usados em problemas de física quântica. Uma análise mais detalhada desta equação tão importante pode ser encontrada na referência [52].

Na Eq. 3.48, $\mathbf{G}^0 \equiv (2\pi/R_l^x)G_{lm}^0(\omega)$ e $\mathbf{G} \equiv (2\pi/R_l^x)G_{lm}(\omega)$ são as matrizes função de Green para os sistemas puro e impuro, respectivamente. $\mathbf{V}$ é um potencial efetivo relacionado à perturbação H' produzida pela impureza. Seus elementos de matriz são

$$Vlj = \frac{\omega^2(h' + h - 1) + h'(h' + h)}{h(h' + h)}\delta_{l0}\delta_{lj} - R_l^x\sum_d J'_{od}(\delta_{l0}\delta_{jd} + \delta_{j0}\delta_{ld}). \tag{3.49}$$

Para o caso em que a impureza está na superfície, os elementos da matriz $\mathbf{V}$ são dados por

$$V_{S_{lj}} = \frac{\omega^2(h' + h_S - 1) + h'(h' + h_S)}{h_S(h' + h_S)}\delta_{lo}\delta_{lj} - R_l^x\sum_d J'_{S_{od}}(\delta_{lo}\delta_{jd} + \delta_{jo}\delta_{ld}). \tag{3.50}$$

3.3 Os modos de Impureza

Por causa da presença da impureza isolada a simetria translacional não existe mais em nenhuma dimensão. Não é mais possível introduzir um vetor de onda bi-dimensional paralelo à superfície como no caso do ferromagneto semi-infinito puro. Em vez disso trabalhamos com o espaço real para resolver a equação (3.48) usando as expressões para $\mathbf{G}^0$ e V apropriadas para um sistema semi-infinito. Uma submatriz 5×5 é a única parte diferente de zero da matriz potencial: isto corresponde a impureza numa dada posição o, dentro de uma face paralela à superfície da rede cúbica simples semi-infinita, e seus quatro vizinhos, ocupando os vértices desta face.

A equação de Dyson (3.48) relaciona a matriz função de Green $\mathbf{G}$ para o sistema impuro à correspondente função de Green $\mathbf{G}^0$ para o sistema puro. As enegias de excitação associadas com o a impureza intersticial são dadas pela condição

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{3.51}$$

que representa os polos de $\mathbf{G}$ para o sistema impuro.

Consideremos, então, a impureza e seus quatro primeiros vizinhos, localizados numa face paralela ao plano xy ($n = n'$), de modo que a impureza pode ocupar todas as possíveis posições dentro desta face. Admitimos que os eixos coordenados são paralelos às arestas da face e que a origem está no centro da face. Por simetria, vemos que as funções de Green se repetem em cada região (A, B, C, D, E, F, G e H), conforme Fig. 61. Assim, basta considerar a impureza ocupando todas as posições possíveis dentro de uma das regiões (A, por exemplo).

A impureza ocupará as posições dadas por

$$\mathbf{r}_o = ka\mathbf{i} + pa\mathbf{j},$$

onde $0 \leq k < 0,5$, $0 \leq p < 0,5$ e $k \leq p$. Desta forma o deslocamento relativo entre a impureza e um dos quatro primeiros vizinhos é

$$\mathbf{r}_{o,j} = \mathbf{r}_o - \mathbf{r}_j,$$

e entre vizinhos, é

$$\mathbf{r}_{l,j} = \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j,$$

cujos módulos são $d_{oj} = |\mathbf{r}_o - \mathbf{r}_j|$ e $d_{lj} = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|$, respectivamente, com $j, l = 1, 2, 3, 4$.

Quando a impureza se encontra no centro da face, estará a igual distância dos

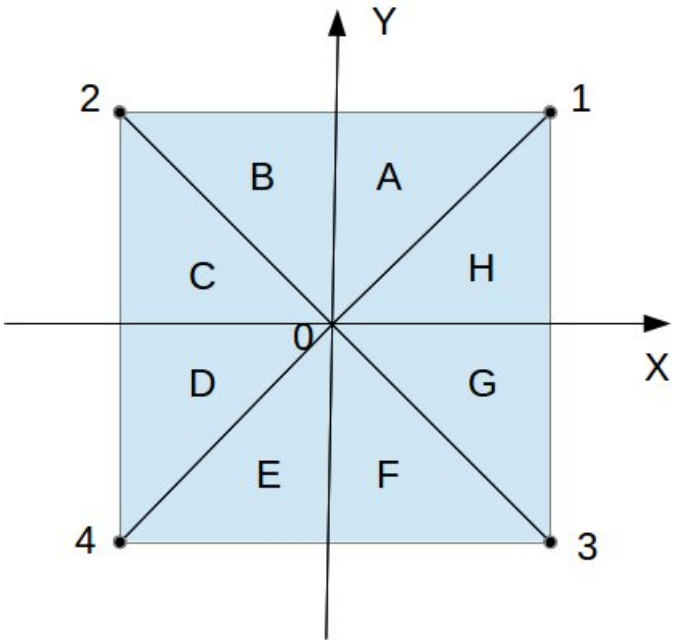

Figura 6: A impureza pode ocupar qualquer posição dentro da região A.

quatro primeiros vizinhos, tal distância é dada por

$$d = \frac{\sqrt{2}}{2}a. \tag{3.52}$$

Para este caso, a interação de troca entre a impureza e cada um de seus quatro primeiros vizinhos assume o valor J'.

Para uma outra posição qualquer da impureza dentro da face, sua interação de troca com cada vizinho depende da distância entre ela e este vizinho. Vamos considerar que esta interação depende da distância da seguinte forma

$$J'_{oj} = \frac{d_{oi}}{d}J'. \tag{3.53}$$

Assim a interação entre a impureza e os sítios dependem dos parâmentros (p e k) que determinam as posições da impureza dentro da face, ou seja,

$$\begin{aligned} J'_{o1} = J'_{1o} = \frac{d_{o1}}{d}J' &= \frac{a\sqrt{(0,5-k)^2+(0,5-p)^2}}{\frac{\sqrt{2}}{2}a}J' \\ &= \sqrt{2}\sqrt{(0,5-k)^2+(0,5-p)^2}J', \end{aligned} \tag{3.54}$$

$$\begin{aligned} J'_{o2} = J'_{2o} = \frac{d_{o2}}{d}J' &= \frac{a\sqrt{(0,5+k)^2+(0,5-p)^2}}{\frac{\sqrt{2}}{2}a}J' \\ &= \sqrt{2}\sqrt{(0,5+k)^2+(0,5-p)^2}J', \end{aligned} \tag{3.55}$$

$$J'_{o3} = J'_{3o} = \frac{d_{o3}}{d}J' = \frac{a\sqrt{(0,5-k)^2+(0,5+p)^2}}{\frac{\sqrt{2}}{2}a}J' = \sqrt{2}\sqrt{(0,5-k)^2+(0,5+p)^2}J', \quad (3.56)$$

$$J'_{o4} = J'_{4o} = \frac{d_{o4}}{d}J' = \frac{a\sqrt{(0,5+k)^2+(0,5+p)^2}}{\frac{\sqrt{2}}{2}a}J' = \sqrt{2}\sqrt{(0,5+k)^2+(0,5+p)^2}J' \quad (3.57)$$

Assim os modos de defeito associados com a ipureza são obtidos pela condição (3.51), ou seja,

$$\begin{aligned}
& [(G_{o4}^2 - G_{oo}^2)V_{o4} + (G_{o3}G_{o4} - G_oG_{34})V_{o3} + (G_{o2}G_{o4} - G_{oo}G_{24})V_{o2} \\
+ \; & (G_{o1}G_{o4} - G_{oo}G_{14})V_{o1} - G_{o4}]V_{4o} + [(G_{o3}G_{o4} - G_{oo}G_{34})V_{o4} \\
+ \; & (G_{o3}^2 - G_{oo}^2)V_{o3} + (G_{o2}G_{o3} - G_{oo}G_{23})V_{o2} + (G_{o1}G_{o3} - G_{oo}G_{13})V_{o1} \\
- \; & G_{o3}]V_{3o} + [(G_{o2}G_{o4} - G_{oo}G_{24})V_{o4} + (G_{o2}G_{o3} - G_{oo}G_{23})V_{o3} \\
+ \; & (G_{o2}^2 - G_{oo}^2)V_{o2} + (G_{o1}G_{o2} - G_{oo}G_{12})V_{o1} - G_{o2}]V_{2o} + [(G_{o1}G_{o4} \\
- \; & G_{oo}G_{14})V_{o4} + (G_{o1}G_{o3} - G_{oo}G_{13})V_{o3} + (G_{o1}G_{o2} - G_{oo}G_{12})V_{o2} \\
+ \; & G_{o1}]V_{1o} - G_{o4}V_{o4} - G_{o3}V_{o3} - G_{o2}V_{o2} - G_{o1}V_{o1} \\
- \; & G_{oo}V_{oo} + 1 = \det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \quad (3.58)
\end{aligned}$$

para $N \geq 2$ e

$$\begin{aligned}
& [(G_{o4}^2 - G_{oo}^2)V_{So4} + (G_{o3}G_{o4} - G_oG_{34})V_{So3} + (G_{o2}G_{o4} - G_{oo}G_{24})V_{So2} \\
+ \; & (G_{o1}G_{o4} - G_{oo}G_{14})V_{So1} - G_{o4}]V_{S4o} + [(G_{o3}G_{o4} - G_{oo}G_{34})V_{So4} \\
+ \; & (G_{o3}^2 - G_{oo}^2)V_{So3} + (G_{o2}G_{o3} - G_{oo}G_{23})V_{So2} + (G_{o1}G_{o3} - G_{oo}G_{13})V_{So1} \\
- \; & G_{o3}]V_{S3o} + [(G_{o2}G_{o4} - G_{oo}G_{24})V_{So4} + (G_{o2}G_{o3} - G_{oo}G_{23})V_{So3} \\
+ \; & (G_{o2}^2 - G_{oo}^2)V_{So2} + (G_{o1}G_{o2} - G_{oo}G_{12})V_{So1} - G_{o2}]V_{S2o} + [(G_{o1}G_{o4} \\
- \; & G_{oo}G_{14})V_{So4} + (G_{o1}G_{o3} - G_{oo}G_{13})V_{So3} + (G_{o1}G_{o2} - G_{oo}G_{12})V_{So2} \\
+ \; & (G_{o1}^2 - G_{oo}^2)V_{So1} - G_{o1}]V_{S1o} - G_{o4}V_{So4} - G_{o3}V_{So3} - G_{o2}V_{So2} \\
- \; & G_{o1}V_{So1} - G_{oo}V_{Soo} + 1 = \det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \quad (3.59)
\end{aligned}$$

para $N = 1$. As funções $G_{lm} = (2\pi/R_l^x)G_{l,m}^0(\omega)$, com l e m inteiros assumindo valores de 0 a 4, são os elementos da matriz função de Green $\mathbf{G}^0$ para o sistema puro, sendo obtidos

pela 3.18. Os elementos V_{lj} da matriz $\mathbf{V}$ são dados por:

$$V_{oo} = \frac{\omega^2(h + h' - 1) + h'(h' + h)}{h(h' + h)}, \tag{3.60}$$

$$V_{o1} = V_{oo} - J'_{o1}R^x_o, \tag{3.61}$$

$$V_{o2} = V_{oo} - J'_{o2}R^x_o, \tag{3.62}$$

$$V_{o3} = V_{oo} - J'_{o3}R^x_o, \tag{3.63}$$

$$V_{o4} = V_{oo} - J'_{o4}R^x_o, \tag{3.64}$$

$$V_{1o} = V_{oo} - J'_{1o}R^x_1, \tag{3.65}$$

$$V_{2o} = V_{oo} - J'_{2o}R^x_2, \tag{3.66}$$

$$V_{3o} = V_{oo} - J'_{3o}R^x_3, \tag{3.67}$$

$$V_{4o} = V_{oo} - J'_{4o}R^x_4 \tag{3.68}$$

e

$$V_{S_{oo}} = \frac{\omega^2(h_S + h' - 1) + h'(h' + h_S)}{h_S(h' + h_S)}, \tag{3.69}$$

$$V_{S_{o1}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{o1}}R^x_o, \tag{3.70}$$

$$V_{S_{o2}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{o2}}R^x_o, \tag{3.71}$$

$$V_{S_{o3}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{o3}}R^x_o, \tag{3.72}$$

$$V_{S_{o4}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{o4}}R^x_o, \tag{3.73}$$

$$V_{S_{2o}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{2o}} R^x_o, \tag{3.74}$$

$$V_{S_{3o}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{3o}} R^x_o, \tag{3.75}$$

$$V_{S_{4o}} = V_{S_{oo}} - J'_{S_{4o}} R^x_o, \tag{3.76}$$

com os J'_{oi} (J'_{io}) dadas pelas (3.54-3.57).

3.4 Resultados Numéricos

É frequentemente útil distinguir entre os modos de ondas de spin se propagando e os modos de ondas de spin localizados. Os primeiros se referem a modos de 'volume' (ou '*bulk*'), e os segundos se referem a modos de 'superfície' e de 'defeito' (associados com a impurezas).

Quando os modos de impureza estão fora da banda de volume do material puro, eles são conhecidos como modos não-ressonantes ou modos de 'defeito'. Os modos de impureza dentro da banda de volume são conhecidos como modos ressonantes. Nesta seção, serão discutidos apenas os modos de defeitos. Os modos ressonantes são, experimentalmente, mais difíceis de serem detectados [8] e serão discutidos na próxima seção. No caso de um sistema semi-infinito, pode haver ondas de spin de superfície localizadas, associadas com o material puro [10, 11] e essas podem influenciar os modos de 'defeito' (por analogia com estudos para sistemas magnéticos de Heisenberg [3, 4, 5]). Este efeito deveria ser particularmente evidente quando a impureza está na superfície ($N = 1$), onde as ondas de spin de superfície tem sua maior amplitude.

Agora apresentamos resultados numéricos quando a impureza está localizada na superfície ($N = 1$) e na região de volume ($N = 10$). Especificamente, assumimos uma razão fixa $J/h = 1,0$ para o material puro e uma temperatura T correspondendo a $k_B T/h = 2,5$. A temperatura crítica correspondente no material puro satisfaz $k_B T_C/h \cong 0,65$ para esta escolha de parâmetros. Em todos os casos, plotamos apenas os modos de 'defeito' que estão abaixo da banda de volume do material puro. O limite inferior da banda de volume ocorre em $\omega/J \cong 0,63$, a qual está indicada por uma linha horizontal em cada gráfico.

Nas Figs. 62 e 63 mostramos resultados para a dependência das frequências dos modos de impureza, em gráficos da quantidade adimensional ω/J versus as razões J'/J e h'/h, respectivamente, quando a impureza está na camada $N = 10$. Tomamos $h_S = h$ e $J_S = J$, por simplicidade, o que significa que não haverá ondas de spin de superfície

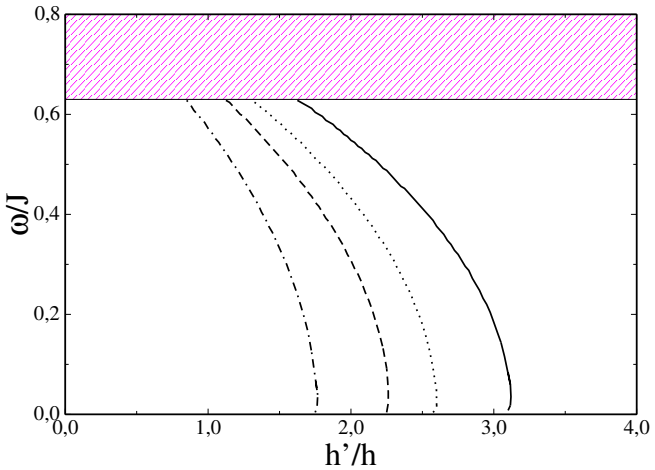

Figura 7: Frequências dos modos de defeito versus campo aplicado (h'/h), no caso de $N = 10$, para diferentes valores de $(p; k)$: (0,3;0,0) para a linha contínua, (0,3;0,3) para a linha pontilhada, (0,49;0) para a linha tracejada e (0,49;0,49) para a linha traço-pontilhada. Assumimos que $J_S/J = 1,0$.

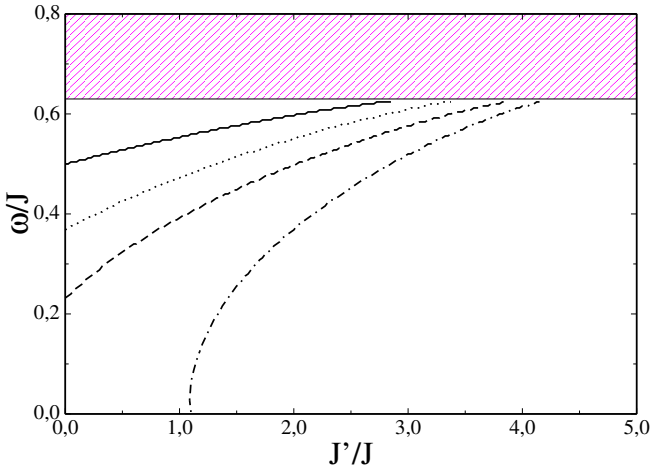

Figura 8: Frequências dos modos de defeitos versus interação de troca (J'/J), no caso de $N = 10$, para diferentes valores de $(p; k)$: (0,3;0) para a linha contínua, (0,3;0,3) para a linha pontilhada, (0,49;0) para a linha tracejada e (0,49;0,49) para a linha traço-pontilhada. Assumimos que $J_S/J = 1,0$, $h'/h = 1,5$.

localizadas para o material puro [10, 11] neste caso. A Fig. 62 mostra um gráfico de ω/J versus h'/h para um valor fixo $J'/J = 1,5$ e a Fig. 63, mostra um gráfico de ω/J versus J'/J para um valor fixo $h'/h = 1,5$. Para ambos os casos, nós consideramos alguns valores de p e k. Estes resultados indicam que ω/J é sensível a mudanças em ambos p and k. Pode ser visto, a partir desses gráficos de ω/J versus h'/h e de ω/J versus J'/J, que quando os valores de p e k aumentam, as curvas são deslocadas e têm uma mudança na inclinação. Isto se dá devido à dependência da interação de troca na distância entre a impureza e seus vizinhos.

A Fig. 64 mostra um gráfico de ω/J versus J'/J para alguns valores de h'/h (tomando $N = 10$ e os valores fixos $p = 0,49$ e $k = 0,49$), enquanto o caso inverso (ω/J

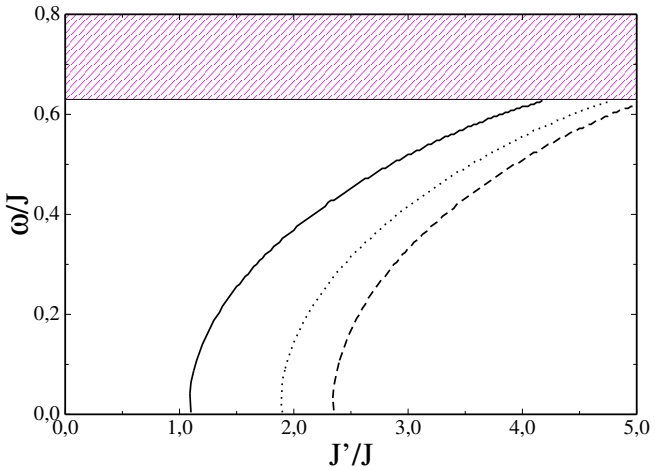

Figura 9: Frequências dos modos de defeito versus interação de troca no caso de $N = 10$ para diferentes valores de h'/h: $h'/h = 1,5$ para a linha tracejada, $h'/h = 1,8$ para a linha pontilhada e $h'/h = 2,0$ para a linha contínua. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,3; 0,3)$.

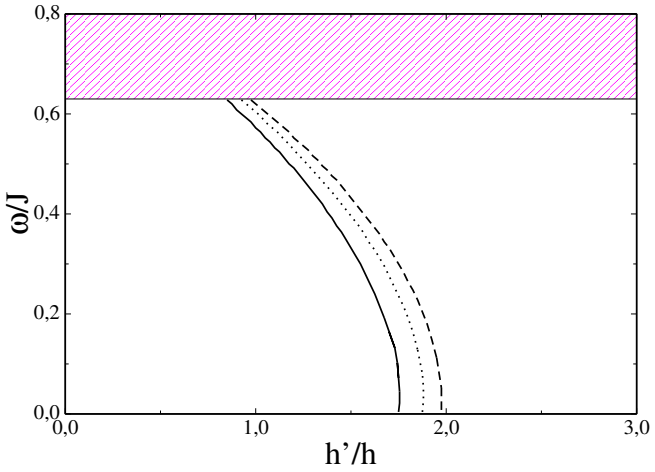

Figura 10: Frequências dos modos de defeito versus campo aplicado no caso de $N = 10$ para diferentes valores de J'/J: $J'/J = 1,5$ para a linha contínua, $J'/J = 1,8$ para a linha pontilhada e $J'/J = 2,0$ para a linha tracejada. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,49; 0,49)$.

versus h'/h) é mostrado na Fig. 65. Estes resultados indicam que ω/J é também sensível a mudanças em ambos h'/h e J'/J.

Alguns resultados análogos para o caso de uma impureza na camada $N = 1$ são mostrados na Fig. 66, tomando outros parâmetros como antes. Pode ser visto a partir deste gráfico de ω/J versus J'/J que, comparado com a Fig. 64, algumas curvas são deslocadas e têm uma mudança na inclinação. Isto se deve ao fato de que a impureza e seus primeiros vizinhos agora estão na superfície, onde suas propriedades são perturbadas.

Finalmente, na Fig.67, ilustramos a dependência dos resultados no parâmetro de troca na superfície J_S para o meio semi-infinito. Especificamente, plotamos ω/J versus J'/J (tomando $N = 1$ e os valores fixos $h'/h = 2,0$, $k = 0,49$ e $p = 0,49$).

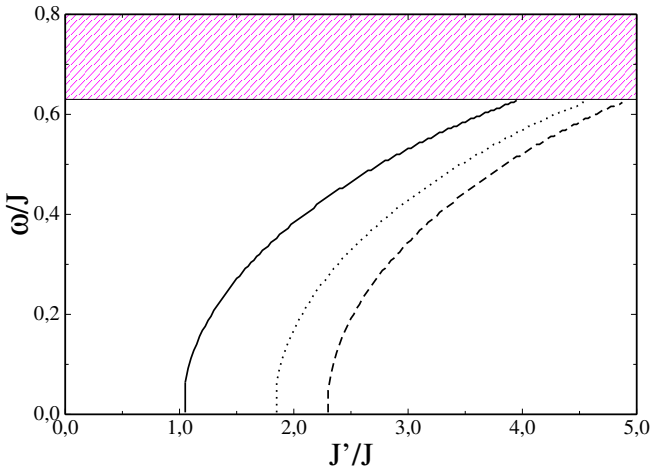

Figura 11: Frequências dos modos de defeito versus interação de troca no caso de $N = 1$ para diferentes valores de h'/h: $h'/h = 1,5$ para a linha tracejada, $h'/h = 1,8$ para a linha pontilhada e $h'/h = 2,0$ para a linha contínua. Assumimos um valor fixo para p e k: $(p, k) = (0,3; 0,3)$.

Resulatdos são mostrados para alguns valores de J_S/J. Quando a razão excede $1,25$, há modos de superfície acústicos (banda de ondas de spin de superfície do material puro abaixo do mínimo da banda de volume [10, 11]). Consequentemente, os modos de 'defeito' nesta região podem decair em um modo de superfície com mesma frequência, e os modos de 'defeito' não são mais excitações bem definidas. Isto explica porque as curvas na Fig. 67 terminam em um valor de ω/J abaixo de $0,63$ quando J_S/J aumenta. Em contraste, encontramos que este efeito não ocorre quando $J_S/J \leq 0,75$. Isto ocorre porque os modos de superfícies ópticos (que podem ocorrer se $J_S/J \leq 0.75$) ocorrem em frequências acima da banda de volume [10, 11], e assim não se torna degenerado com os modos de impureza estudados aqui.

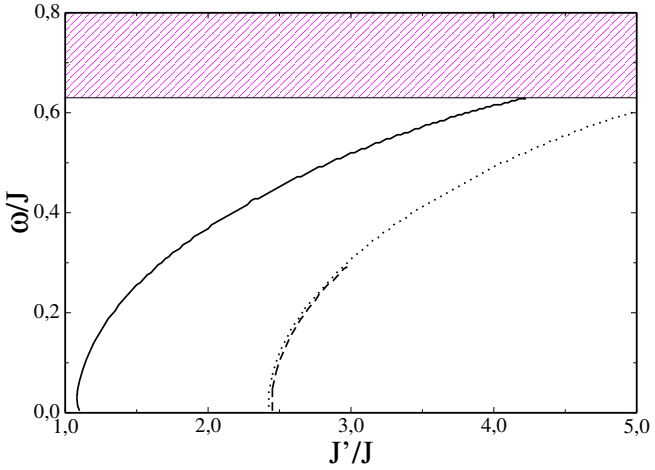

Figura 12: Frequências dos modos de defeito versus interação de troca para $h'/h = 1,0$ no caso de $N = 1$ e para diferentes valores de J_S/J: $J_S/J = 1,0$ para a linha contínua, $J_S/J = 1,3$ para a linha pontilhada e $J_S/J = 1,35$ para a linha tracejada.

3.5 Modos Ressonantes

Se a energia ω do estado considerado estiver dentro da banda de onda de spin, os elementos de matriz $G^0_{i,j}(\omega)$ são complexos [2]. Não é geralmente possível satisfazer as Eqs. 3.58 e 3.59 para ω real; porém, esta equação pode ser satisfeita pelas partes reais das funções de Green. Então, 'um estado virtual' ou 'ressonante' deve existir quando a parte real do determinante secular se anula.

Na Fig. 68 mostramos os modos associados à impureza para um grande intervalo de energias, tomando o caso em que $N = 1$, com os seguintes parâmetros: $h'/h = 1,5$, $h_S/h = J_S/J = 1,0$ e $(p;k) = (0,49;0,49)$. Neste caso, não há modos de defeitos acima do topo da banda de volume, a qual corresponde a $\omega/J \approx 1,26$. Porém, dentro desta banda $(0,63 \leq \omega \leq 1,26)$, deve existir modos ressonantes associados com a impureza, dependendo do valor de J'/J.

Em seguida consideramos casos onde a impureza está na superfície e o valor de J_S/J é tal que modos de superfície de onda spin estão presentes no espectro do ferromagneto puro. Na Fig. 69, mostramos um exemplo numérico para o caso de $J_S/J < 0,75$ quando um modo óptico está presente (ramificado para fora, a partir da borda mais alta da banda de volume.) Comparado com a Fig. 68, a curva é deslocada para a esquerda. Este resultado pode ser facilmente compreendido como segue: quando a interação de troca entre os spins na superfície é reduzida, o acoplamente do spin da impureza com seus vizinhos e, então, com o resto do sistema, também é reduzido. É então fácil excitar qualquer modo associado com a impureza comparado com o caso quando ela está fortemente acoplada a todo o sistema. Por outro lado, quando $J_S > 1,25J$, há um modo de superfície acústico, que se ramifica para fora, a partir da borda mais baixa da banda de energia do material puro. A energia mínima deste ramo acústico está na zona limite do vetor de onda $\mathbf{q}_{\|} = (0,0)$, e é dada por [11] (vide Eq. 3.31)

$$\omega^{ac}_{min} = \{h^2 - hJR^x[4J_S/J + (4(J_S/J - 1))^{-1}]\}^{1/2}. \tag{3.77}$$

Na Fig. 70 mostramos um exemplo com $J_S/J = 1,251$. É visto que o modo de impureza é dramaticamente perturbado pela presença do modo acústico de superfície. Primeiro, a curva é deslocada para a direita comparada com Fig. 68, segundo, torções são produzidas na curva próximo à energia mínima ω^{ac}_{min} do modo acústico de superfície.

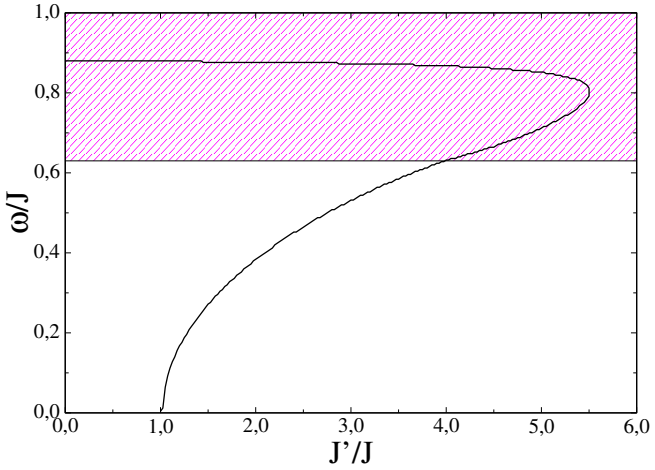

Figura 13: Modos associados com uma impureza intersticial na camada da superfície ($N = 1$). Gráfico da frequência ω (energia) versus interação de troca J', mostrando ambos os modos de defeito e os modos ressonantes. O limite inferior da banda de volume está indicada por uma linha horizontal em $\omega/J \approx 0,63$, e o limite superior está também indicada por uma linha horizontal, mas em $\omega/J \approx 1,26$.

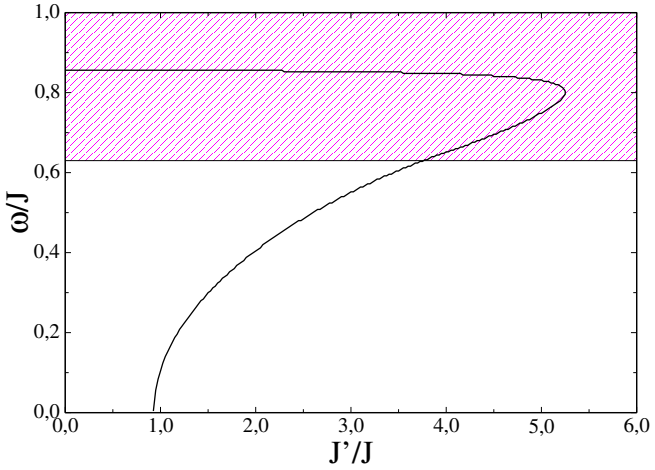

Figura 14: Modos de impureza mostrados próximos do limite inferior da banda de volume da onda de spin na presença de um modo de superfície (considerando $J_S/J = 0,74$), assumindo que a impureza está na camada da superfície ($N = 1$).

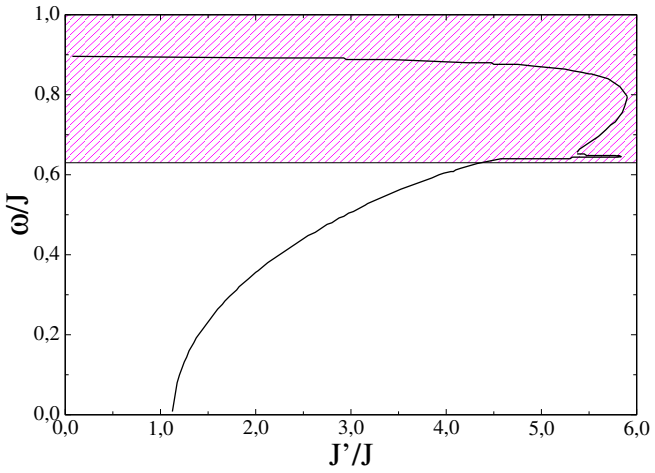

Figura 15: Modos de impureza mostrados próximos do limite inferior da banda de volume da onda de spin na presença de um modo de superfície acústico (tomando $J_S/J = 1,251$), assumindo que a impureza está na camada da superfície ($N = 1$).

4 IMPUREZA INTERSTICIAL NUM FERROMAGNETO DE REDE QUADRADA INFINITA

4.1 Introdução

Neste capítulo (e nos capítulos 5 e 7) estudaremos os estados localizados de ondas de spin, associados a uma impureza intersticial isolada, em sistemas magnéticos bidimensionais.

Ondas de spin em sistemas magnéticos 2D são muito interessantes, tanto experimentalmente [87]-[91] como teoricamente [92]-[98]. Por exemplo, estes sistemas são relevantes para a compreensão de supercondutores de alta temperatura [99]-[105], e são a base de muitas aplicações tecnológicas de filmes ferromagnéticos ultrafinos (exemplo, memória magnética, interruptores, magnetorresistência gigante, etc). Em adição, ondas de spin 2D são importantes nos novos campos promissores de spintrônicas.

Nos anos recentes, estruturas magnéticas ultrafinas têm sido fabricadas e estudadas extensivamente, por meio da dinâmica de ondas de spin. Tais estruturas podem ter a presença de superfícies, de camadas de impurezas, impurezas localizadas, ou mesmo uma baixa concentração delas. Tudo isso modifica o espectro de excitações desse meio, assim é útil distinguir modos de ondas de spin que se propagam e modos de ondas de spin localizados. Na geometria de um filme, estes modos usualmente se referem a modos de volume (ou *bulk*) e modos de superfícies e/ou de defeito. Assim, novos estudos teóricos são necessários onde a presença de superfícies e de impurezas são importantes e onde os modos de ondas de spin localizados são considerados em detalhes.

Aqui, investigaremos os modos localizados de ondas de spin associados com uma impureza intersticial magnética isolada, em uma rede quadrada simples. Para isto, consideramos o modelo de Heisenberg/Ising, onde podemos passar do modelo de Heisenberg para o de Ising variando um parâmetro explícito λ. Para $\lambda = 1$, temos um ferromagneto de Heisenberg e para $\lambda = 0$, o ferromagneto de Ising. Este Hamiltoniano abre a possibilidade para uma variedade de espectro de energia de acordo com os valores de λ.

Usando a técnica de funções de Green [30], encontramos os modos localizados s, p e d, associados ao sistema impuro. Obtemos resultados numéricos para os modos de defeito localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza e sítios vizinhos, assim como o campo aplicado na impureza e o parâmetro λ.

4.2 Modelo e Formalismo da função de Green

O sistema em estudo é uma rede quadrada simples que se estende ao longo do plano xy, onde uma impureza intersticial, que interage ferromagneticamente com seus primeiros vizinhos, é acrescentada. O hamiltoniano usado para descrever o sistema puro (vide Fig.16) pode ser escrito como

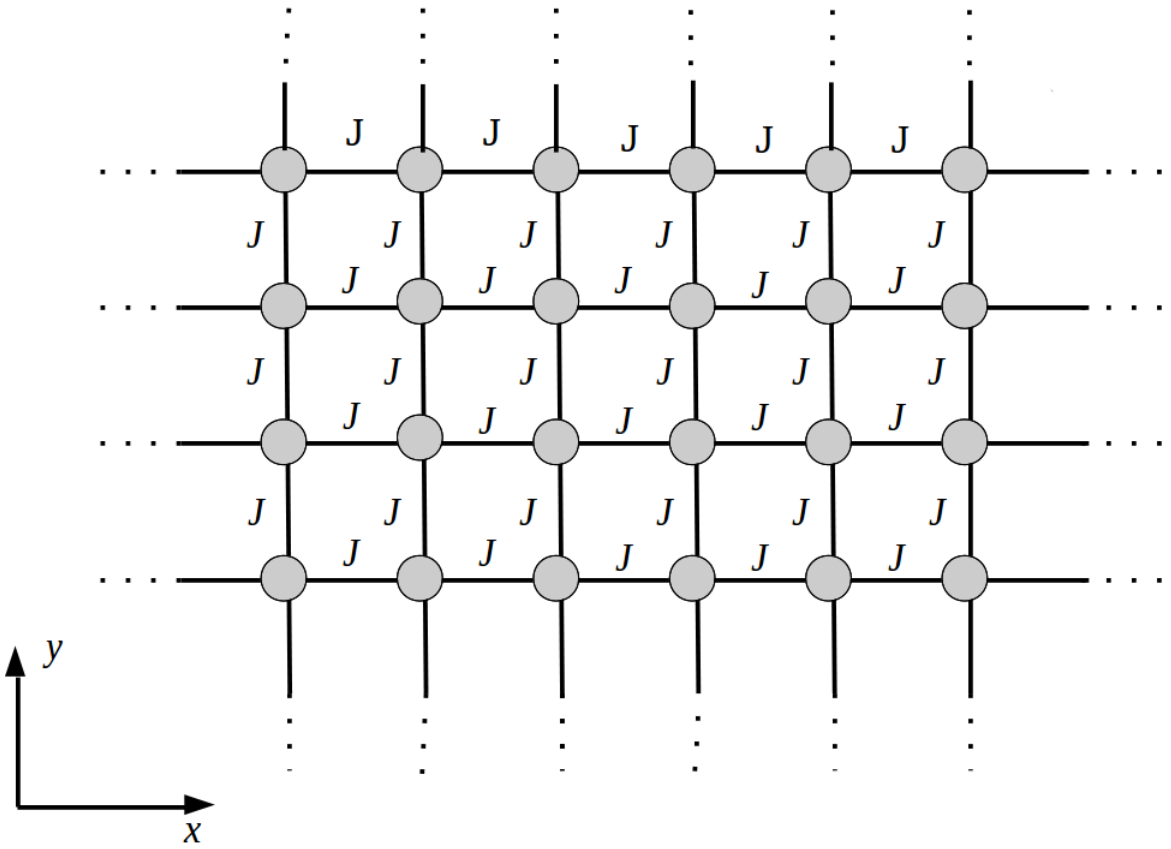

Figura 16: Ferromagneto de rede quadrada infinita.

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j}[\lambda(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_i h_i S_i^z \tag{4.1}$$

onde S_i^x, S_i^y e S_i^z são as componentes x, y e z, respectivamente, do operador de spin no sítio i, tendo número quântico S em qualquer lugar, exceto na impureza, onde o número quântico spin é denotado por S'. A interação de troca entre primeiros vizinhos J_{ij}, para o material puro, assume o valor J. A interação de troca entre a impureza e seus vizinhos é denotada por J'. O campo magnético externo é $h_i = g\mu_B B_0 = h$, exceto na impureza, onde $h_i = g'\mu_B B_0 = h'$, com $g' \neq g$.

Por conveniência, para descrever o sistema impuro (vide Fig. 17), reescrevemos o Hamiltoniano como $H = H_0 + H'$, onde H_0 é o Hamiltoniano para o sistema puro e H' é a perturbação devida à impureza, sendo dado por

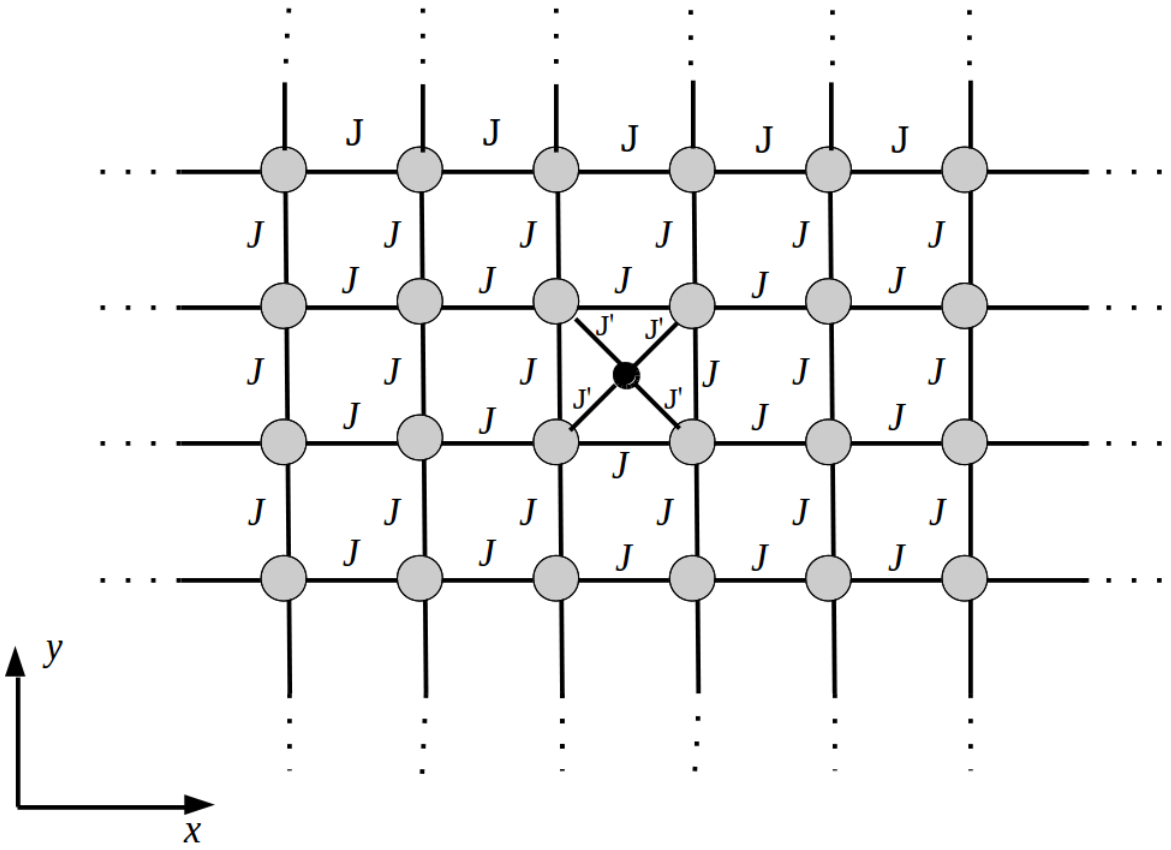

Figura 17: Ferromagneto de rede quadrada infinita contendo uma impureza intersticial.

$$H' = -J' \sum_d [\lambda(S_o^x S_d^x + S_o^y S_d^y) + S_o^z S_d^z] - h' S_o^z, \tag{4.2}$$

onde o índice o rotula a impureza e o índice d, os primeiros vizinhos da impureza.

O comutador de dois operadores de spin é um outro operador, e não um simples número complexo. Assim fica muito mais complicado trabalhar diretamente com operadores de spin do que com operadores canônicos bosônicos (fermiônicos) de criação e aniquilação, cujos comutadores (anticomutadores) são simples números complexos. Seria então vantajoso se se pudesse representar os operadores de spin em termos de tais operadores bosônicos ou fermiônicos e trabalhar com estes, ao invés daqueles. Poucas representações são conhecidas. Aqui faremos uso da chamada representação de Holstein-Primakoff (HP) [107].

A transformação Holstein-Primakoff consiste basicamente em obter o Hamiltoniana do sistema na forma diagonal, em função dos operados de criação e aniquilação $b_i^\dagger$ e b_i, respectivamente. O operador para o número de desvios do spin no sítio i é

$$n_i = S - S_i^z,$$

onde S e S_i são o número quântico de spin e sua componente em z. O operador de

criação de desvio de spin $b_i^\dagger$ é o operador que cria um quantum de desvio de spin, isto é, que reduz S_i^z de uma unidade. Analogamente o operador de aniquilação de desvio de spin b_i aumenta S_i^z de uma unidade.

É possível obter relações entre os operadores de escada ($S_i^+ = S_i^x + iS_i^y$ e $S_i^- = S_i^x - iS_i^y$) e os operadores de criação e aniquilação ($b_i^\dagger$ e b_i) [107], estas relações são:

$$S_i^+ = (2S)^{1/2}\left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S}\right)^{1/2} b_i,$$

$$S_i^- = (2S)^{1/2} b_i^\dagger \left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S}\right)^{1/2}$$

e

$$S_i^z = S - b_i b_i = S - n_i$$

Podemos também expressar as componente x e y do número quântico de spin S em termos dos operadores de escada, ou seja,

$$S_i^x = \frac{1}{2}(S_i^+ + S_i^-) \tag{4.3}$$

e

$$S_i^y = \frac{1}{2i}(S_i^+ - S_i^-), \tag{4.4}$$

e, desta forma, escrever o Hamiltoniano em termos estes operadores, ou seja,

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\left[\frac{\lambda}{4}(2S_i^+ S_j^- + 2S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z\right] - \sum_i h_i S_i^z \\ &= -\frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}\left[\lambda(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + 2S_i^z S_j^z\right] - \sum_i h_i S_i^z. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Em temperaturas muito baixas ($k_B T \ll JS$), a aproximação de ondas de spin linearizada pode ser usada para dar

$$S_i^+ = (2S - b_i^\dagger b_i)^{1/2} b_i \simeq (2S)^{1/2} b_i, \tag{4.6}$$

$$S_i^- = b_i^\dagger (2S - b_i^\dagger b_i)^{1/2} \simeq (2S)^{1/2} b_i^\dagger, \tag{4.7}$$

$$S_i^z = S - b_i^\dagger b_i. \tag{4.8}$$

Esta aproximação é válida somente se $\langle n_i \rangle / 2S \ll 1$, isto é, se o valor esperado do número de desvios no spin S_i é muito menor do que o valor máximo possível, que é 2S.

Pela substituição das (4.6), (4.7) e (4.8) na (4.5), obtemos o Hamiltoniano de termos linearizados

$$\begin{aligned} H &= \left(-\frac{S}{2}\sum_{i,j} J_{ij}[\lambda(b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j) - b_i^\dagger b_i - b_j^\dagger b_j] + \sum_i h_i b_i^\dagger b_i\right) \\ &+ \left(-\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}S^2 - \sum_i S h_i\right) \\ &= H_0 + E_0, \end{aligned} \tag{4.9}$$

onde

$$E_0 = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}S^2 - \sum_i S h_i$$

é a energia do estado fundamental para o sistema ferromagnético e

$$H_0 = \sum_i \left[\left(S\sum_j J_{i,j} + h_i\right) b_i^\dagger b_i\right] - S\sum_{i,j} \lambda J_{i,j} b_i^\dagger b_j, \tag{4.10}$$

é o Hamiltoniano que descreve este sistema.

Para o Hamiltoniano devido à impureza, consideramos que

$$S_o^+ = (2S' - b_o^\dagger b_o)^{1/2} \simeq (2S')^{1/2} b_o, \tag{4.11}$$

$$S_d^+ = (2S - b_d^\dagger b_d)^{1/2} \simeq (2S)^{1/2} b_d, \tag{4.12}$$

$$S_o^- = b_o^\dagger (2S' - b_o^\dagger b_o)^{1/2} \simeq (2S')^{1/2} b_o^\dagger, \tag{4.13}$$

$$S_d^- = b_d^\dagger (2S - b_d^\dagger b_d)^{1/2} \simeq (2S)^{1/2} b_d^\dagger, \tag{4.14}$$

$$S_o^z = S' - b_o^\dagger b_o. \tag{4.15}$$

$$S_d^z = S - b_d^\dagger b_d. \tag{4.16}$$

Assim a (4.2) nos fornece:

$$H' = -JS\sum_d [\lambda\alpha(b_o b_d^\dagger + b_o^\dagger b_d) - \beta b_o^\dagger b_o - \gamma b_d^\dagger b_d] + h' b_o^\dagger b_o, \tag{4.17}$$

onde definimos as seguintes quantidades

$$\alpha = \frac{J'}{J}\sqrt{\frac{S'}{S}}, \beta = \frac{J'}{J}, \gamma = \frac{J'S'}{JS} \tag{4.18}$$

Agora, consideremos a função de Green retardada, definida em termos dos operadores dependentes do tempo $b_l(t)$ e $b_m^\dagger(t')$, na representação de Heisenberg, e que satisfaz a equação de movimento

$$\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[b_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{4.19}$$

onde ω é um índice de frequência e H, é o Hamiltoniano do sistema. Substituindo a (4.10) na (4.19) obtemos (vide Apêndice B):

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{2\pi}\langle[b_l, b_m^\dagger]\rangle \\
&+ \sum_i \left[(S\sum_j J_{ij} + h_i)\langle\langle b_i; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \delta_{li}\right] \\
&- \sum_i \left(S\sum_j J_{ij} + h_i\right)\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \delta_{li},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\omega G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h\right)G_{lm}^0 - S\sum_j \lambda J_{lj} G_{jm}^0, \tag{4.20}$$

onde $G_{lm}^0(\omega) = \langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ e $G_{jm}^0(\omega) = \langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$

Considerando a simetria de translação, introduzamos a transformada de Fourier $G_{\mathbf{q}}(\omega)$ da função de Green $G_{lm}(\omega)$, definida como

$$G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^0(\omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \Rightarrow$$

$$G_{\mathbf{q}}^0(\omega) = \sum_{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m} G_{lm}^0(\omega) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \tag{4.21}$$

onde $\mathbf{r}_l$ e $\mathbf{r}_m$ são vetores bidimensionais que localizam os sítios na rede quadrada infinita, $\mathbf{q} = q_x\hat{i} + q_y\hat{j}$ é um vetor de onda bidimensional ao longo do plano xy e N, é o número

total de sítios na rede. Assim, pelas (4.20) e (4.21), obtemos

$$\begin{aligned}\omega G^0_{\mathbf{q}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h\right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega) \\ &- \left(S\sum_j \lambda J_{lj} e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)}\right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega),\end{aligned}$$

onde (vide Fig.29)

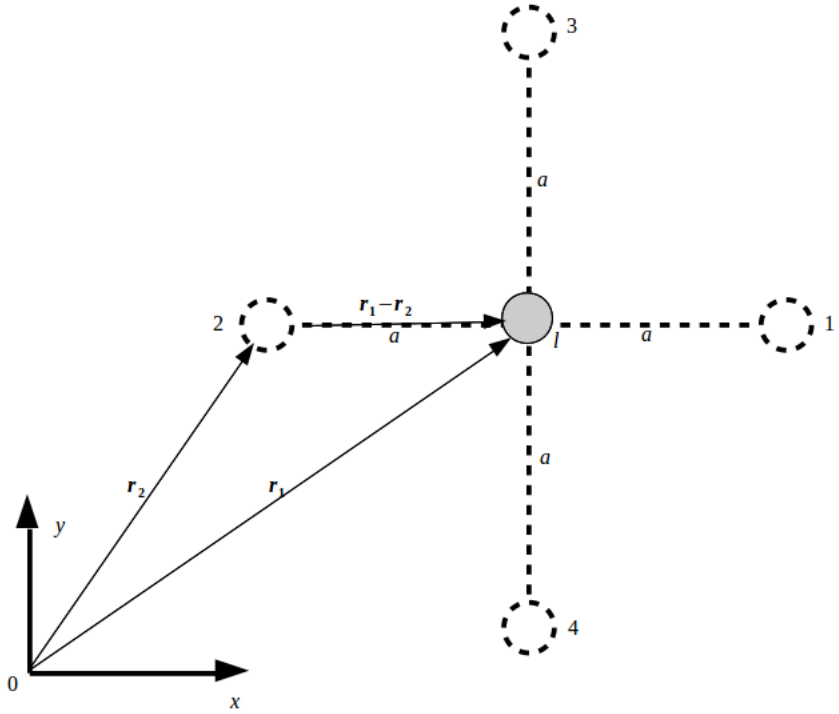

Figura 18: Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede quadrada infinita, e seus quatro primeiro vizinhos.

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{4} J_{jl} e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} &= J_{l1} e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i})} + J_{l2} e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i})} \\ &+ J_{l3} e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{j})} + J_{l4} e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{j})} \\ &= J[e^{iq_x a} + e^{-iq_x a} + e^{iq_y a} + e^{-iq_y a}] \\ &= 2J[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)] = 2J\gamma_2(\mathbf{q}),\end{aligned}$$

onde $\gamma_2(\mathbf{q}) = \cos(q_x a) + \cos(q_y a)$ é o fator de estrutura e consideramos que as interações de troca entre vizinhos são iguais.

Assim, obtemos a seguinte expressão para $G^0_{\mathbf{q}}(\omega)$, ou seja,

$$G^0_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\omega - \omega(q,\lambda)}, \tag{4.22}$$

onde as frequências $\omega(q,\lambda)$ são dadas por

$$\omega(q,\lambda) = h + 2JS\{2 - \lambda\gamma_2(\mathbf{q})\}. \tag{4.23}$$

Assim, pela (4.21), temos as funções de Green para o sistema puro, ou seja,

$$G^0_{lm}(\omega) = \frac{1}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}}\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)}}{\omega - \omega(q,\lambda)}. \tag{4.24}$$

Consideremos agora o caso em que o sistema contém uma impureza intersticial, localizada no centro de um dos quadrados da rede quadrada infinita (vide Fig. 17). A função de Green para este caso pode ser construida pela substituição das (4.10) e (4.17) na (4.19), o que nos fornece a seguinte expressão (ver Apêndice C):

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm} &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(S\sum_j J_{lj} + h\right)G_{lm}(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj}G_{jm}(\omega) \\
&- JS\left\{\sum_d \lambda\alpha[G_{om}(\omega)\delta_{ld} + G_{dm}(\omega)\delta_{lo}]\right\} \\
&- JS\left\{\sum_d [\beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} + \gamma G_{dm}(\omega)\delta_{ld}]\right\} \\
&+ h' G_{om}(\omega)\delta_{lo}.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

A equação (4.25) pode ser expressa matricialmente na forma de uma equação de Dyson, ou seja,

$$[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}]\mathbf{G} = \mathbf{G}^0, \tag{4.26}$$

onde $\mathbf{G}^0$ é a matriz função de Green para o sistema puro e $\mathbf{G}$, para o sistema impuro, cujos elementos são $2\pi JSG^0_{lm}(\omega)$ e $2\pi JSG_{lm}(\omega)$, respectivamente. A matriz $\mathbf{V}$ é o potencial efetivo devido a impureza, cujos elementos são

$$\begin{aligned}
V_{lj} &= \sum_d [(-\lambda\alpha)(\delta_{ld}\delta_{jo} + \delta_{lo}\delta_{jd}) - \beta\delta_{lo}\delta_{jo} \\
&- \gamma\delta_{ld}\delta_{jd} - (h'/JS)\delta_{lo}\delta_{jo}].
\end{aligned} \tag{4.27}$$

4.3 Modos de impureza e resultados numéricos

Nesta seção calculamos o espectro de energia dos modos associados com a impureza. Aqui rotulamos a impureza por índice o e seus quatro primeiros vizinhos por $1-4$ (vide Fig.19). A única parte diferente de zero da matriz potencial é uma submatriz 5×5 correspondendo ao spin da impureza e seus vizinhos. O espectro dos modos localizados é, então, encontrado calculando numericamente as frequências que satisfazem a condição

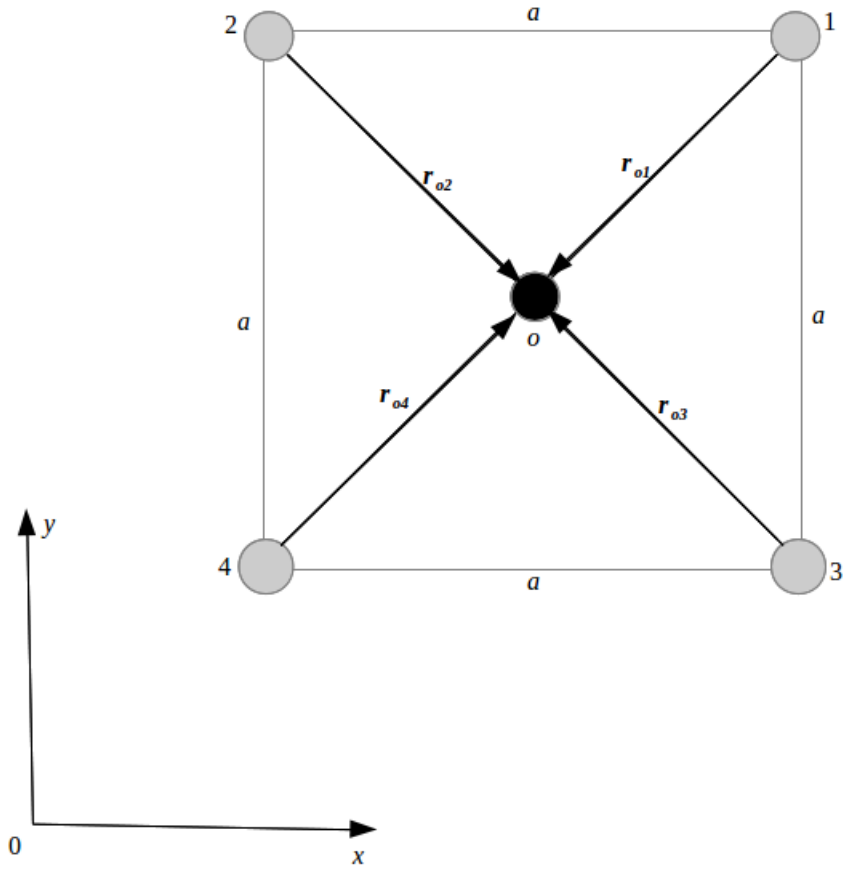

Figura 19: Impureza intersticial e seus quatro primeiro vizinhos num ferromagneto de rede quadrada infinita.

$$\det[\mathbf{I}-\mathbf{G}^0\mathbf{V}]=0, \tag{4.28}$$

onde

$$\mathbf{G}^0=\begin{bmatrix} G_{oo} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o1} \\ G_{o1} & G_{oo} & G_{12} & G_{12} & G_{14} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{oo} & G_{14} & G_{12} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{14} & G_{oo} & G_{12} \\ G_{o1} & G_{14} & G_{12} & G_{12} & G_{oo} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \rho & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha \\ -\lambda\alpha & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & 0 & \gamma \end{bmatrix}$$

Assim a (4.28) nos fornece

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = [D_p(\omega)]^2 D_d(\omega) D_s(\omega) = 0, \tag{4.29}$$

onde

$$D_p(\omega) = 1 - \gamma(G_{00} - G_{14}), \tag{4.30}$$

$$D_d(\omega) = 1 + \gamma(2G_{12} - G_{oo} - G_{14}) \tag{4.31}$$

e

$$\begin{aligned} D_s(\omega) &= [(\gamma\rho - 4(\lambda\alpha)^2)G_{oo} - \gamma]G_{14} \\ &+ [(2\gamma\rho - 8(\lambda\alpha)^2)G_{oo} - 2\gamma]G_{12} \\ &+ [16(\lambda\alpha)^2 - 4\gamma\rho]G_{o1}^2 + 8\lambda\alpha G_{o1} \\ &+ [\gamma\rho - 4(\lambda\alpha)^2]G_{oo}^2 - (\rho + \gamma)G_{oo} + 1 \end{aligned} \tag{4.32}$$

com $\rho = \beta + h'/JS$.

Os modos associados à impureza podem, agora, ser obtidos a partir das Eqs. 4.30, 4.31 e 4.32, encontrando os valores de ω para os quais $D_p(\omega)$, $D_d(\omega)$ ou $D_s(\omega)$ se anulam. Novamente, é útil distinguir entre modos de defeitos (ou não ressonantes), cujas energias podem estar abaixo do limite inferior (modos acústicos) ou acima do limite superior (modos ópticos) da banda de energia da onda de spin do material puro, e modos ressonantes, cujas energias estão dentro destes limites. Os valores desses limites de frequência, para o caso aqui estudado, variam de acordo com a equação $\omega(\lambda) = 5 \pm 4\lambda$ (em unidades de JS), obtida da Eq. 4.23, tomando os cossenos nos limites da primeira zona de Brillouin. Os sinais mais e menos se referem, respectivamente, aos limites superior e inferior da banda da onda de spin.

Primeiramente avaliamos as funções de Green G^0 que aparecem nas Eqs. (4.30-4.32). Estas funções são obtidas através da Eq. 4.24 e somando numericamente sobre o vetor de onda bidimensional $\mathbf{q}$. Aqui analisaremos somente os modos de defeitos (não ressonantes) para cujo caso, as funções de Green são todas quantidades reais. Em todos

os casos, consideramos os seguintes valores para os parâmetros h (campo aplicado), J (interação de troca) e S (número quântico de spin), referentes ao sistema puro: $h = J = S = 1, 0$.

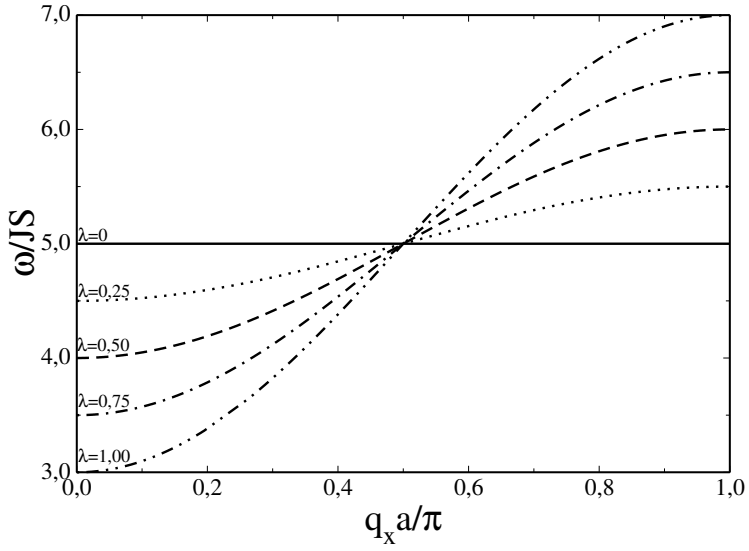

Figura 20: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ.

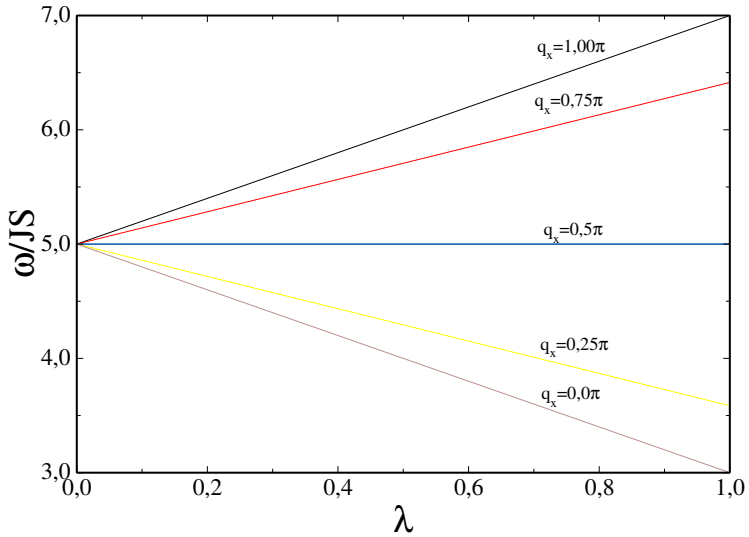

Figura 21: Frequências de ondas de spin em função de λ para diferentes valores de $q_x a/\pi$.

Na Fig.20, apresentamos a relação de dispersão de ondas de spin com vetor de onda $\mathbf{q} = q_x\hat{i} + q_y\hat{j}$ ($\hat{i}$ e $\hat{j}$ são vetores unitários nas direções x e y, respectivamente) em uma rede ferromagnética quadrada infinita. Os resultados para as frequências das ondas de spin são obtidos como uma função de $q_x a/\pi$ (constante de rede a) para diferentes valores de λ (veja a Eq. 4.23), onde fixamos o valor de q_y em $\pi/2a$. Podemos observar a variação nos limites inferior e superior da banda de ondas de spin, bem como sua dependência em λ . Por exemplo, para $\lambda = 0$, ou seja, no caso do Hamiltoniano de Ising, os limites inferior e superior da banda coincidem em $\omega = 5JS$. Já no caso em que $\lambda = 1$, Hamiltoniano

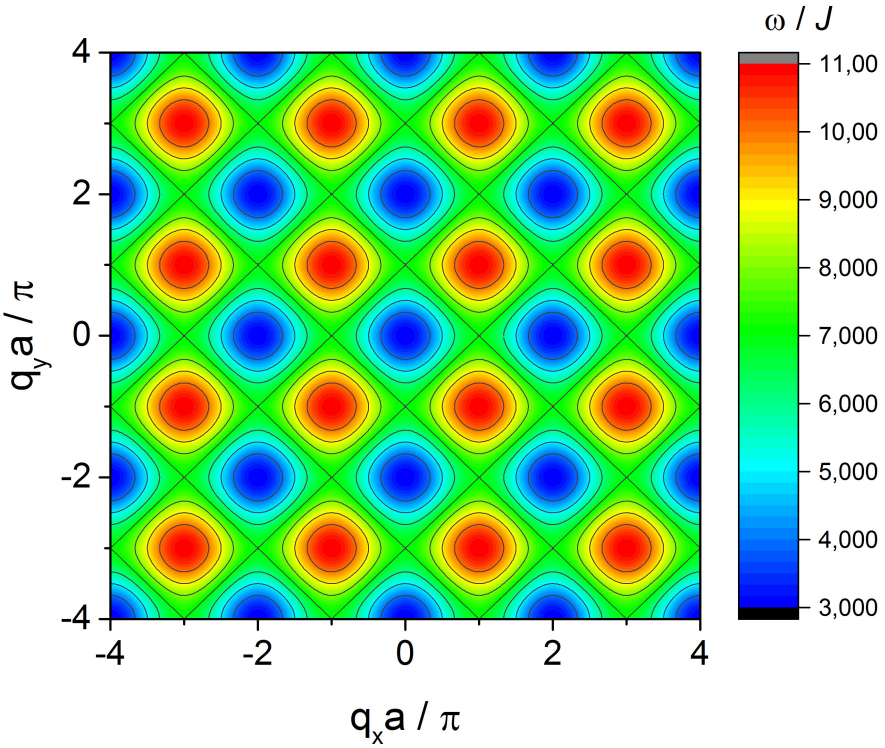

Figura 22: Gráfico do contorno para os efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre a frequência (energia) ω/J

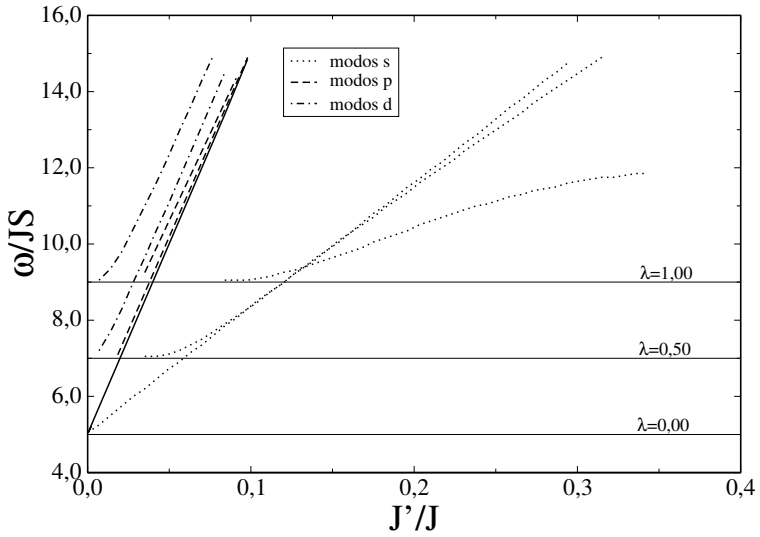

Figura 23: Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 1,0$ e alguns valores de λ. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita.

de Heisenberg, temos como limite inferior a frequência de $1,0JS$ e limite superior $9,0JS$, com a frequência variando com o cosseno, de acordo com a Eq. 4.23.

Na Fig. 21, apresentamos outra relação de dispersão para as ondas de spin. Neste caso, os resultados para as frequências dessas ondas são apresentados como uma função de λ para diferentes valores de $q_x a/\pi$ (valores indicados na figura), com q_y fixado em

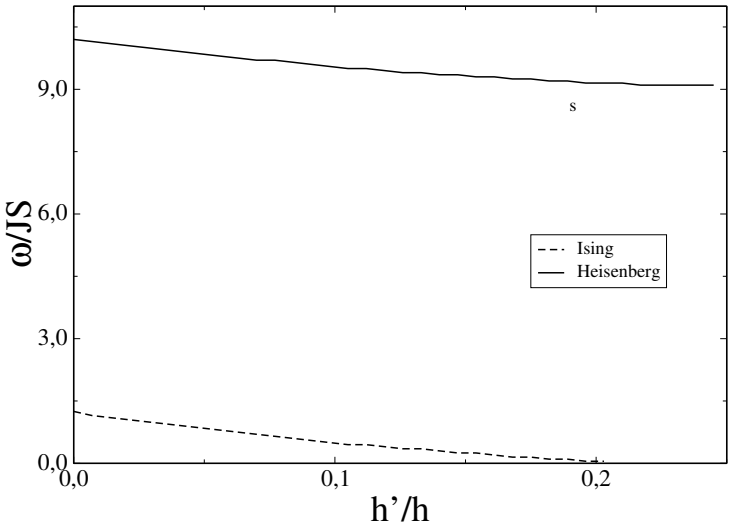

Figura 24: Frequências de ondas de spin como função de h'/h, para $J'/J = 0,2$, $S'/S = 1,0$ e $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita.

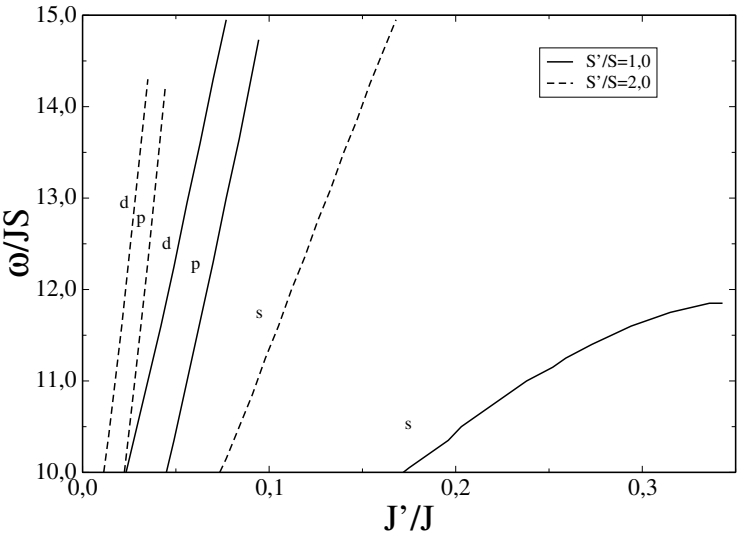

Figura 25: Frequências de ondas de spin como funcao de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita. Tomamos o valor $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg).

$\pi/2a$. Verificamos a dependência linear das frequências das ondas de spin em relaçao ao parâmetro λ (veja a Eq.4.23). Observamos que no caso no qual $q_x a/\pi = 0,5$ a frequência se mantêm constante ($\omega = 5JS$), com λ variando de 0 a 1. Para $q_x a/\pi < 0,5$ a frequência de ondas de spin decresce com λ, enquanto para $q_x a/\pi > 0,5$ frequência é crescente com λ.

A Fig. 22 mostra o contorno em cores para os diferentes efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre as frequências (energias) de excitação do ferromagneto puro de rede quadrada infinita. A figura implica que a frequência oscila periodicamente entre os valores mínimo e máximo a medida que q_x e q_y aumentam, o que já era de se

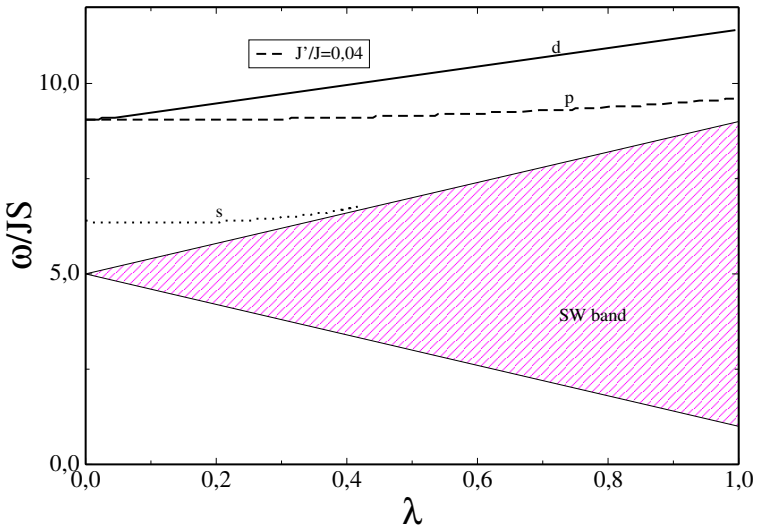

Figura 26: Frequências de ondas de spin como função de λ, para $h'/h = 2.0$, $S'/S = 1,0$ e $J'/J = 0,04$. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada infinita.

esperar, já que a frequência varia com as componentes do vetor de onda através da função cosseno (Eq. 4.23).

Na Fig. 23 mostramos o gráfico da frequência ω (energia) dos modos de defeito em função da interação de troca J'. Nesta figura, podemos distinguir com facilidade três tipos de modos: s (associados principalmente com a impureza), p e d (associados principalmente com os vizinhos da impureza). Os modos s (linha pontilhada), p (linha tracejada) e d (linha ponto-tracejada) são obtidos quando as Eqs. 4.32, 4.30 e 4.31 se anulam, respectivamente. Estamos considerando apenas os modos que ocorrem acima da banda de ondas de spin do material puro (modos ópticos), e vemos que eles crescem com o aumento da interação de troca. A separação entre estes modos aumenta a medida que λ aumenta, sendo máxima quando $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg), e diminui quando λ diminui. Para $\lambda = 0$ (modelo de Ising) os modos p e d apresentam-se degenerados, ou seja, eles se sobrepõem. Podemos também verificar que, a medida que λ diminui (de 1 para zero), os modos p e d sofrem um deslocamento para a direita, enquanto que os modos s sofrem um deslocamento para a esquerda. Os limites inferiores da banda de volume dependem do valor de λ e são indicados nos gráficos por linhas horizontais (para $\lambda = 0,5$, os limites são $3JS$ e $7JS$, respectivamente; para $\lambda = 1,00$, os limites são $1JS$ e $9JS$, respectivamente. Na Fig. 23 indicamos apenas os limites superiores.

Na Fig.24 apresentamos o gráfico da frequência ω (energia) em função do campo aplicado h' na impureza. Neste caso, tomamos os valores $J'/J = 0,2$ e $S'/S = 1,0$. Podemos ver que apenas os modos s aparecem. Nesta figura mostramos os dois casos: para $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg), que está indicado pela linha contínua, e para $\lambda = 0$

(modelo de Ising), que está indicado pela linha pontilhada. Podemos ver que, ao contrário do caso da Fig. 23, estes modos decrescem com o aumento da interação de troca.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, mostramos na Fig. 25 as frequências de ondas de spin versus interação de troca para dois valores diferentes de S'/S: $S'/S = 1,0$ (linha contínua), e $S'/S = 2,0$ (linha tracejada). Tomamos o valor fixo $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). Estamos considerando, novamente, apenas os modos acima da banda de volume do material puro (modos ópticos). Podemos observar que os modos localizados s, p e d se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'. A separaçao nas frequências desses modos aumenta a medida que S' cresce.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos de impureza em relação ao parâmetro λ, mostramos na Fig. 26 as frequências de ondas de spin versus λ. Obtemos os modos localizados s, p e d relativos à impureza intersticial para o valor $J' = 0,04J$. Neste caso, a banda de ondas de spin apresenta um $\Delta\omega$, cujos valores limites variam linearmente com λ, de acordo com as equações $\omega_S(\lambda) = 5 + 4\lambda$, para o limite superior (em unidades de JS) e $\omega_i(\lambda) = 5 - 4\lambda$, para o limite inferior. Como podemos observar, para $J' = 0,04J$, ocorrem os modos ópticos s, p e d. Essas observações estão em concordância com a Fig. 21. Nesta figura, podemos verificar com maior precisão o valor de λ para o qual ocorre a separação entre os modos p e d. Essa quebra de degenerescência ocorre para $\lambda \approx 0,03$.

5 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE QUADRADA CENTRADA INFINITA

5.1 Introdução

Nos anos recentes, estruturas magnéticas ultrafinas têm sido fabricadas e estudadas extensivamente, por meio da dinâmica de ondas de spin. Tais estruturas podem ter a presença de superfícies, de camadas de impurezas, impurezas localizadas, ou mesmo uma baixa concentração delas. Tudo isso modifica o espectro de excitações desse meio, assim é útil distinguir modos de ondas de spin que se propagam e modos de ondas de spin localizados. Na geometria de um filme, estes modos usualmente se referem a modos de volume (ou *bulk*) e modos de superfícies e/ou de defeito. Assim, novos estudos teóricos são necessários onde a presença de superfícies e de impurezas são importantes e onde os modos de ondas de spin localizados são considerados em detalhes.

Aqui investigaremos os modos localizados de ondas de spin associados com uma impureza magnética isolada, acrescentada intersticialmente em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Para isto, consideramos, novamente, o modelo de Heisenberg/Ising utilizado no capítulo anterior.

Usando a técnica de funções de Green [30], encontramos os modos localizados s, p e d, associados à impureza. Obtemos resultados numéricos para os modos de defeito localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza e sítios vizinhos, assim como o parâmetro λ.

5.2 Modelo e formalismo da função de Green

O sistema em estudo é uma rede quadrada centrada infinita (vide Fig.27) onde uma ipureza magnética, que interage ferromagneticamente com seus primeiros vizinhos, é acrescentada intersticialmente ao sistema. Analogamente à (4.10), O Hamiltoniano usado para descrever o sistema puro é dado por

$$H_0 = \sum_i \left[\left(S \sum_j J_{i,j} + h_i \right) b_i^\dagger b_i \right] - S \sum_{i,j} \lambda J_{i,j} b_i^\dagger b_j, \tag{5.1}$$

Novamente, para descrever o sistema impuro (vide Fig.28), reescrevemos o Hamiltoniano como $H = H_0 + H'$, onde H_0 é o Hamiltoniano para o sistema puro e H' é a perturbação devida a impureza, sendo dado pela (4.17), ou seja

$$H' = -JS \sum_d [\lambda\alpha(b_o b_d^\dagger + b_o^\dagger b_d) - \beta b_o^\dagger b_o - \gamma b_d^\dagger b_d] - h' b_o^\dagger b_o, \tag{5.2}$$

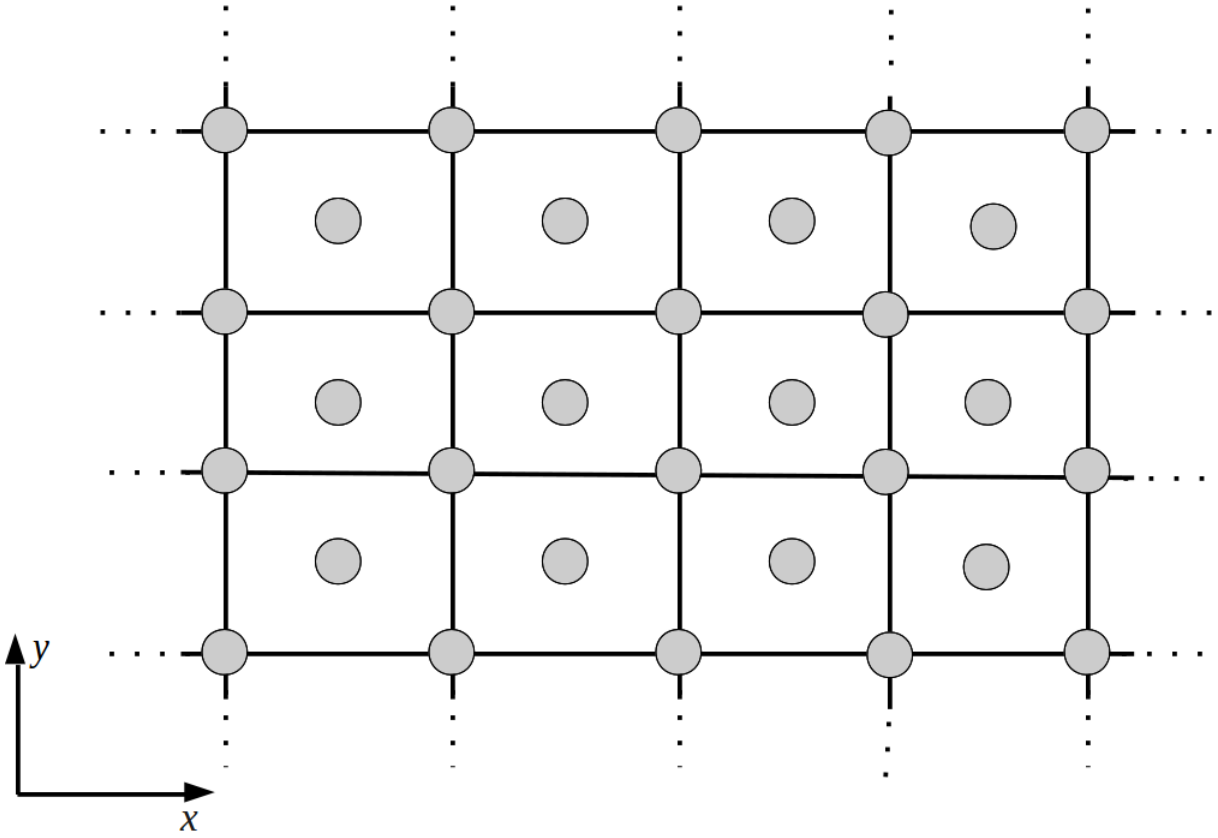

Figura 27: Ferromagneto de rede quadrada centrada infinita.

onde

$$\alpha = \frac{J'}{J}\sqrt{\frac{S'}{S}}, \beta = \frac{J'}{J}, \gamma = \frac{J'S'}{JS}. \tag{5.3}$$

onde o índice o rotula a impureza e o somatório em d se estende aos cinco primeiros vizinhos da impureza.

Agora consideremos novamente a equação de movimento da função de Green retardada (4.19)

$$\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[b_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{5.4}$$

Para o sistema puro, substituindo a (5.1) na (5.4), obtemos:

$$\omega G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h\right)G_{lm}^0(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj} G_{jm}^0(\omega), \tag{5.5}$$

onde $G_{lm}^0(\omega) = \langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ e $G_{jm}^0(\omega) = \langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$

Considerando a simetria de translação, introduzamos a transformada de Fourier $G_{\mathbf{q}}(\omega)$ da função de Green $G_{lm}(\omega)$, definida como

$$G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^0(\omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \Rightarrow$$

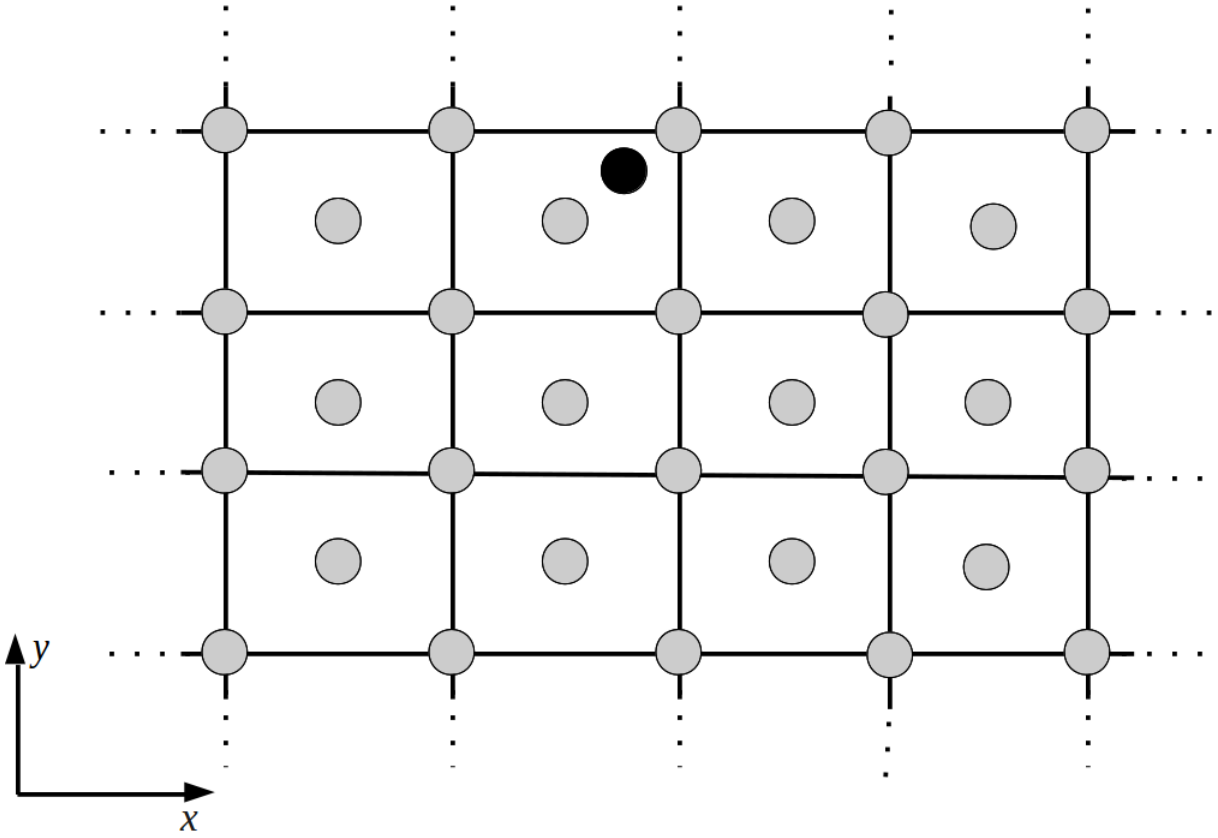

Figura 28: Ferromagneto de rede quadrada centrada infinita contendo uma impureza intersticial (círculo na cor preta).

$$G^0_{\mathbf{q}}(\omega) = \sum_{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m} G^0_{lm}(\omega) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \tag{5.6}$$

onde $\mathbf{r}_l$ e $\mathbf{r}_m$ são vetores bidimensionais que localizam os sítios na rede quadrada centrada infinita, $\mathbf{q} = q_x\hat{i} + q_y\hat{j}$ é um vetor de onda bidimensional ao longo do plano xy e N é o número total de sítios na rede. Assim, pelas (5.5) e (5.6), obtemos:

$$\begin{aligned} \omega G^0_{\mathbf{q}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h \right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega) \\ &- \left(S\sum_j \lambda J_{lj} e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} \right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega), \end{aligned}$$

onde (vide Fig.30)

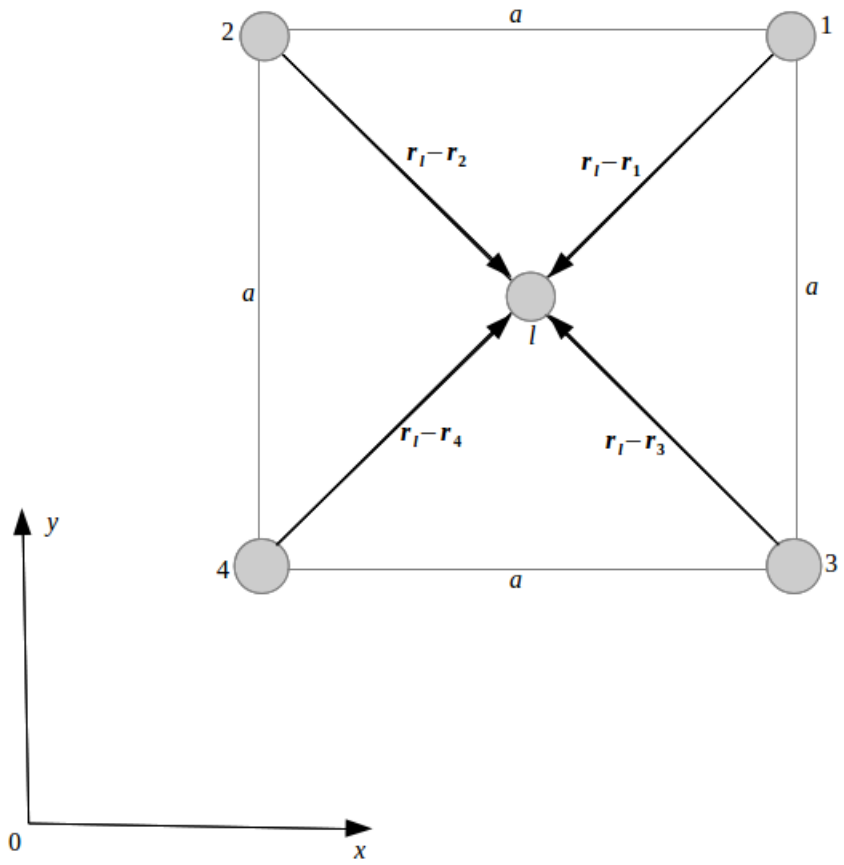

Figura 29: Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede quadrada centrada infinita, e seus quatro primeiro vizinhos.

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{4} J_{jl} e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} &= J_{l1} e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/2 - a\hat{j}/2)} + J_{l2} e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2 - a\hat{j}/2)} \\
&+ J_{l3} e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/+a\hat{j}/2)} + J_{l4} e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2 + a\hat{j}/2)} \\
&= J[e^{iq_x a/2 + iq_y a/2} + e^{-iq_x a/2 + iq_y a/2} \\
&+ e^{iq_x a/2 - iq_y a/2} + e^{-iq_x a/2 - iq_y a/2}] \\
&= 4J[\cos(q_x a/2)\cos(q_y a/2)] = 4J\gamma_2(\mathbf{q}),
\end{aligned}$$

onde $\gamma_2(\mathbf{q}) = \cos(q_x a/2)\cos(q_y a/2)$ é o fator de estrutura e consideramos que as interações de troca entre vizinhos são iguais. Assim obtemos a seguinte expressão para $G^0_{\mathbf{q}}(\omega)$:

$$G^0_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\omega - \omega(q,\lambda)}, \tag{5.7}$$

onde as frequências $\omega(q,\lambda)$ são dadas por

$$\omega(q,\lambda) = h + 4JS\left[1 - \lambda\gamma_2(\mathbf{q})\right], \tag{5.8}$$

Logo, através da (5.6), obtemos as funções de Green para o sistema puro, ou

seja,

$$G^0_{lm}(\omega) = \frac{1}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_m)}}{\omega-\omega(q,\lambda)}. \tag{5.9}$$

Consideremos agora o caso em que o sistema contém uma impureza localizada intersticialmente na rede quadrada centrada infinita (vide Fig. 17). A função de Green para este caso pode ser obtida pela substituição das (5.1) e (5.2) na (5.4), o que nos fornece a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm} &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(S\sum_j J_{lj} + h\right) G_{lm}(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj} G_{jm}(\omega) \\
&- JS\left\{\sum_d \lambda\alpha[G_{om}(\omega)\delta_{ld} + G_{dm}(\omega)\delta_{lo}]\right\} \\
&- JS\left\{\sum_d [\beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} + \gamma G_{dm}(\omega)\delta_{ld}]\right\} \\
&+ h' G_{om}(\omega)\delta_{lo}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

A equação (5.10) pode ser expressa matricialmente na forma de uma equação de Dyson, ou seja,

$$[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}]\mathbf{G} = \mathbf{G}^0, \tag{5.11}$$

onde $\mathbf{G}^0$ é a matriz função de Green para o sistema puro e $\mathbf{G}$, para o sistema impuro, cujos elementos são $2\pi JSG^0_{lm}(\omega)$ e $2\pi JSG_{lm}(\omega)$, respectivamente. A matriz $\mathbf{V}$ é o potencial efetivo devido a impureza, cujos elementos são

$$\begin{aligned}
V_{lj} &= \sum_d [(-\lambda\alpha)(\delta_{ld}\delta_{jo} + \delta_{lo}\delta_{jd}) - \beta\delta_{lo}\delta_{jo}] \\
&- \sum_d [\gamma\delta_{ld}\delta_{jd} - (h'/JS)\delta_{lo}\delta_{jo}]\,.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

5.3 Modos de impureza e resultados numéricos

Nesta seção calculamos o espectro de energia dos modos associados com a impureza. Aqui rotulamos a impureza por índice o e seus cinco primeiros vizinhos por $1-5$ (vide Fig.30). A única parte diferente de zero da matriz potencial é uma submatriz 6×6 correspondendo ao spin da impureza e seus vizinhos. O espectro dos modos localizados é, então, encontrado calculando numericamente as frequências que satisfazem a condição

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{5.13}$$

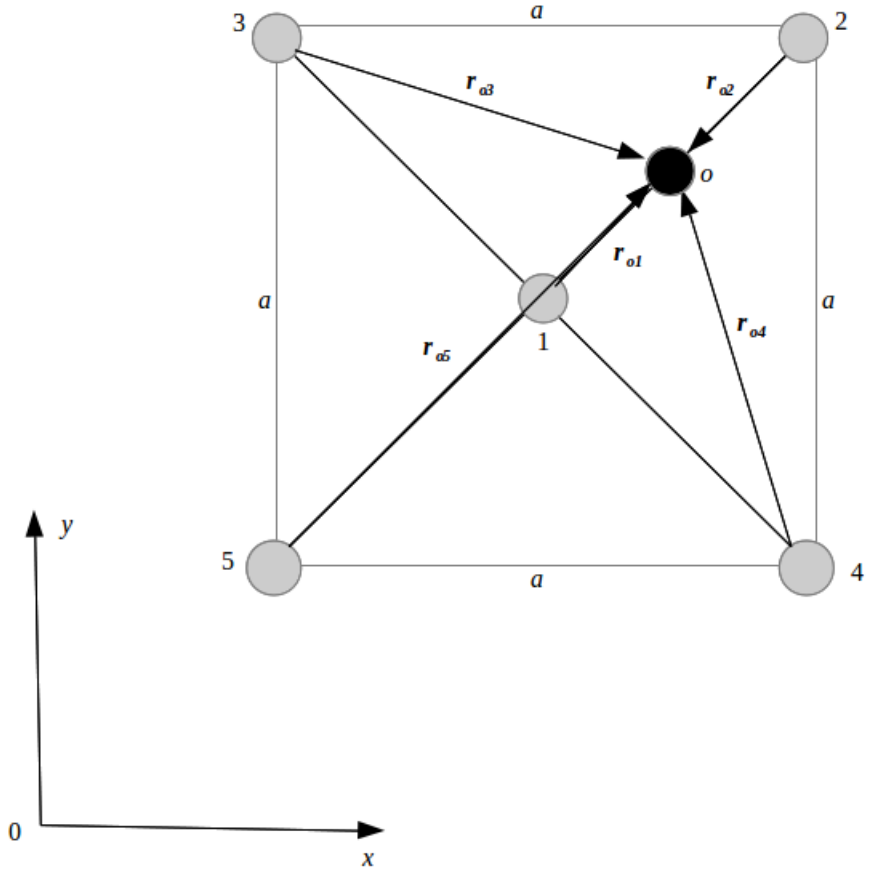

Figura 30: Impureza intersticial e seus cinco primeiro vizinhos, num ferromagneto de rede quadrada centrada infinita.

onde

$$\mathbf{G}^0 = \begin{bmatrix} G_{oo} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o3} & G_{o3} & G_{o5} \\ G_{o1} & G_{oo} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{oo} & G_{23} & G_{23} & G_{25} \\ G_{o3} & G_{12} & G_{23} & G_{oo} & G_{25} & G_{23} \\ G_{o3} & G_{12} & G_{23} & G_{25} & G_{oo} & G_{23} \\ G_{o5} & G_{12} & G_{25} & G_{23} & G_{23} & G_{oo} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \rho & -\lambda\alpha_{o1} & -\lambda\alpha_{o2} & -\lambda\alpha_{o3} & -\lambda\alpha_{o4} & \lambda\alpha_{o5} \\ -\lambda\alpha_{o1} & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha_{o2} & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha_{o3} & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha_{o4} & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ -\lambda\alpha_{o5} & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma \end{bmatrix}$$

onde $\rho = \beta + h'/JS$. Consideramos que as interações de troca entre a impureza e os vizinhos 1 e 2 são iguais a J'. Assim $\alpha_{o1} = \alpha_{o2} = \alpha = J'\sqrt{S'}/J\sqrt{S}$. Porém as interações entre a impureza e os demais vizinhos serão diferentes de J' pois as distâncias entre a

impureza e estes vizinhos são diferentes daquelas entre a impureza e os vizinhos 1 e 2. Consideramos então que a interação de troca dependa da distância da seguinte forma

$$J'_{oi} = \frac{|\mathbf{r}_{oi}|}{|\mathbf{r}_{o1}|} J', \tag{5.14}$$

onde $i = 1, 2, 3, 4$. Na Fig. 30 vemos que os vetores posição que localizam os sítios vizinhos relativamente à impureza são dados por:

$$\mathbf{r}_{o1} = \frac{a}{4}\hat{\mathbf{i}} + \frac{a}{4}\hat{\mathbf{j}}, \tag{5.15}$$

$$\mathbf{r}_{o2} = -\frac{a}{4}\hat{i} - \frac{a}{4}\hat{j}, \tag{5.16}$$

$$\mathbf{r}_{o3} = \frac{3a}{4}\hat{i} - \frac{a}{4}\hat{j}, \tag{5.17}$$

$$\mathbf{r}_{o4} = -\frac{a}{4}\hat{i} + \frac{3a}{4}\hat{j}, \tag{5.18}$$

$$\mathbf{r}_{o5} = \frac{3a}{4}\hat{i} + \frac{3a}{4}\hat{j}, \tag{5.19}$$

Assim teremos (vide Fig. 30)

$$\alpha_{o3} = \alpha_{o4} = \frac{|\mathbf{r}_{o3}|}{|\mathbf{r}_{o1}|}\alpha = \frac{a\sqrt{10}/4}{a\sqrt{2}/4} = \sqrt{5}\alpha \tag{5.20}$$

e

$$\alpha_{o5} = \frac{|\mathbf{r}_{o5}|}{|\mathbf{r}_{o1}|}\alpha = \frac{3a\sqrt{2}/4}{a\sqrt{2}/4} = 3\alpha. \tag{5.21}$$

Os modos associados à impureza podem, agora, ser obtidos a partir da Eq. 4.28, ou seja,

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{5.22}$$

encontrando os valores de ω que satisfazem esta equação. Consideraremos apenas os modos acima da banda de volume do material puro (modos ópticos). Os valores dos limites de frequência desta banda, para o caso aqui estudado, variam de acordo com a equação $\omega(\lambda) = 5 \pm 4\lambda$ (em unidades de JS), obtida da Eq. 5.8, tomando os cossenos nos limites da primeira zona de Brillouin. Os sinais mais e menos se referem, respectivamente, aos limites superior e inferior da banda da onda de spin. Para todos os casos utilizamos os seguintes: $h = J = S = 1$.

Nas Figs. 31 e 32 , apresentamos a relação de dispersão de ondas de spin com vetor de onda $\mathbf{q} = q\hat{\mathbf{i}} + q\hat{\mathbf{j}}$ ($\hat{\mathbf{i}}$ e $\hat{\mathbf{j}}$ são vetores unitários nas direções x e y, respectivamente) em

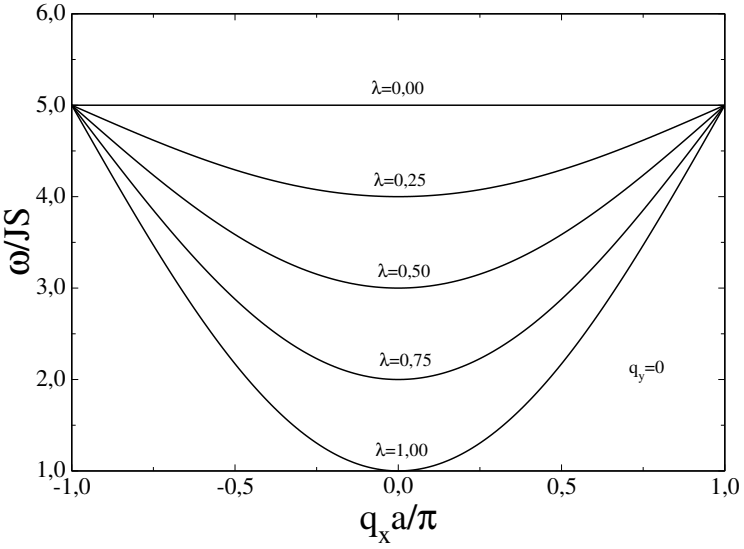

Figura 31: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ. Tomamos o valor fixo $q_y = 0$.

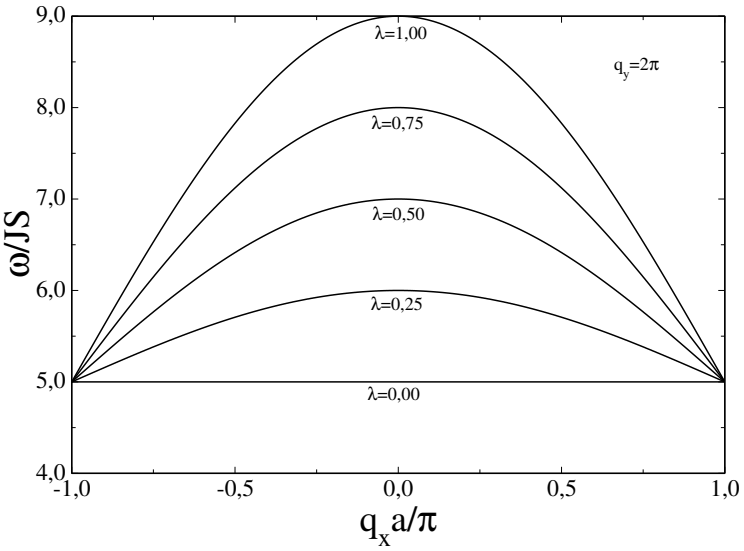

Figura 32: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ. Tomamos o valor $q_y = 2\pi$.

uma rede ferromagnética quadrada centrada infinita. Os resultados para as frequências das ondas de spin são obtidos como uma funçao de $q_x a/\pi$ (constante de rede a) para diferentes valores de λ (veja a Eq.5.8), onde fixamos o valores de $q_y = 0$, na Fig. 31, e $q_y = 2\pi$, na Fig.32. Nestas figuras, também estão indicados, por linhas horizontais, os limites inferior e superior da banda de ondas de spin do material puro, para cada valor de λ.

Na Fig.33 mostramos o gráfico da frequência ω em função da interação de troca J', para dois tipos de modos localizados: p (linha pontilhada) e d (linha tracejada), associados a uma impureza magnética acrescentada intersticialmente ao ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Estes modos, como já foi mencionado antes, estão

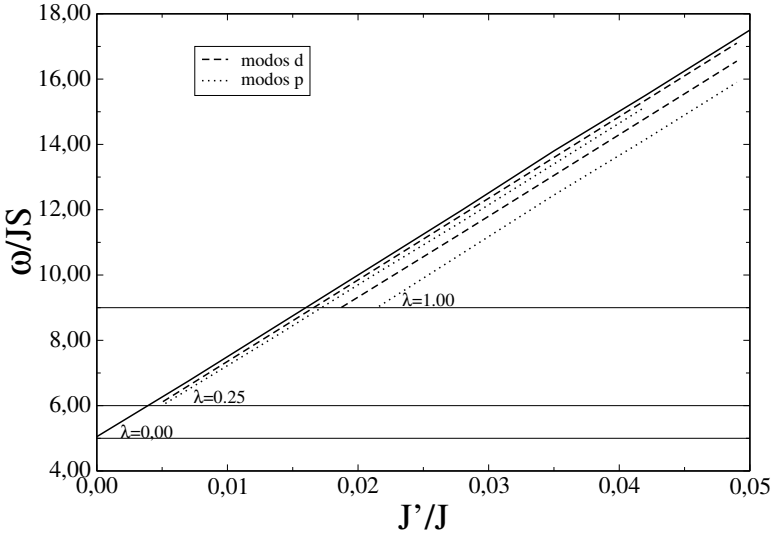

Figura 33: Frequências de ondas de spin como funçãoo de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e alguns valores de λ. Modos localizados p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita.

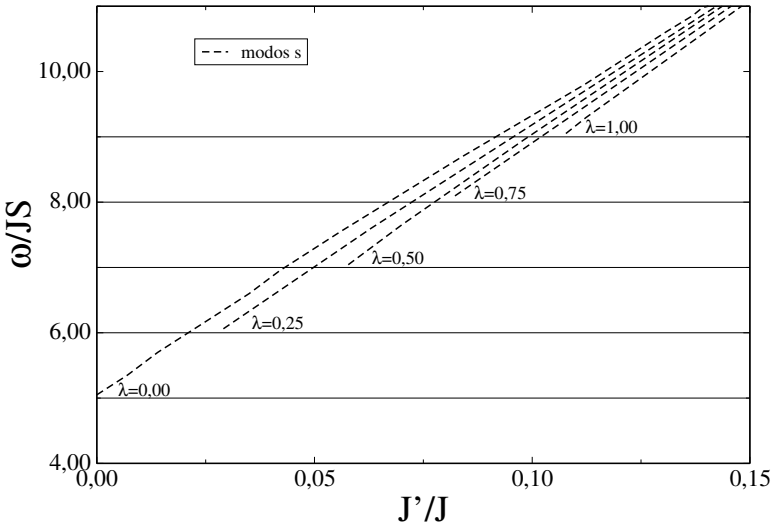

Figura 34: Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e alguns valores de λ. Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita.

associados principalmente com os vizinhos da impureza. Consideramos apenas os modos que ocorrem acima da banda de volume do material puro (modos ópticos). Neste caso, podemos notar que eles crescem com o aumento da interação de troca. A separação entre estes modos aumenta a medida que λ aumenta, sendo máxima quando $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg), e diminui quando λ diminui. Para $\lambda = 0$ (modelo de Ising) os modos p e d apresentam-se degenerados, ou seja, eles se sobrepõem. Podemos também verificar que, com o aumento de λ, modos do mesmo tipo sofrem um deslocamento para a direita. Os limites da banda de volume dependem do valor de λ e são indicados nos gráficos por linhas horizontais. Nas Figs. 33 e 34 indicamos apenas os limites superiores da banda.

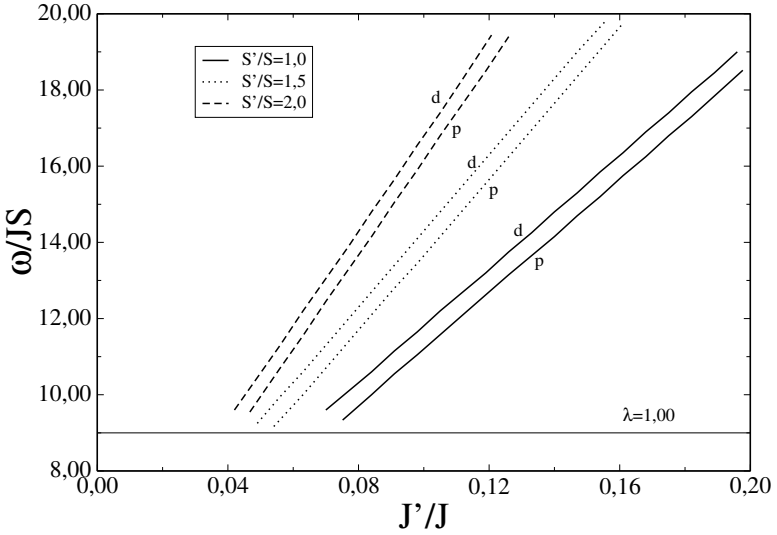

Figura 35: Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Tomamos o valor fixo $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg).

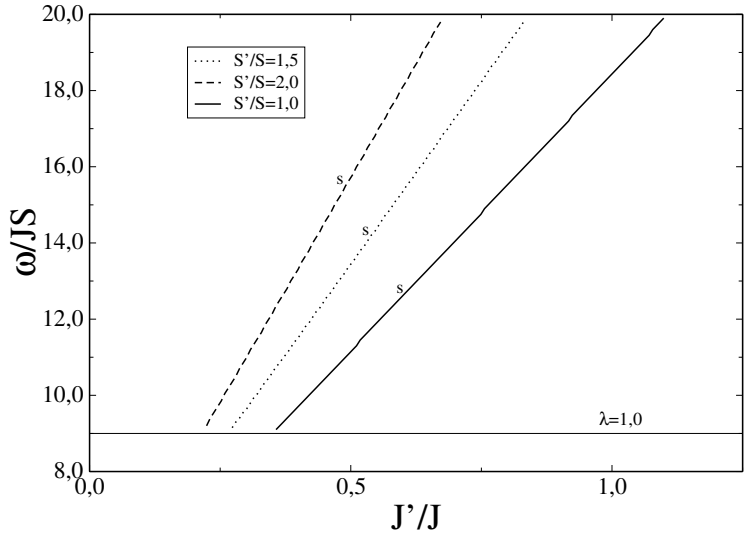

Figura 36: Frequências de ondas de spin como função de J'/J, para $h'/h = 2,0$ e diferentes valores de S'. Modos localizados s relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Tomamos o valor $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg).

Por conveniência, os modos s são mostrados separadamente na Fig. 34. Como já vimos antes, estes modos estão associados principalmente com a impureza. Aqui, notamos também que eles crescem com o aumento de J'. Os modos s sofrem um deslocamento para a direita, a medida que λ aumenta e crescem com o aumento de J'.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, mostramos na Fig. 35 as frequências de ondas de spin versus interação de troca para alguns valores de S': $S'/S = 1,0$ (linha contínua), $S'/S = 1,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 2,0$ (linha

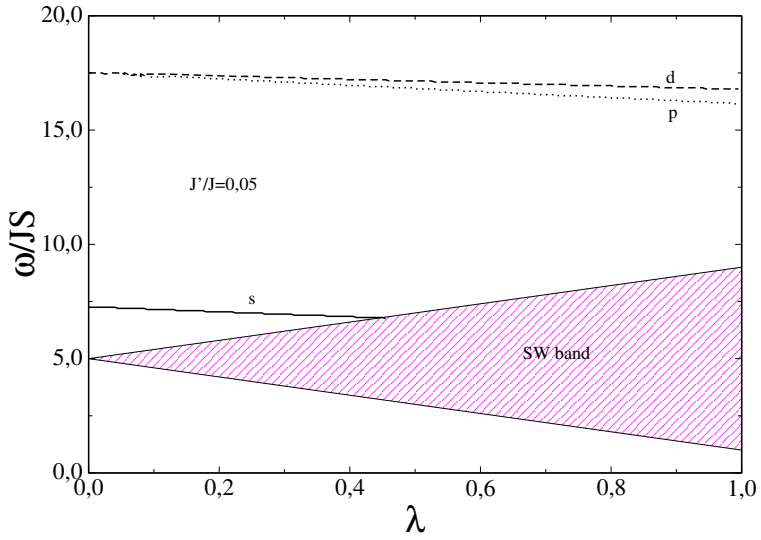

Figura 37: Frequências de ondas de spin como função de λ, para $h'/h = 2,0$, $S'/S = 2,5$ e o valor de $J'/J = 0,05$. Modos localizados s, p e d relativos a uma impureza em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita.

tracejada). Tomamos o valor fixo $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg). Podemos observar que estes modos se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'. A separação desses modos aumenta a medida que S' cresce.

O caso análogo da Fig. 35, para os modos s, é mostrado nas Fig. 36. Podemos notar que estes modos (ópticos) se deslocam para a esquerda, a medida que S' aumenta.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos de impureza em relação ao parâmetro λ, mostramos na Fig. 37 as frequências de ondas de spin versus λ. Obtemos os modos localizados s, p e d para o valor $J' = 0,05J$. Neste caso, a banda de volume apresenta um $\Delta\omega$, cujos valores limites variam linearmente com λ, de acordo com as equações $\omega_S(\lambda) = 5 + 4\lambda$, para o limite superior (em unidades de JS) e $\omega_i(\lambda) = 5 - 4\lambda$, para o limite inferior. Na Fig. 37 podemos verificar, com maior precisão, o valor de λ para o qual ocorre a separação entre os modos p e d. Essa quebra de degenerescência ocorre para $\lambda \approx 0,01$.

6 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE CÚBICA DE CORPO CENTRADO INFINITA

6.1 Introdução

Nos anos recentes, estruturas magnéticas ultrafinas têm sido fabricadas e estudadas extensivamente, por meio da dinâmica de ondas de spin. Tais estruturas podem ter a presença de superfícies, de camadas de impurezas, impurezas localizadas, ou mesmo uma baixa concentração delas. Tudo isso modifica o espectro de excitações desse meio, assim é útil distinguir modos de ondas de spin que se propagam e modos de ondas de spin localizados. Na geometria de um filme, estes modos usualmente se referem a modos de volume (ou *bulk*) e modos de superfícies e/ou de defeito. Assim, novos estudos teóricos são necessários onde a presença de superfícies e de impurezas são importantes e onde os modos de ondas de spin localizados são considerados em detalhes.

Aqui investigaremos os modos localizados de ondas de spin associados com uma impureza intersticial magnética isolada, em uma rede cúbica de corpo centrado infinita. Para isto, consideramos, novamente, o modelo de Heisenberg/Ising dos capítulos anteriores.

Usando a técnica de funções de Green [30] encontramos os modos localizados s, p e d associados ao sistema impuro. Obtemos resultados numéricos para os modos de defeito localizados como função do parâmetro de troca entre a impureza e sítios vizinhos, assim como o parâmetro λ.

6.2 Modelo e formalismo da função de Green

O sistema em estudo é uma rede cúbica de corpo centrado infinita (vide Fig. 38) onde uma ipureza intersticial, que interage ferromagneticamente ou antiferromagneticamente com seus primeiros vizinhos, é acrescentada. Analogamente à (5.1) o hamiltoniano usado para descrever o sistema puro é dado por

$$H_0 = \sum_i \left[\left(S \sum_j J_{i,j} + h_i \right) b_i^\dagger b_i \right] - S \sum_{i,j} \lambda J_{i,j} b_i^\dagger b_j, \tag{6.1}$$

Por conveniência, para descrever o sistema impuro (vide Fig. 39), reescrevemos o Hamiltoniano como $H = H_0 + H'$, onde H_0 é o Hamiltoniano para o sistema puro e H' é a perturbação devida a impureza, sendo dado pela (5.2), ou seja,

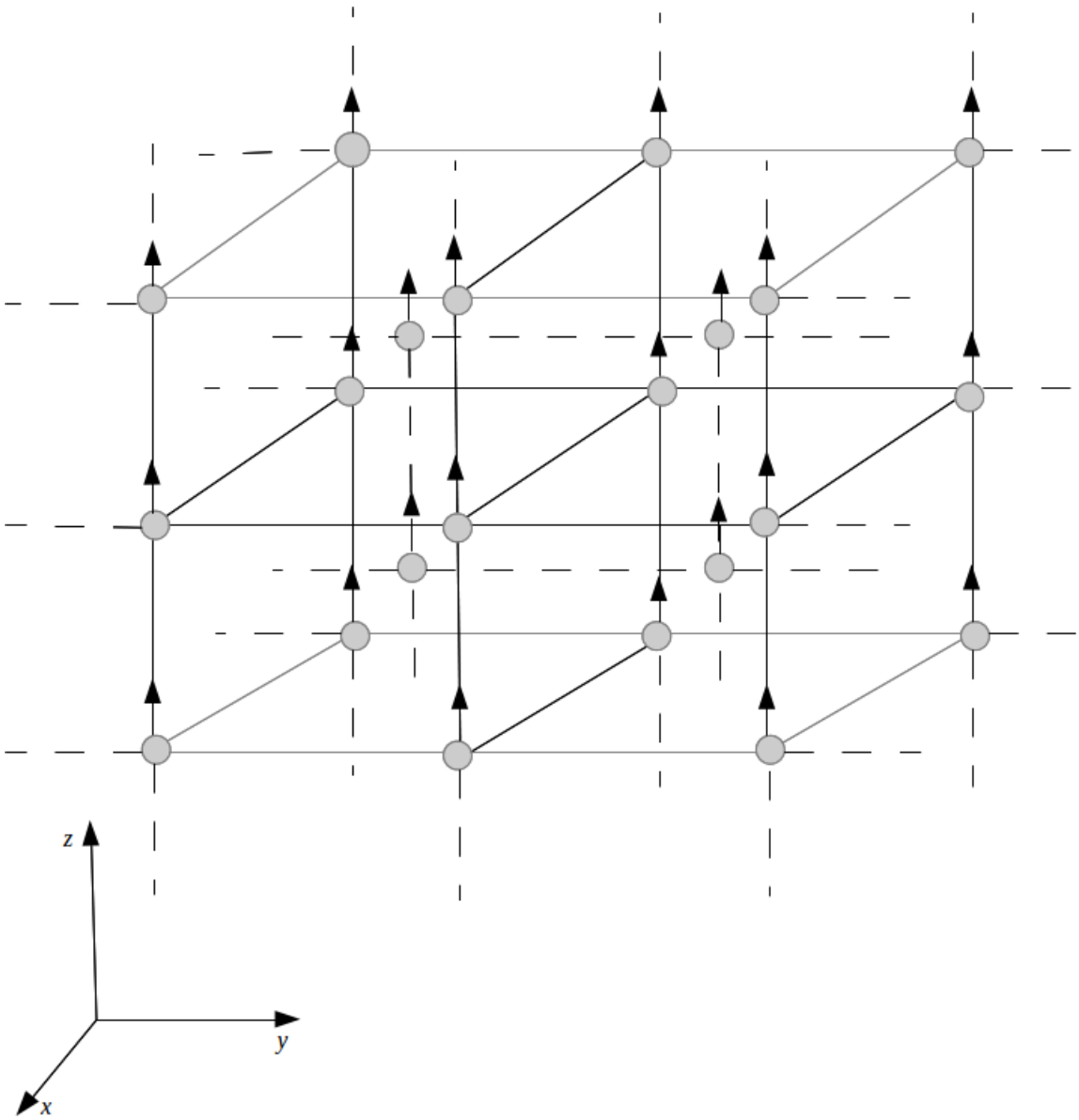

Figura 38: Ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita.

$$H' = -JS\sum_{d}[\lambda\alpha(b_o b_d^\dagger + b_o^\dagger b_d) - \beta b_o^\dagger b_o - \gamma b_d^\dagger b_d] - h' b_o^\dagger b_o, \tag{6.2}$$

onde definimos as seguintes quantidades

$$\alpha = \frac{J'}{J}\sqrt{\frac{S'}{S}}, \beta = \frac{J'}{J}, \gamma = \frac{J'S'}{JS}. \tag{6.3}$$

onde o índice o rotula a impureza e o somatório em d se estende aos oito primeiros vizinhos da impureza.

Agora consideremos novamente a equação de movimento da função de Green retardada (5.4)

$$\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[b_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{6.4}$$

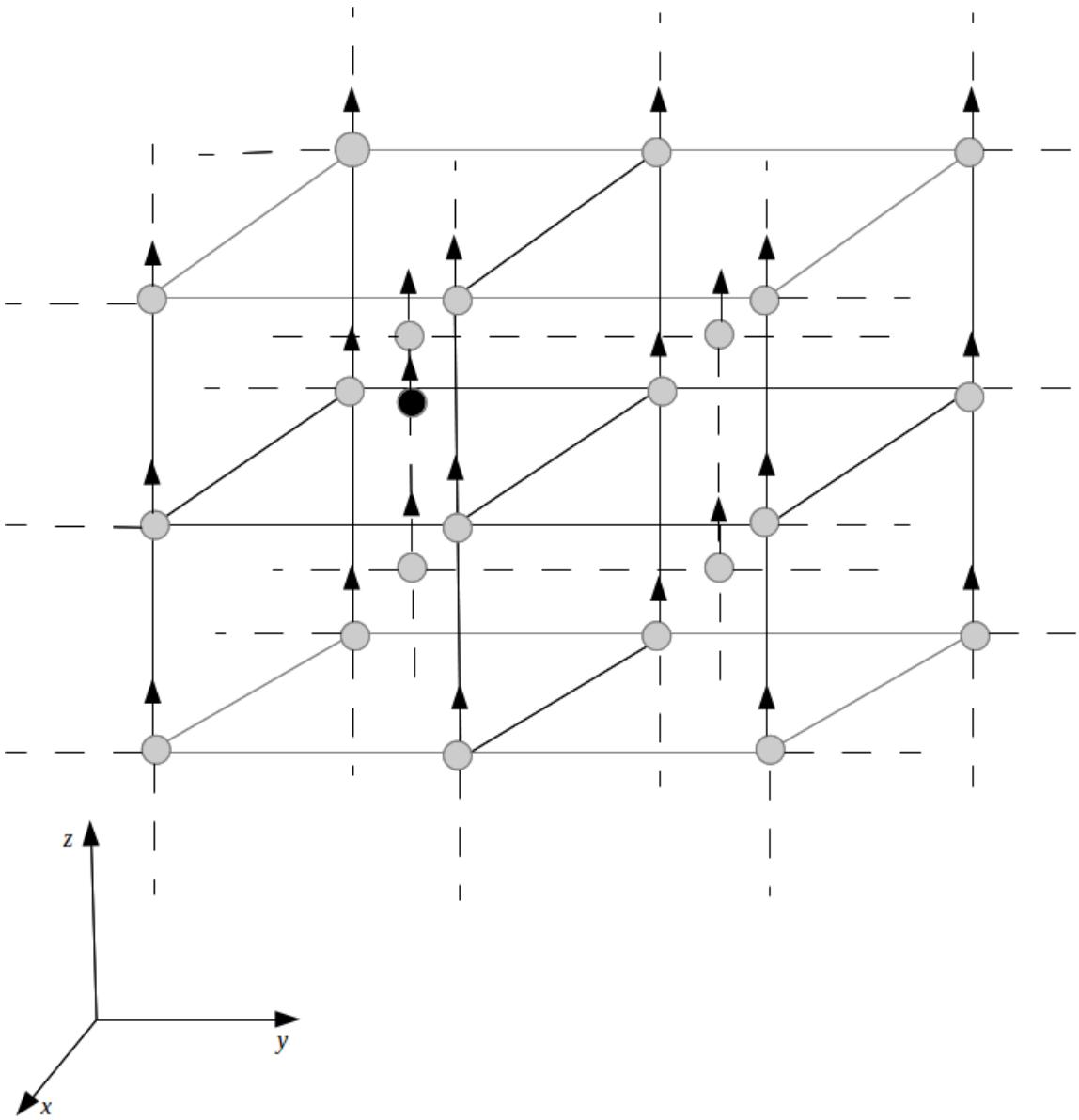

Figura 39: Ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita contendo uma impureza intersticial (círculo na cor preta).

Para o sistema puro, substituindo a (6.1) na (6.4), obtemos:

$$\omega G^0_{lm}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h \right) G^0_{lm}(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj} G^0_{jm}(\omega), \tag{6.5}$$

onde $G^0_{lm}(\omega) = \langle\langle b_l; b^\dagger_m \rangle\rangle_\omega$ e $G^0_{jm}(\omega) = \langle\langle b_j; b^\dagger_m \rangle\rangle_\omega$

Considerando a simetria de translação, introduzamos a transformada de Fourier $G_{\mathbf{q}}(\omega)$ da função de Green $G_{lm}(\omega)$, definida como

$$G^0_{lm}(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} G^0_{\mathbf{q}}(\omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \Rightarrow$$

$$G^0_{\mathbf{q}}(\omega) = \sum_{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m} G^0_{lm}(\omega) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \tag{6.6}$$

onde $\mathbf{r}_l$ e $\mathbf{r}_m$ são vetores tridimensionais que localizam os sítios na rede cúbica de corpo centrado infinita, $\mathbf{q} = q_x\hat{i} + q_y\hat{j} + q_z\hat{k}$ é um vetor de onda tridimensional ao longo das direções x, y e z e N é o número total de sítios na rede. Assim, pelas (6.5) e (6.6), obtemos:

$$\begin{aligned} \omega G^0_{\mathbf{q}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(s\sum_j J_{lj} + h \right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega) \\ &- \left(S\sum_j \lambda J_{lj} e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} \right) G^0_{\mathbf{q}}(\omega), \end{aligned}$$

onde (vide Fig.40)

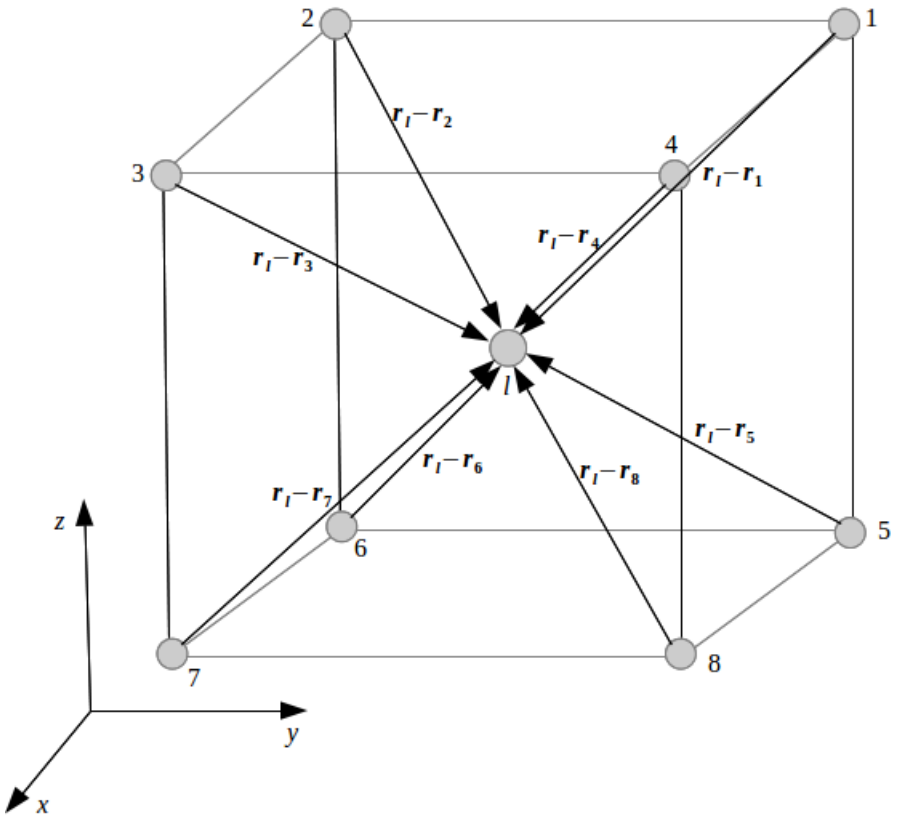

Figura 40: Um sítio qualquer l, num ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita, e seus oito primeiro vizinhos.

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{8} J_{jl}e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_j)} &= J_{l1}e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2-a\hat{j}/2-a\hat{k}/2)} + J_{l2}e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2+a\hat{j}/2-a\hat{k}/2)} \\ &+ J_{l3}e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/2+a\hat{j}/2-a\hat{k}/2)} + J_{l4}e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/2-a\hat{j}/2-a\hat{k}/2)} \\ &+ J_{l5}e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2-a\hat{j}/2+a\hat{k}/2)} + J_{l6}e^{-\mathbf{q}\cdot(a\hat{i}/2+a\hat{j}/2+a\hat{k}/2)} \\ &+ J_{l7}e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/2+a\hat{j}/2+a\hat{k}/2)} + J_{l8}e^{-\mathbf{q}\cdot(-a\hat{i}/2-a\hat{j}/2+a\hat{k}/2)} \\ &= 8J\gamma_3(\mathbf{q}),\end{aligned}$$

onde $\gamma_3(\mathbf{q}) = \cos(q_x a/2)\cos(q_y a/2)\cos(q_z a/2)$ é o fator de estrutura. Consideramos que a interação de troca J é a mesma para quaisquer dois primeiros vizinhos. Assim obtemos a seguinte expressão para $G^0_{\mathbf{q}}(\omega)$,

$$G^0_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\omega - \omega(q,\lambda)}, \tag{6.7}$$

onde as frequências $\omega(q,\lambda)$ são dadas por

$$\omega(q,\lambda) = h + 8JS[1 - \lambda\gamma_3(\mathbf{q})]. \tag{6.8}$$

Assim, a (6.6) torna-se

$$G^0_{lm}(\omega) = \frac{1}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}}\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_m)}}{\omega - \omega(q,\lambda)}. \tag{6.9}$$

Consideremos agora o caso em que o sistema contém uma impureza localizada intersticialmente na rede cúbica de corpo centrado infinita (vide Fig.39). A função de Green para este caso pode ser construída pela substituição das (6.1) e (6.2) na (6.4), o que nos fornece a expressão

$$\begin{aligned}\omega G_{lm} &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \left(S\sum_j J_{lj} + h\right)G_{lm}(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj}G_{jm}(\omega) \\ &- JS\left\{\sum_d \lambda\alpha[G_{om}(\omega)\delta_{ld} + G_{dm}(\omega)\delta_{lo}]\right\} \\ &- JS\left\{\sum_d [\beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} + \gamma G_{dm}(\omega)\delta_{ld}]\right\} \\ &+ h' G_{om}(\omega)\delta_{lo}.\end{aligned} \tag{6.10}$$

A equação (6.9) pode ser expressa matricialmente na forma de uma equação de Dyson, ou seja,

$$[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}]\mathbf{G} = \mathbf{G}^0, \tag{6.11}$$

onde $\mathbf{G}^0$ é a matriz função de Green para o sistema puro e $\mathbf{G}$, para o sistema impuro, cujos

elementos são $2\pi JSG^0_{lm}(\omega)$ e $2\pi JSG_{lm}(\omega)$, respectivamente. A matriz $\mathbf{V}$ é o potencial efetivo devido a impureza, cujos elementos são

$$\begin{aligned} V_{lj} &= \sum_d [-\lambda\alpha(\delta_{ld}\delta_{jo} + \delta_{lo}\delta_{jd}) - \beta\delta_{lo}\delta_{jo} \\ &- \gamma\delta_{ld}\delta_{jd} - h'\delta_{lo}\delta_{jo}/JS]. \end{aligned} \tag{6.12}$$

6.3 Modos de impureza e resultados numéricos

Nesta seção calculamos o espectro de energia dos modos associados com a impureza. Aqui rotulamos a impureza por índice o e seus nove primeiros vizinhos, por $1-9$ (vide Fig.41). A única parte diferente de zero da matriz potencial é uma submatriz 10×10 correspondendo ao spin da impureza e seus vizinhos. O espectro dos modos localizados é, então, encontrado calculando numericamente as frequências que satisfazem a condição

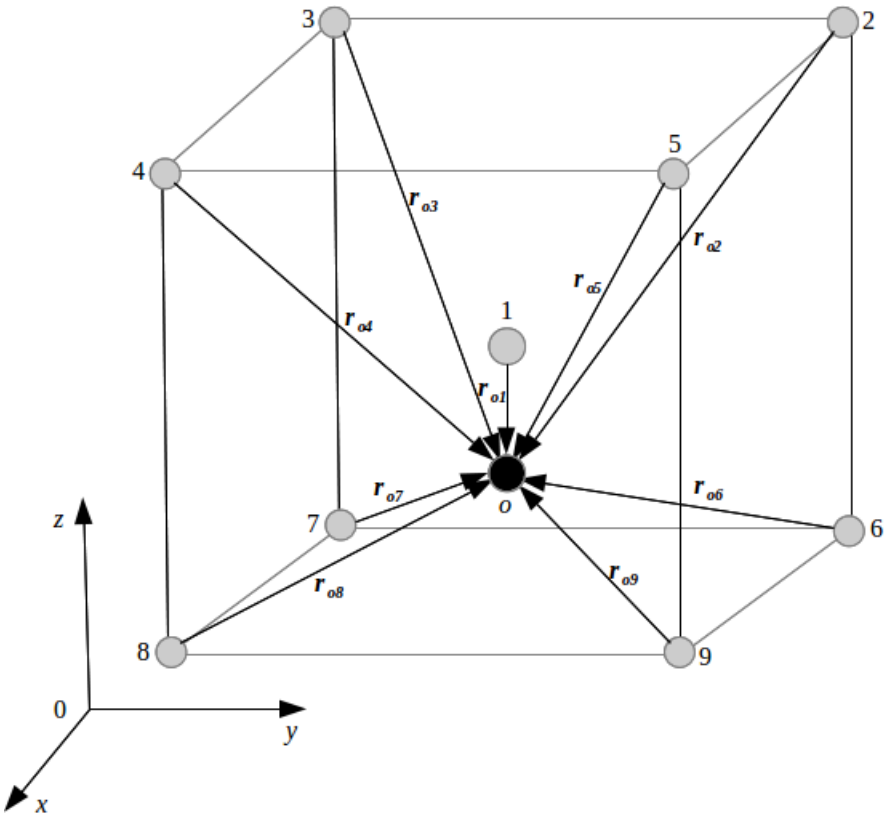

Figura 41: Impureza intersticial (círculo na cor preta) e seus nove primeiros vizinhos, num ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita.

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{6.13}$$

onde

$$\mathbf{G}^0 = \begin{bmatrix} G_{oo} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o6} & G_{o6} & G_{o6} & G_{o6} \\ G_{o1} & G_{oo} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} & G_{12} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{oo} & G_{23} & G_{23} & G_{25} & G_{23} & G_{24} & G_{28} & G_{24} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{23} & G_{oo} & G_{23} & G_{24} & G_{24} & G_{23} & G_{24} & G_{28} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{24} & G_{23} & G_{oo} & G_{23} & G_{28} & G_{24} & G_{23} & G_{24} \\ G_{o1} & G_{12} & G_{23} & G_{24} & G_{23} & G_{oo} & G_{24} & G_{28} & G_{24} & G_{23} \\ G_{o6} & G_{12} & G_{23} & G_{24} & G_{28} & G_{24} & G_{oo} & G_{23} & G_{24} & G_{23} \\ G_{o6} & G_{12} & G_{24} & G_{23} & G_{24} & G_{28} & G_{23} & G_{oo} & G_{23} & G_{24} \\ G_{o6} & G_{12} & G_{28} & G_{24} & G_{23} & G_{24} & G_{24} & G_{23} & G_{oo} & G_{23} \\ G_{o6} & G_{12} & G_{24} & G_{28} & G_{24} & G_{23} & G_{23} & G_{24} & G_{23} & G_{oo} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{V} = -\lambda \begin{bmatrix} -\frac{\rho}{\lambda} & \alpha_{o1} & \alpha_{o2} & \alpha_{o3} & \alpha_{o4} & \alpha_{o5} & \alpha_{o6} & \alpha_{o7} & \alpha_{o8} & \alpha_{o9} \\ \alpha_{o1} & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{o2} & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & & & & \\ \alpha_{o3} & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{o4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{o5} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{o6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{o7} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 & 0 \\ \alpha_{o8} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} & 0 \\ \alpha_{o9} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{\lambda} \end{bmatrix}$$

com $\rho = \beta + h'/JS$. Consideramos que a interação de troca entre a impureza e o vizinho 1 é igual a J'. Assim $\alpha_{o1} = \alpha = J'\sqrt{S'}/J\sqrt{S}$. Porém, as interações entre a impureza e os demais vizinhos serão diferentes de J', pois as distâncias entre a impureza e estes vizinhos são diferentes daquelas entre a impureza e o vizinho 1. Consideramos então que a interação de troca dependa da distância da seguinte forma

$$J'_{oi} = \frac{|\mathbf{r}_{oi}|}{|\mathbf{r}_{o1}|} J', \tag{6.14}$$

onde $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. Na Fig. 41 vemos que os vetores posição que localizam os sítios vizinhos relativamente à impureza são dados por:

$$\mathbf{r}_{o1} = \frac{a}{4}\hat{k}, \tag{6.15}$$

$$\mathbf{r}_{o2} = \frac{a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} - \frac{3a}{4}\hat{k}, \tag{6.16}$$

$$\mathbf{r}_{o3} = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} - \frac{3a}{4}\hat{k}, \tag{6.17}$$

$$\mathbf{r}_{o4} = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} - \frac{3a}{4}\hat{k}, \tag{6.18}$$

$$\mathbf{r}_{o5} = -\frac{a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} - \frac{3a}{4}\hat{k}, \tag{6.19}$$

$$\mathbf{r}_{o6} = \frac{a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} + \frac{a}{4}\hat{k}, \tag{6.20}$$

$$\mathbf{r}_{o7} = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} + \frac{a}{4}\hat{k}, \tag{6.21}$$

$$\mathbf{r}_{o8} = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} + \frac{a}{4}\hat{k}, \tag{6.22}$$

$$\mathbf{r}_{o9} = -\frac{a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} + \frac{a}{4}\hat{k}, \tag{6.23}$$

Assim teremos (vide Fig.41)

$$\alpha_{o2} = \alpha_{o3} = \alpha_{o4} = \alpha_{o5} = \frac{|\mathbf{r}_{o2}|}{|\mathbf{r}_{o1}|}\alpha = \frac{a\sqrt{1/4 + 1/4 + 9/16}}{a/4} = \sqrt{17}\alpha \tag{6.24}$$

e

$$\alpha_{o6} = \alpha_{o7} = \alpha_{o8} = \alpha_{o9} = \frac{|\mathbf{r}_{o6}|}{|\mathbf{r}_{o1}|}\alpha = \frac{3a\sqrt{1/4 + 1/4 + 9/16}}{a/4} = 3\alpha \tag{6.25}$$

Os modos associados à impureza podem, agora, ser obtidos a partir da Eq. (4.28), ou seja,

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{6.26}$$

encontrando os valores de ω que satisfazem esta equação.

Nas Figs. 42 e 43 , apresentamos a relação de dispersão de ondas de spin com vetor de onda $\mathbf{q} = q\hat{i} + q\hat{j} + q\hat{z}$ ($\hat{i}$, $\hat{j}$ e $\hat{z}$ são vetores unitários nas direções x, y e z, respectivamente) em um ferromagneto infinito de rede cúbica de corpo centrado. Os resultados para as frequências das ondas de spin são obtidos como uma função de $q_x a/\pi$ (constante de rede a) para diferentes valores de λ (veja a Eq. 6.8), onde fixamos os valores de $q_y = 0$ e $q_z = 2\pi$, na Fig. 42, e $q_y = q_z = 2\pi$, na Fig. 43. Nestas figuras vemos que no limite em que $\lambda = 0$ (modelo de Ising) não há dispersão e para o limite em que $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg), a dispersão é máxima. Em todos os casos, consideramos os seguintes valores para os parâmetros h (campo aplicado), J (interação de troca) e S

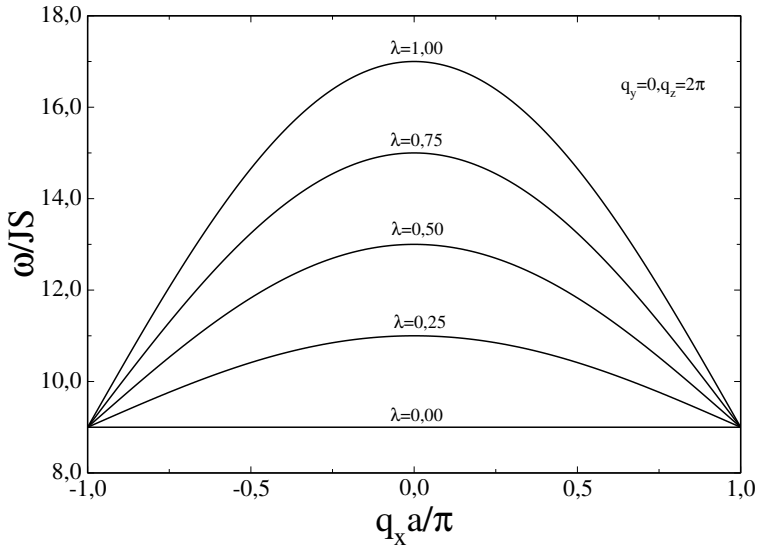

Figura 42: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e os valores fixos de $q_y = 0$ e $q_z = 2\pi$.

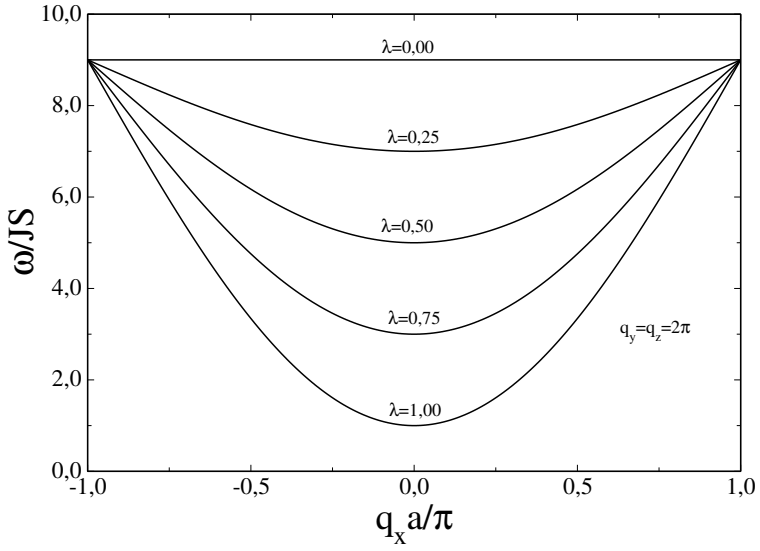

Figura 43: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ, e os valores fixos $q_y = q_z = 2\pi$.

(número quântico de spin), referentes ao sistema puro: $h = J = S = 1.0$.

Agora apresentamos alguns exemplos numéricos para ilustrar os resultados formais acima para os modos associados à impureza, tomando os casos de impurezas magnéticas nos ferromagnetos (estrutura cúbica de corpo centrado) $S = 2$ e $S = 1,5$.

Primeiro, consideramos os modos de defeitos ópticos acima da banda de volume do material puro para uma impureza de $S'/S = 3,5$ em uma amostra ferromagnética com $S = 2$. Estes resultados estão mostrados num gráfico da frequência ω versus interação de troca J' (Fig. 44). Encontramos três tipos de modos: s, que estão associados principalmente com a impureza, p e d, que estão associados principalmente com os vizinhos da impureza. Estes modos estão representados pelas linhas tracejadas que correspondem

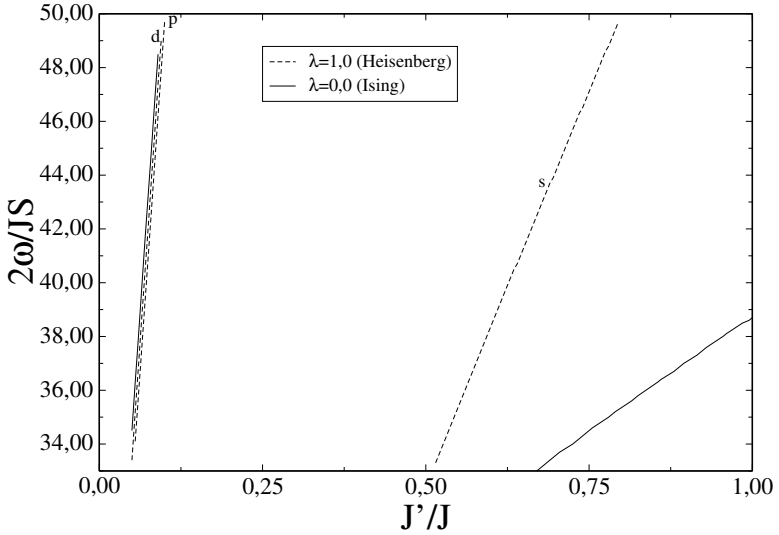

Figura 44: As energias dos modos de defeito ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 3,5$ em uma amostra ferromagnética com $S = 2$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, versus interação de troca. Demais parâmetros encontram-se no texto.

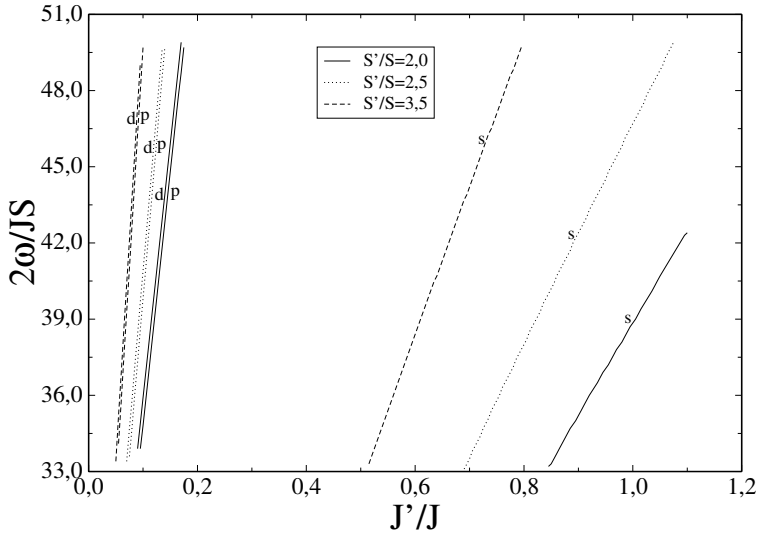

Figura 45: As energias dos modos de impureza ópticos associados com alguns tipos de impurezas em uma amostra ferromagnética com $S = 2$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, versus interação de troca. $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3,5$ (linha tracejada).

ao caso de $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg). Mostramos também estes modos para o caso de $\lambda = 0$ (modelo de Ising) (linhas contínuas) e podemos perceber que os modos p e d apresentam-se degenerados.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, mostramos na Fig. 45 as frequências de ondas de spin versus interação de troca para alguns valores de S': $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3,5$ (linha tracejada). Tomamos o valor fixo de $\lambda = 1,0$ e de $h'/h = 3,55$. Podemos observar que

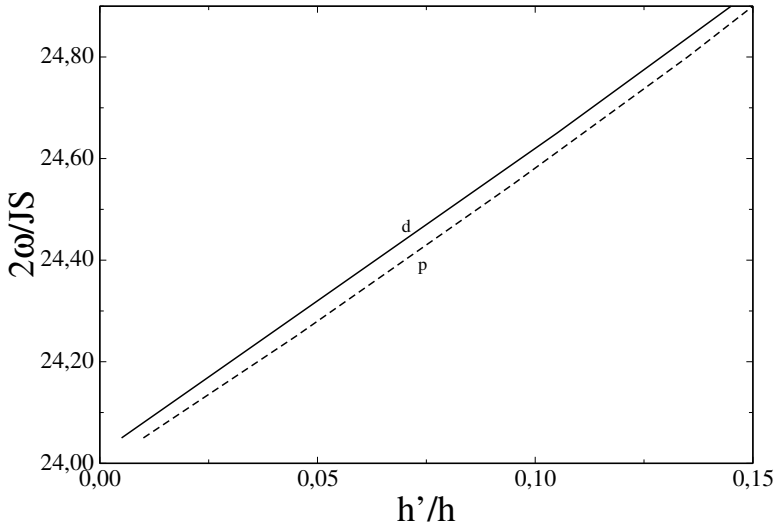

Figura 46: As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 3,5$ em uma amostra ferromagnética de $S = 2$ para um valor $J'/J = 0,038$, versus campo aplicado na impureza.

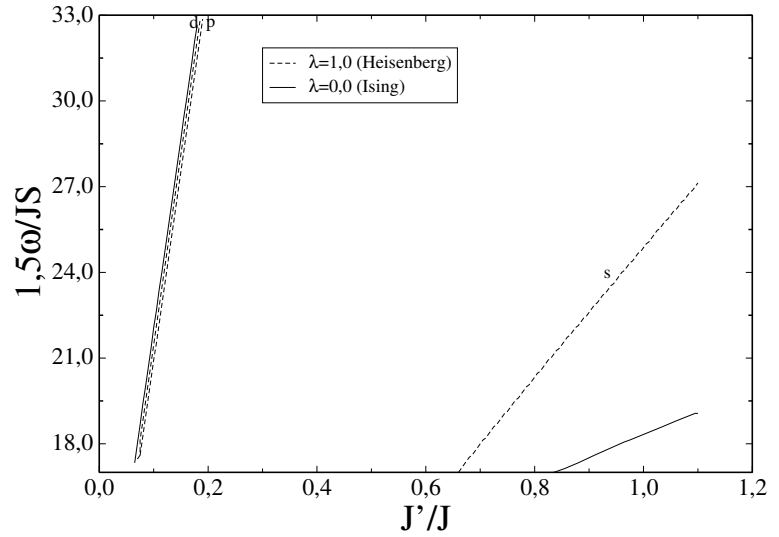

Figura 47: As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 2$ em uma amostra ferromagnética de $S = 1,5$, em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3,55$, plotados contra J'/J.

estes modos (s, p e d) se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'.

Na Fig. 46, apresentamos os resultados para os modos de defeitos num gráfico da frequência ω versus campo aplicado h', para uma amostra ferromagnética com $S = 2$, contendo uma impureza com $S'/S = 3,5$, onde consideramos o valores $J'/J = 0,038$ e $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg). Aqui vemos que somente os modos p (linha tracejada) e d (linha contínua) aparecem.

Em seguida, consideramos os modos de defeitos ópticos acima da banda de volume do material puro para uma impureza de $S' = 2$ em uma amostra ferromagnética com $S = 1,5$. Estes resultados estão mostrados num gráfico da frequência ω versus

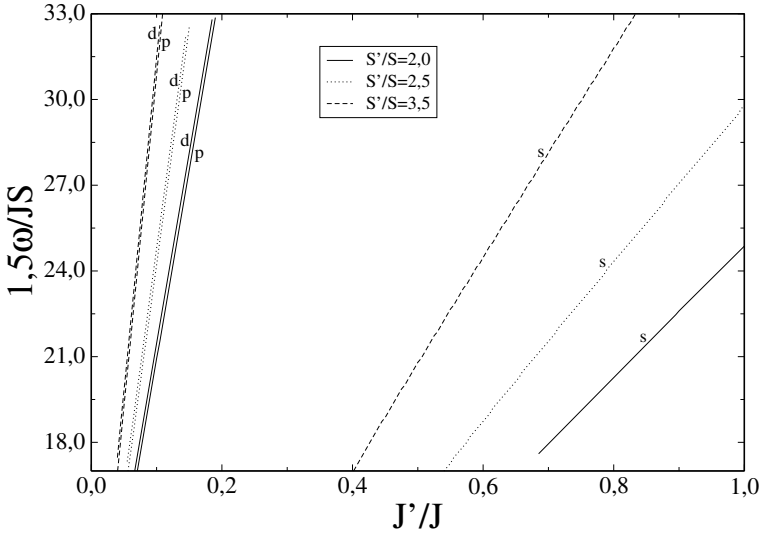

Figura 48: As energias dos modos de impureza ópticos associados com alguns tipos de impurezas em uma amostra ferromagnética com$S = 1, 5$ em um campo magnético externo de valor $h'/h = 3, 55$, versus interação de troca. $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2, 5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3, 5$ (linha tracejada).

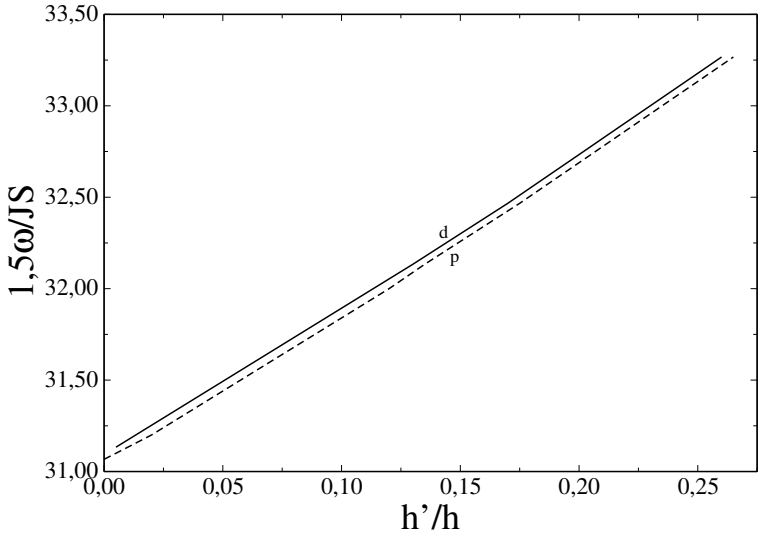

Figura 49: As energias dos modos de impureza ópticos associados com uma impureza de $S'/S = 2$ em uma amostra ferromagnética com $S = 1, 5$, para um valor $J'/J = 0, 063$, versus campo aplicado na impureza. Demais parâmetros são dados no texto.

interação de troca J' (Fig. 47). Também encontramos três tipos de modos: s, p e d. Estes modos estão representados pelas linhas tracejadas que correspondem ao caso de $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg). Mostramos também estes modos para o caso de $\lambda = 0$ (modelo de Ising) (linhas contínuas) e podemos perceber, novamente, que os modos p e d apresentam-se degenerados, ou seja, eles se sobrepõem.

Com o objetivo de analisar o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, mostramos na Fig. 48 as frequências de ondas de spin versus interação de troca para alguns valores

de S'/S: $S'/S = 2$ (linha contínua), $S'/S = 2,5$ (linha pontilhada) e $S'/S = 3,5$ (linha tracejada). Novamente tomamos o valor fixo de $\lambda = 1,0$ e de $h'/h = 3,55$. Podemos observar que estes modos (s, p e d) também se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'.

Na Fig. 49, apresentamos os resultados para os modos de defeitos num gráfico da frequência ω versus campo aplicado h', para uma amostra ferromagnética com $S = 1,5$, contendo uma impureza com $S'/S = 2,0$, onde consideramos o valores $J'/J = 0,063$ e $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg) . Aqui vemos , novamente, que somente os modos p (linha tracejada) e d (linha contínua) aparecem.

7 IMPUREZA INTERSTICIAL LOCALIZADA NUM FERROMAGNETO DE REDE FAVO DE MEL INFINITA

7.1 Introdução

As propriedades físicas superior do grafeno, com suas aplicações promissoras, são principalmente atribuídas a sua estrutura cristalina com uma rede favo de mel bidimensional e interações de curto alcance. Enquanto o grafeno não é um material magnético, muitos estudos, teóricos e experimentais, têm sido feitos para propriedades magnéticas relacionadas e projetos propostos de método spintrônico baseado em grafeno [73, 74]. O grafeno é formado devido a estabilidade de ligação natural de átomos de carbono, mas não há exemplos de elementos atômicos naturais capazes de formar uma rede favo de mel ferromagnética bidimensional. Neste caso, porém, ordenações de nanopontos ferromagnéticos podem ser usados como átomos magnéticos artificiais [75] com a habilidade de exibir as propriedades magnéticas, da mesma maneira que as nanoestruturas de pontos quânticos são usadas como átomos artificiais com a habilidade de projetar propriedades eletrônicas em harmonia, não encontradas em elementos atômicos existentes na natureza [76, 77, 78, 79]. Um estudo teórico é então necessário para prever as similaridades e diferenças entre interações magnéticas e elétricas, de curto alcance, na rede favo de mel bidimensional.

7.2 Modelo e formalismo da função de Green

O sistema em estudo é um ferromagneto de rede favo de mel infinita. Esta rede é formada de duas sub-redes: A e B (vide Fig.53). Uma impureza intersticial, que interage ferromagneticamente com seus primeiros vizinhos, é acrescentada. Para descrever o sistema, novamente utilizaremos o modelo Ising/Heisenberg, cujo Hamiltoniano é dado por

$$H_0 = -\frac{1}{2}\sum_{A,B} J_{A,B}\mathbf{S}_A \cdot \mathbf{S}_B - \sum_A h_A S_A^z - \sum_B h_B S_B^z, \tag{7.1}$$

onde $\mathbf{S}_A$ e $\mathbf{S}_B$ se referem aos operadores de spin nos sítios A e B na sub-rede A e sub-rede B, respectivamente, $J_{A,B}$ é a interação de troca entre sub-redes e as somas são feitas sobre todos os sítios das sub-redes. Tomamos h_A e h_B para representarem os campos magnéticos aplicados nas sub-redes A e B, respectivamente, na direção z. Assumimos que $J_{A,B}$ acopla apenas primeiros vizinhos. Considerando as equações (4.3) e (4.4), juntamente

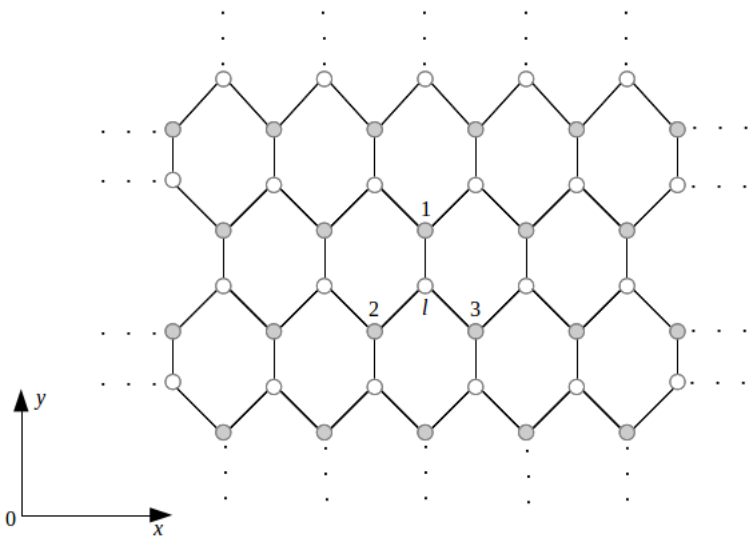

Figura 50: Ferromagneto de rede favo de mel infinita pura. Um sítio qualquer l, situado na sub-rede A (círculos em branco), e seus três primeiros vizinhos (1, 2 e 3), situados na sub-rede B (círculos em cinza).

com a transformação de Holstein-Primakoff (Eqs. 4.6, 4.7 e 4.8), obtemos o Hamiltoniano linearizado para o sistema puro como

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_i \left(\frac{1}{2}S\sum_j J_{ij} + h_i\right) a_i^\dagger a_i + \sum_j \left(\frac{1}{2}S\sum_i J_{ij} + h_j\right) b_j^\dagger b_j \\ &- \frac{1}{2}\sum_{i,j} \lambda(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j), \end{aligned} \tag{7.2}$$

onde $a_i^\dagger$ (a_i) e $b_j^\dagger$ (b_j) são operadores de bóson de criação e destruição para as sub-redes A e B, respectivamente. Como estamos considerando apenas interações entre primeiros vizinhos, cada sítio de uma dada sub-rede interage apenas com sítios da outra sub-rede.

Para estudar as excitações de ondas de spin no ferromagneto com duas sub-redes, em seguida introduzimos as seguintes funções de Green retardadas

$$G_{ab}(t) = \langle\langle a_l(t); b_m^\dagger(0)\rangle\rangle \tag{7.3}$$

e

$$G_{bb'}(t) = \langle\langle b_j(t); b_m^\dagger(0)\rangle\rangle. \tag{7.4}$$

Consideremos a equação de movimento para a componente de Fourier da (7.3), ou seja,

$$\omega\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[a_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[a_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega. \tag{7.5}$$

Substituindo a Eq. 7.2 nesta Eq. 7.5 obtemos a relação (ver apêndice D)

$$\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{\theta}{\eta-\omega}\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{7.6}$$

onde

$$\theta = \frac{1}{2}S\sum_j J_{lj}\lambda \tag{7.7}$$

e

$$\eta = \frac{1}{2}S\sum_j J_{lj} + h. \tag{7.8}$$

Consideremos também a equação de movimento para a componente de Fourier da função de Green retardada (Eq. 7.4), ou seja,

$$\omega\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_j, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[b_j, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega. \tag{7.9}$$

Substituindo a (7.2) nesta equação, obtemos a expressão (analogamente à (7.6))

$$\omega\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\delta_{jm} - \theta\langle\langle a_i; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega + \eta\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{7.10}$$

que substituida na (7.6), fornece a seguinte relação:

$$-(\omega-\eta)^2 G_{lm}(\omega) = \frac{\theta}{2\pi}\delta_{jm} - \theta^2 G_{im}(\omega), \tag{7.11}$$

onde $G_{lm}(\omega) = \langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ e $G_{im}(\omega) = \langle\langle a_i; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$.

Devido à simetria de translação no plano, podemos introduzir uma transformada de Fourier da função de Green $G_{l,m}(\omega)$, definida como

$$G_{lm}^0(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^0(\omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \Rightarrow$$

$$G_{\mathbf{q}}^0(\omega) = \sum_{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m} G_{lm}^0(\omega) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \tag{7.12}$$

onde $\mathbf{r}_l$ e $\mathbf{r}_m$ são vetores bidimensionais que localizam os sítios na rede favo de mel, $\mathbf{q} = q_x\hat{i} + q_y\hat{j}$ é um vetor de onda bidimensional ao longo do plano xy e N é o número total de sítios na rede. Assim, pelas (7.12) e (7.11), obtemos a expressão

$$-(\omega-\eta)^2 G_{\mathbf{q}}^0(\omega) = \frac{\phi(\mathbf{q})}{2\pi} - \phi(\mathbf{q})\phi^*(\mathbf{q}) G_{\mathbf{q}}^0(\omega) \Rightarrow$$

$$G_{\mathbf{q}}^0(\omega) = -\frac{\phi(\mathbf{q})}{2\pi[(\omega-\eta)^2 - |\phi(\mathbf{q})|^2]}, \tag{7.13}$$

onde $t_{lj} = \lambda S J_{lj}/2$. Como a interação é a mesma para quaisquer dois primeiros vizinhos,

podemos fazer $t_{lj} = t$. Temos também que

$$\phi(\mathbf{q}) = \sum_j t_{lj} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)}. \tag{7.14}$$

Assim, considerando um sítio numa dada sub-rede, e seus três primeiros vizinhos na outra sub-rede (vide Fig.53), $\phi(\mathbf{q})$ torna-se

$$\begin{aligned}
\phi(\mathbf{q}) &= \sum_{j=1}^{3} t_{jl} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)} \\
&= t\left[e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1)} + e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_2)} + e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_3)}\right] \\
&= t\left[e^{-i\mathbf{q}\cdot(-a\mathbf{j})} + e^{-i\mathbf{q}\cdot(-\sqrt{3}a\mathbf{i}/2 + a\mathbf{j}/2)} + e^{-i\mathbf{q}\cdot(\sqrt{3}a\mathbf{i}/2 + a\mathbf{j}/2)}\right] \\
&+ t\left[e^{iq_y a} + e^{-iq_y a/2} e^{i\sqrt{3}q_x a/2} + e^{iq_y a/2} e^{-i\sqrt{3}q_x a/2}\right] \\
&= t\left[e^{iq_y a} + 2\cos\left(\sqrt{3}q_x a/2\right) e^{-iq_y a/2}\right].
\end{aligned} \tag{7.15}$$

E o módulo quadrado de $\phi(\mathbf{q})$ será dado pela expressão

$$\begin{aligned}
|\phi(\mathbf{q})|^2 &= \phi(\mathbf{q})\phi^*(\mathbf{q}) \\
&= t^2\left[1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}q_x a}{2}\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{3q_y a}{2}\right)\right].
\end{aligned} \tag{7.16}$$

Logo a relação de dispersão para o sistema em questão fica:

$$(\omega - \eta)^2 = |\phi(\mathbf{q})|^2 \Rightarrow$$

$$\omega = \pm t\left[1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}q_x a}{2}\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{3q_y a}{2}\right)\right]^{1/2} + \eta, \tag{7.17}$$

com $t = \lambda JS/2$ e $\eta = 3JS/2 + h$.

Finalmente, pelas (7.12) e (7.13), obtemos a equação

$$\begin{aligned}
G^0_{lm}(\omega) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} G^0_{\mathbf{q}}(\omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{\phi(\mathbf{q})}{2\pi[(\omega - \eta)^2 - |\phi(\mathbf{q})|^2]} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)},
\end{aligned} \tag{7.18}$$

que é a função de Green para o sistema puro.

Consideremos, agora, o caso em que o sistema contém uma impureza localizada intersticialmente no ferromagneto de rede favo de mel infinita (vide Fig.51). Para este caso, o Hamiltoniano é dado por

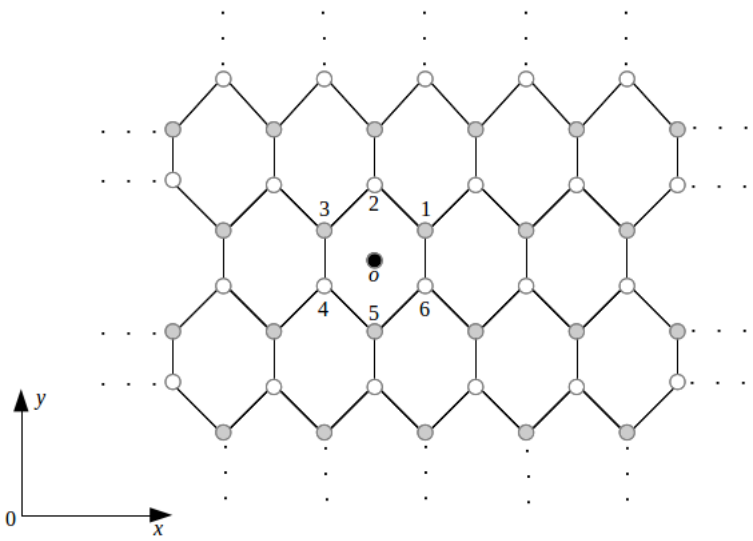

Figura 51: Ferromagneto de rede favo de mel infinita impura. Uma impureza intersticial o (círculo em preto), no centro de um dos hexágonos, e seus seis primeiros vizinhos (três na sub-rede A e três na sub-rede B).

$$\begin{aligned} H' &= -JS\sum_{d_A}\left[\lambda\alpha(a_o a^\dagger_{d_A} + a^\dagger_o a_{d_A}) - \beta a^\dagger_o a_o - \gamma a^\dagger_{d_A} a_{d_A}\right] \\ &- JS\sum_{d_B}\left[\lambda\alpha(a_o b^\dagger_{d_B} + a^\dagger_o b_{d_B}) - \beta a^\dagger_o a_o - \gamma b^\dagger_{d_B} b_{d_B}\right] + h' a^\dagger_o a_o, \end{aligned} \tag{7.19}$$

com $\alpha = \frac{J'}{J}\sqrt{\frac{S'}{S}}$, $\beta = \frac{J'S'}{JS}$ e $\gamma = \frac{J'}{J}$. O operador $a^\dagger_o$ (a_o) cria (aniquila) partículas na impureza. O somatório em d_A se estende aos três primeiros vizinhos da impureza na sub-rede A e o somatório em d_B se estende aos três primeiros vizinhos da impureza na sub-rede B.

Para construir a função de Green para o ferromagneto de rede favo de mel infinita contendo uma impureza localizada intersticialmente, fazemos a substituição das equações (7.2) e (7.19) na (7.5), o que nos fornece a expressão (ver apêndice F)

$$\begin{aligned} \omega G_{lm}(\omega) &= \eta G_{lm}(\omega) - \theta\langle\langle b_j; b_m\rangle\rangle_\omega \\ &- JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(G_{om}(\omega)\delta_{ld_A} + G_{d_A m}(\omega)\delta_{lo}) - \beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} - \gamma G_{d_A m}(\omega)\delta_{ld_A}] \\ &- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha\langle\langle b_{d_B}; b^\dagger_m\rangle\rangle\delta_{lo} - \beta G_{om}(\omega)\delta_{lo}] + h' G_{om}(\omega)\delta_{lo}, \end{aligned} \tag{7.20}$$

onde $G_{lm}(\omega) = \langle\langle a_l; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$, $G_{d_A m}(\omega) = \langle\langle a_{d_A}; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$ e $G_{om}(\omega) = \langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$.

Consideremos também, novamente, a equação de movimento da componente de Fourier da função de Green retardada $\langle\langle b_j; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$, ou seja,

$$\omega\langle\langle b_j; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_j, b^\dagger_m]\rangle + \langle\langle[b_j, H]; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega, \tag{7.21}$$

que, pela substituição das (7.2) e (7.19) , nos dá (analogamente à Eq. 7.20)

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle b_j;b_m\rangle\rangle_\omega &= \frac{\delta_{jm}}{2\pi}-\theta G_{im}(\omega)+\eta\langle\langle b_j;b_m\rangle\rangle_\omega \\ &- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha G_{om}(\omega)\delta_{jd_B}-\gamma\langle\langle b_{d_B};b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{jd_B}].\end{aligned} \tag{7.22}$$

Assim, combinando as equações (7.10) e (7.22), obtemos

$$\langle\langle b_{d_B};b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{\lambda\alpha}{\gamma}\langle\langle a_o;b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{\lambda\alpha}{\gamma}G_{om}(\omega). \tag{7.23}$$

Finalmente, pela substituição das (7.10) e (7.23) na (7.20), obtemos as funções de Green para o sistema impuro, ou seja,

$$\begin{aligned}\omega G_{lm}(\omega) &= \eta G_{lm}(\omega)-\frac{\theta}{2\pi(\omega-\eta)}\delta_{jm}-\frac{\theta^2}{\omega-\eta}G_{im}(\omega) \\ &- JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(G_{om}(\omega)\delta_{ld_A}+G_{d_Am}(\omega)\delta_{lo})-\beta G_{om}(\omega)\delta_{lo}-\gamma G_{d_Am}\delta_{ld_A}] \\ &- JS\sum_{d_B}[(\lambda\alpha)^2G_{om}(\omega)\delta_{lo}-\beta G_{om}(\omega)\delta_{lo}]+h'G_{om}(\omega)\delta_{lo}.\end{aligned} \tag{7.24}$$

A equação (7.24) pode ser expressa matricialmente na forma de uma equação de Dyson, ou seja,

$$[\mathbf{I}-\mathbf{G}^0\mathbf{V}]\mathbf{G}=\mathbf{G}^0, \tag{7.25}$$

onde $\mathbf{G}^0$ é a matriz função de Green para o sistema puro e $\mathbf{G}$, para o sistema impuro, cujos elementos são $2\pi JS\theta^{-1}G^0_{lm}(\omega)$ e $2\pi JS\theta^{-1}G_{lm}(\omega)$, respectivamente. A matriz $\mathbf{V}$ é o potencial efetivo devido a impureza, cujos elementos são

$$\begin{aligned}V_{lj} &= (\omega-\eta)\sum_{d_A}[\lambda\alpha(\delta_{ld_A}\delta_{jo}+\delta_{lo}\delta_{jd_A})-\beta\delta_{lo}\delta_{jo}-\gamma\delta_{ld_A}\delta_{jd_A}] \\ &+ (\omega-\eta)\left\{\sum_{d_B}\left[\frac{(\lambda\alpha)^2}{\gamma}\delta_{lo}\delta_{jo}-\beta\delta_{lo}\delta_{jo}\right]+\frac{h'}{JS}\delta_{lo}\delta_{jo}\right\}.\end{aligned} \tag{7.26}$$

7.3 Modos de impureza e resultados numéricos

Nesta seção, calculamos o espectro de energia dos modos associados com a impureza. Aqui rotulamos a impureza por índice o e seus seis primeiros vizinhos, por $1-6$, três na sub-rede A e três na sub-rede B (vide Fig. 54). A única parte diferente de zero da matriz potencial é uma submatriz 7×7, correspondendo ao spin da impureza e seus vizinhos. O espectro dos modos localizados é, então, encontrado calculando numericamente

as frequências que satisfazem a condição

$$\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}] = 0, \tag{7.27}$$

onde

$$\mathbf{G}^0 = \begin{bmatrix} G_{oo} & G_{o1} & G_{o2} & G_{o1} & G_{o1} & G_{o2} & G_{o1} \\ G_{o1} & G_{oo} & G_{o1} & G_{13} & G_{14} & G_{15} & G_{o2} \\ G_{o2} & G_{o1} & G_{oo} & G_{o1} & G_{15} & G_{25} & G_{15} \\ G_{o1} & G_{13} & G_{o1} & G_{oo} & G_{o2} & G_{15} & G_{14} \\ G_{o1} & G_{14} & G_{15} & G_{o2} & G_{oo} & G_{o1} & G_{13} \\ G_{o2} & G_{15} & G_{25} & G_{15} & G_{o1} & G_{oo} & G_{o1} \\ G_{o1} & G_{o2} & G_{15} & G_{14} & G_{13} & G_{o1} & G_{oo} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{V} = (\eta - \omega) \begin{bmatrix} \rho & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha & -\lambda\alpha \\ -\lambda\alpha & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ -\lambda\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma \end{bmatrix}$$

onde $\rho = 2\beta - (\lambda\alpha)^2/\gamma + h'/JS$. Os elementos da matriz $\mathbf{G}^0$ são obtidos pela (7.18).

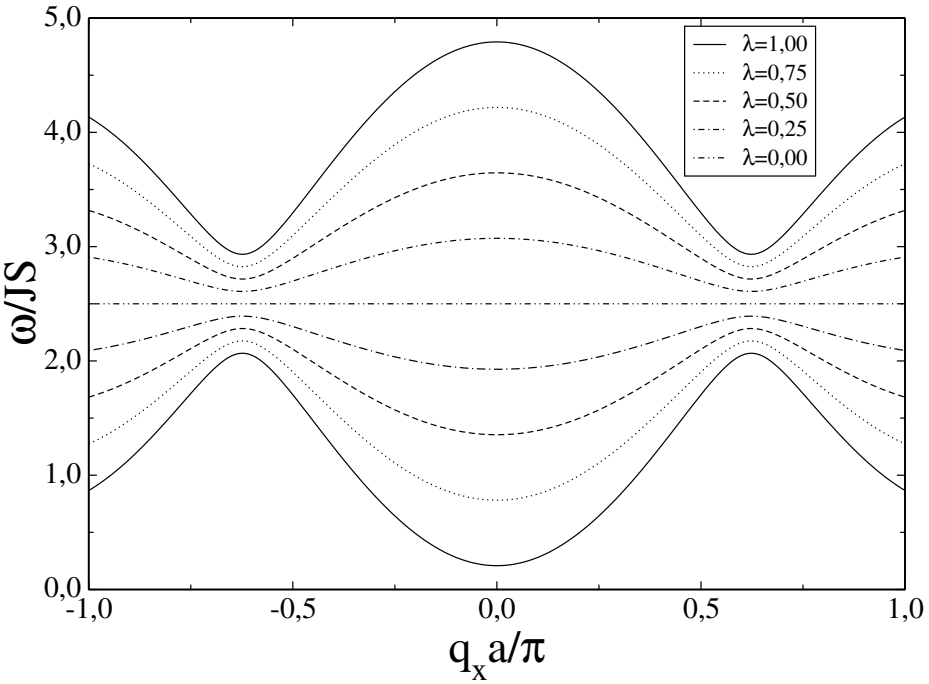

Figura 52: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e o valor fixo de $q_y = 0$, para um ferromagneto com $S = 1$

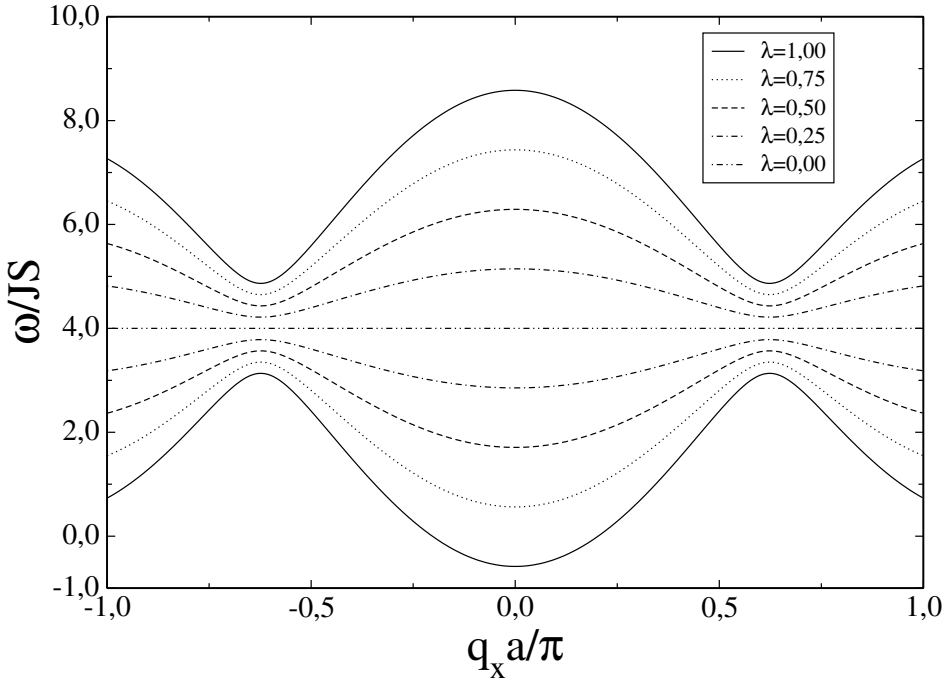

Figura 53: Frequências de ondas de spin em função de $q_x a/\pi$ para diferentes valores de λ e o valor fixo de $q_y = 0$, para um ferromagneto com $S = 2$

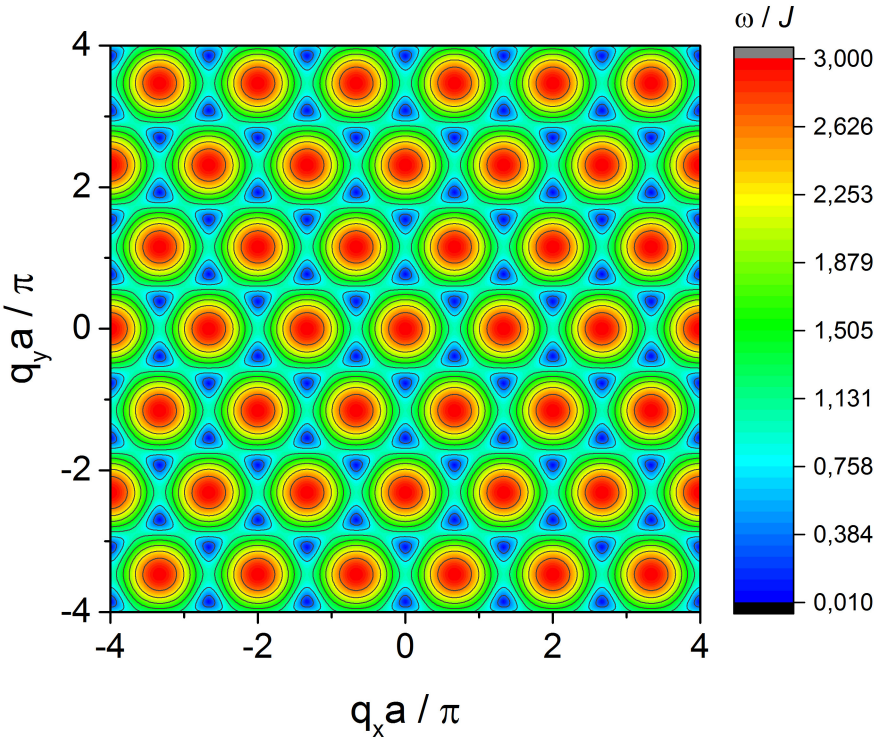

Figura 54: Gráfico do contorno para os efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre a frequência (energia) ω/J, para um ferromagneto com $S = 1$.

Os modos associados à impureza podem, agora, ser obtidos a partir da Eq. (7.27) encontrando os valores de ω para os quais $\det[\mathbf{I} - \mathbf{G}^0\mathbf{V}]$ se anula.

Antes de mostrar os resultados das energias dos modos localizados, analisa-

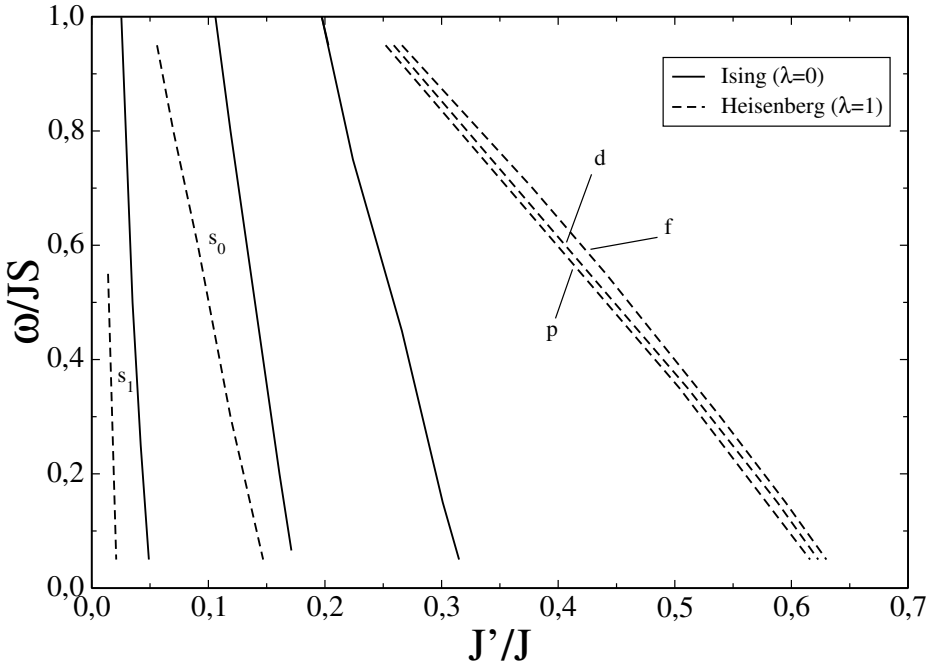

Figura 55: As energias dos modos de impureza acústicos associados a uma impureza intersticial de $S'/S = 1,5$ em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (com número quântico de spin $S = 1$) em um campo magnético externo de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J.

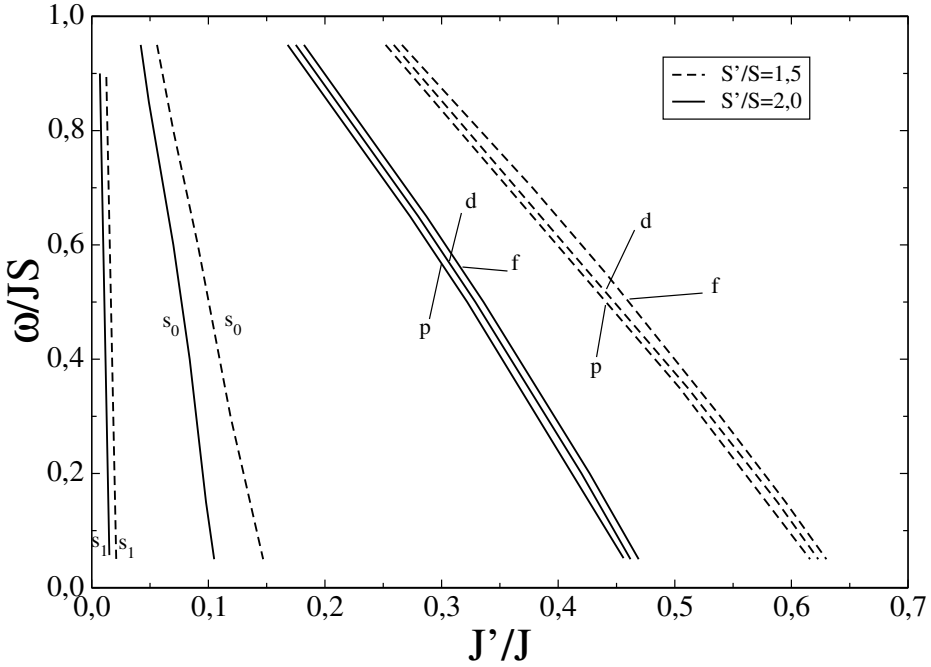

Figura 56: As energias dos modos de impureza acústicos associados a diferentes impurezas intersticiais: $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S'/S = 2$ (linha contínua), em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (com número quântico de spin $S = 1$) em um campo magnético externo na impureza de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J.

remos o sistema puro. A Fig.52 mostra a relação de dispersão para o ferromagneto de rede favo de mel infinita na ausência de impureza, para vários valores de λ: $\lambda = 0$ (linha ponto-ponto-tracejada), $\lambda = 0,25$ (linha ponto tracejada), $\lambda = 0,5$ (linha tracejada),

$\lambda = 0,75$ (linha pontilhada) e $\lambda = 1$ (linha contínua). Aqui usamos os seguintes valores para os parâmetros h (campo externo), S (número de spin do ferromagneto puro) e J (interação de troca no material puro): $h = J = 1,0$. Podemos ver que a relação de dispersão é muito semelhante à relação de dispersão para fitas de grafeno com bordas *zigzag* ([106]). Quando S aumenta (outro material ferromanético com $S = 2$) todas as curvas de dispersão são deslocadas (53). Vemos também que para $\lambda = 0$ (modelo de Ising) não há dispersão, enquanto que para $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg), a dispersão é máxima.

A Fig. 54 mostra o contorno em cores para os diferentes efeitos das componentes q_x e q_y do vetor de onda $\mathbf{q}$ sobre as frequências (energias) de excitação do ferromagneto puro de rede favo de mel infinita. A figura implica que a frequência oscila periodicamente entre os valores mínimo e máximo a medida que q_x e q_y aumentam, o que já era de se esperar, já que a frequência varia com as componentes do vetor de onda através da função cosseno (Eq. 7.17).

Agora apresentamos alguns exemplos numéricos para ilustrar os resultados formais acima para os modos associados à impureza, tomando o caso de uma impureza magnética localizada intersticialmente no ferromagneto (estrutura favo de mel infinita) com $S = 1$..

Primeiro, consideramos os modos de defeitos acústicos abaixo da banda de volume do material puro (com número quântico de spin $S = 1$) para uma impureza de $S'/S = 1$ (Fig. 55). Encontramos cinco tipos de modos: s_0, s_1, p, d e f. Estes modos estão representados pelas linhas tracejadas que correspondem ao caso de $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg). Mostramos também estes modos para o caso de $\lambda = 0$ (modelo de Ising) (linhas contínuas). Como ocorreu para as demais redes estudadas anteriormente, os modos p, d e f se sobrepõem quando $\lambda = 0$, ou seja no contexto do modelo de Ising. Como podemos observar, os modos p, d e f se deslocam para a esquerda a medida que λ diminui a partir de $\lambda = 1$ até $\lambda = 0$, já os modos s_0, s_1, se deslocam para a direita. Todos os modos decrescem com o aumento da interação de troca J'.

Na Fig. 56 analisamos o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, para o ferromagneto com $S = 1$. Mostramos as frequências de ondas de spin versus interação de troca para alguns valores de S': $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S'/S = 2$ (linha contínua). Tomamos o valor fixo de $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg) e de $h'/h = 0,55$. Podemos observar que estes modos (s_0, s_1, p, d e f) se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'.

Em seguida, consideramos os modos de defeitos acústicos abaixo da banda de volume do material puro (outro material com número quântico de spin $S = 2$) para uma

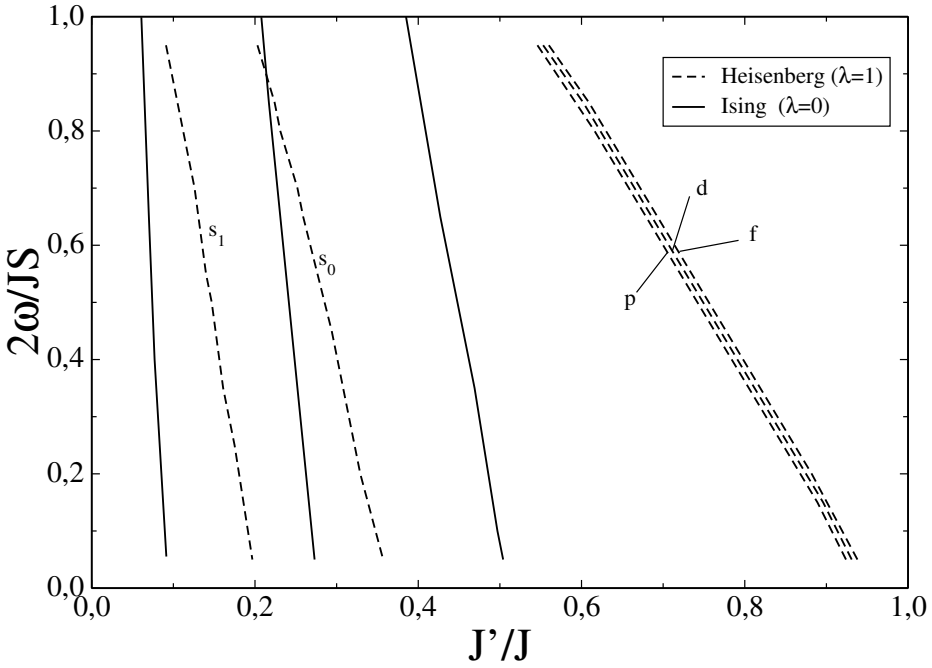

Figura 57: As energias dos modos de impureza acústicos associados a uma impureza intersticial de $S'/S = 1,5$ em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (outro material com número quântico de spin $S = 2$) em um campo magnético externo, na impureza, de valor $h'/h = 0,55$, plotados contra J'/J.

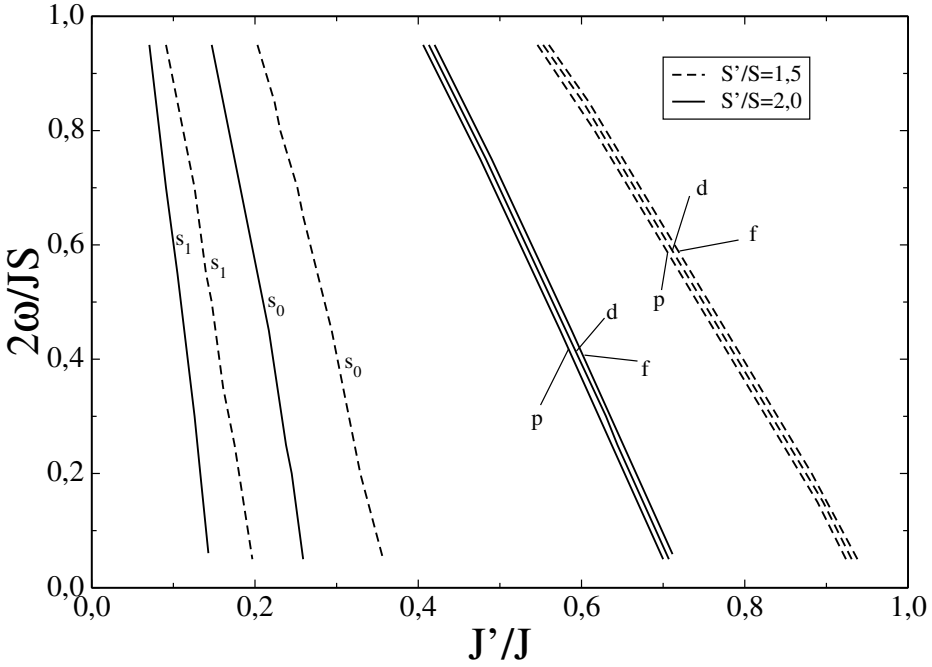

Figura 58: As energias dos modos de impureza acústicos associados a diferentes impurezas intersticiais: $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S' = 2$ (linha contínua), em um ferromagneto de rede favo de mel infinita (outro material com número quântico de spin $S = 2$) em um campo magnético externo, na impureza, de valor $h = 0,55$, plotados contra J'/J.

impureza de $S'/S = 1,5$ (Fig. 57). Também encontramos cinco tipos de modos: s_0, s_1, p, d e f. Estes modos estão representados pelas linhas tracejadas que correspondem ao caso

de $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg). Mostramos também estes modos para o caso de $\lambda = 0$ (modelo de Ising) (linhas contínuas). Como na Fig. 55, os modos p, d e f se sobrepõem quando $\lambda = 0$, ou seja no contexto do modelo de Ising, e se deslocam para a esquerda a medida que λ diminui. Porém, ao contrário da Fig. 55, os modos s_0, s_1 se deslocam para a esquerda, a medida que λ diminui. Como anteriormente, todos os modos decrescem com o aumento da interação de troca J'.

Na Fig. 56 analisamos o comportamento dos modos localizados ao se considerar valores diferentes do número quântico de spin (S') na impureza, para o ferromagneto com $S = 2$. Mostramos as frequências de ondas de spin versus interação de troca para alguns valores de S': $S'/S = 1,5$ (linha tracejada), $S'/S = 2$ (linha contínua). Tomamos o valor fixo de $\lambda = 1,0$ (modelo de Heisenberg) e de $h' = 0,55$. Podemos observar que estes modos (s_0, s_1, p, d e f) se deslocam para a esquerda com o aumento do valor de S'.

8 CONCLUSÕES

Nesta tese estudamos os efeitos de uma impureza magnética isolada embutida intersticialmente em estruturas ferromagnéticas 3D (rede cúbica simples semi-infinita e rede cúbica de corpo centrado infinita) e 2D (rede quadrada infinita, rede quadrada centrada infinita e rede favo de mel infinita). Estes sistemas foram representados pelos modelos de Ising (rede cúbica simples semi-infinta) e de Heisenberg/Ising (demais redes), sendo este último, um modelo genérico onde podemos ter tanto o modelo de Heisenberg como o modelo de Ising, dependendo do valor de um parâmetro λ. Para o modelo de Heisenberg/Ising, empregamos um método teórico baseado na forma da segunda quantização do Hamiltoniano. Em todos os casos, consideramos apenas interação entre primeiros vizinhos. Em adição, a energia Zeeman de um campo magnético externo aplicado é também incorporado aos Hamiltonianos.

No capítulo 3 estudamos os efeitos, no espectro da onda de spin, produzidos por uma impureza magnética implantada intersticialmente em um ferromagneto de rede cúbica simples semi-infinita. Em nossos cálculos, o ferromagneto foi representado usando o modelo de Ising de campo transverso com $S = 1/2$. Para tanto, aplicamos a técnica da função de Green e a aproximação RPA. Nossas expressões gerais descreveram todos os modos de impureza, assim apresentamos resultados numéricos tanto para os modos de defeito (não-ressonantes), que estão fora da banda de energia, de volume e de superfície, da onda de spin, quanto para os modos ressonantes, que estão dentro da banda de volume da onda de spin.

Em princípio, podemos também utilizar o mesmo método para calcular os modos associados com a impureza a temperaturas abaixo da temperatura de Curie. Neste caso, as médias $R_l^x = \langle S_l^x \rangle$ e $R_l^z = \langle S_l^z \rangle$ em qualquer sítio l serão ambos não nulos e temos um sistema de equações (não linear) muito mais complicado, determinando as médias de spin em diferentes sítios, aumentando, assim, a complexibilidade algébrica. Nossos resultados presentes se referem à fase de alta temperatura, onde $R_l^z = 0$ mas $R_l^x \neq 0$.

Mostramos como os modos de defeito e os modos ressonantes dependem da posição da impureza em uma amostra magnética semi-infinita, e dos seus parâmetros magnéticos J', J'_S e h' descrevendo a impureza. Mostramos, também, como os modos de defeito dependem da posição da impureza em relação a seus primeiros vizinhos. Os resultados também dependem do valor J_S/J para o material semi-infinito puro, pois esta razão controla a existência de modos de superfície localizados. Com o desenvolvimento contínuo de técnicas de fabricação para amostras magnéticas anisotrópicas, frequentemente com a

presença de impurezas, nossas análises teóricas podem ajudar na compreensão de tais estruturas ultrafinas.

No capítulo 4 estudamos os efeitos, no espectro da onda de spin, produzidos por uma impureza magnética implantada intersticialmente em um ferromagneto de rede quadrada infinita. Em nossos cálculos, o ferromagneto foi representado usando um modelo genérico, no qual podemos passar do modelo de Heisenberg para o modelo de Ising através do controle no valor de um parâmetro λ (para $\lambda = 1$, temos o modelo de Heisenberg, para $\lambda = 0$, temos o modelo de Ising). Dentro da aproximação RPA a baixas temperaturas ($T \ll T_C$), empregamos métodos da função de Green para calcular as energias da onda de spin associada com o spin da impureza.

Os resultados mostram a dependência dos modos localizados na interação de troca J', no campo aplicado h' e em λ. Obtemos resultados para os três tipos de modos de impureza (s, p e d). Os resultados mostram que a separação entre os modos p e d diminui com a diminuição de λ, de modo que, no contexto do modelo de Ising, estes modos encontram-se degenerados. Ao considerar a dependência no campo aplicado, das energias destes modos, apenas os modos s aparecem. Também observamos que os modos de defeito são sensíveis a mudanças no valor do spin da impureza, ao considerar dois tipos diferentes de impureza ($S'/S = 1,0$ $S'/S = 2$). Foi interessante analisarmos a dependência da energia destes modos no parâmetro λ, pois podemos ver a partir de de qual valor de λ os modos p e d se tornam degenerados.

No capítulo 5 estudamos os efeitos, no espéctro da onda de spin, produzidos por uma impureza magnética implantada intersticialmente em um ferromagneto de rede quadrada centrada infinita. Em nossos cálculos, o ferromagneto foi representado usando o mesmo modelo genérico (Heisenberg/Ising) utlizado para descrever o ferromagneto de rede quadrada infinita do capítulo anterior. E como no capítulo anterior, empregamos métodos da função de Green, dentro da aproximação RPA a baixas temperaturas ($T \ll T_C$), para calcular as energias da onda de spin associada com o spin da impureza.

Através dos resultados, vimos a dependência da energia dos modos localizados na interação de troca J' e no parâmetro λ. Obtemos resultados para os três tipos de modos de impureza (s, p e d). Os resultados mostram que a separação entre os modos p e d diminui com a diminuição de λ, de modo que, no contexto do modelo de Ising, estes modos encontram-se degenerados, o que concorda com os resultados obtidos no sistema do capítulo anterior .

Como uma perspectiva teórica para os estudo referentes aos capítulos 4 e 5, apontamos o fato de que o mesmo formalismo usado aqui pode ser útil para estudar impurezas isoladas embutidas próximas da borda de uma nanofita magnética.

No capítulo 6 estudamos os efeitos, no espectro da onda de spin, produzidos por uma impureza magnética implantada intersticialmente em um ferromagneto de rede cúbica de corpo centrado infinita. Representamos o ferromagneto usando o mesmo modelo (Heisenberg/Ising) utilizado nos capítulos 4 e 5. Dentro da aproximação RPA a baixas temperaturas ($T \ll T_C$), empregamos métodos da função de Green para calcular as energias da onda de spin associada com o spin da impureza.

Os resultados mostram a dependência dos modos localizados na interação de troca J' e no campo aplicado h. Obtemos resultados para os três tipos de modos de defeito (s, p e d). Vimos que no modelo de Heisenberg a separação entre os modos p e d é máxima, porém, no contexto do modelo de Ising, estes modos encontram-se degenerados.

Como uma perspectiva experimental, é interessante examinar estes resultados em cristais como Fe, Cu_2MnAl e Cu_2MnIn com algum tipo de impureza.

No capítulo 7 estudamos os efeitos, no espectro da onda de spin, produzidos por uma impureza magnética implantada intersticialmente em um ferromagneto de rede favo de mel infinita. Em nossos cálculos, o ferromagneto foi representado usando modelo genérico de Heisenberg/Ising utilizado anteriormente. Como ferramenta matemática, empregamos métodos da função de Green para calcular, dentro da aproximação RPA a baixas temperaturas ($T \ll T_C$), as energias da onda de spin associada com o spin da impureza.

Os resultados mostram a dependência dos modos localizados na interação de troca J' tanto para o modelo de Heisenberg como para o de Ising. Obtemos resultados para os cinco tipos de modos de impureza (s_0, s_1, p, d e f).

Do ponto de vista tecnológico, estes resultados são muito animadores ao considerar que se pode fabricar uma contraparte magnética para o grafeno, o que levaria a novos avanços especialmente no campo dos dispositivos spintrônicos e outras aplicações magnéticas.

REFERÊNCIAS

[1] C. Kittel, Quantum Theory of Solids (John Wiley and 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 and 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] Economou, E. N. Green's Functions in Quantum Physics. Berlin; Spring-Verlag, 1983.

[22] Friend, H. M. Green Functions and Ordered Exponentials. Cambridge University Press.

[23] Rickayzen, G., Green's Functions and Condensed Matter The University of Kent at Canterbury, 1980.

[24] Mahanty, J., the Green function method In Solid state Physics. Indian institute of technology, Kanpur India.

[25] Doniach, S. e Sondheimer, E. H. Green's Functions for Solid State Physicists. Imperial College Press - 57 Shelton Street - Convent Garden - London WC2H9HE.

[26] Duffy, Dean G., Green's Functions With Applications. Chapman e Hall/CRC - Boca Raton - London - New York - Washington, D.C.

[27] Ng, Tai-Kai, Introduction to Classical and Quantum Field Theory. WILEY Verlag GmbH e Co.KGaA.

[28] Kaku, Michio, QUANTUM FIELD THEORY. A modern Introduction. New York Oxford- Oxford University Press 1993.

[29] Costa Filho, Raimundo Nogueira da, Propagação de polaritons mágnons em gratings, Filmes e super-redes, Universidade do Ceará-Departamento de Física.

[30] Zubarev, D. N., Double-time Green Functions in Statistical Physics, Soviet Physics Uspekhi,1960.

[31] Nazareno, Hugo N., Mecânica estatística e funções de Green, Universidade de Brasília, 2010.

[32] Sakurai, J. J., Modern quantum mechanics, Late, University of California, Los Angeles.

[33] Pathria, R. K., Statistical Mechanics, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.

[34] Huang, Kerson, Statistical Mechanics, Massachusetts Institute of Technology.

[35] Bassalo, José Maria Filardo, Cattani, Mauro Sérgio Dorsa. Elementos de Física Matemática, volume I Editora Livraria da Física-Casa Editorial Maluhy e Co. São Paulo-2010.

[36] Butkov, E., Mathematical Physics, St. John's University, New York.

[37] Brown, James Ward; Churchill, Ruel V., Complex Variables and Applications, Published by McGraw-Hill, a business unit of The McGraw-Hill Companies, Inc., 1221 Avenue of the Americas, New York, NY 10020.

[38] Weber, Hans J. and Arfken, George B. Essential Mathematical Methods for Physicists. Acadademic Press Amsterdam - Bostom - London - New York - Oxford - Parts - Sandiego - San francisco - Singapore - Sydney - Tokyo.

[39] Leithold, Louis. The Calculus with Analytic Geometry University of Southern California.

[40] Dalven, Richard Introduction to Aplied Solid State Physics Plenum Press- New York and London 1990.

[41] R.A. Cowley, W.J.L. Buyers, Rev. Mod. Phys. 44 (1971) 406.

[42] T. Wolfram, J. Callaway, Phys. Rev. 130 (1963) 2207.

[43] N.-N. Chen, M.G. Cottam, Solid State Commun. 76 (1990) 437.

[44] N.-N. Chen, M.G. Cottam, Phys. Rev. B 44 (1991) 7466.

[45] N.-N. Chen, M.G. Cottam, Phys. Rev. B 45 (1992) 266.

[46] R.V. Leite, A.A. Hidalgo, J. Milton Pereira Jr., R.N. Costa Filho, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 323 (2011) 1787–1792. Localized magnetic excitations of coupled impurities in a Heisenberg ferromagnet: Optical defect modes.

[47] J.M. Sousa, R.V. Leite, R.R. Landim, R.N. Costa Filho, Physica B 438 (2014) 78–83. Impurity modes in the one-dimensional XXZ Heisenberg model.

[48] M.G. Cottam, D.J. Lockwood, Light Scattering in Magnetic Solids, Wiley, New York, 1986.

[49] R. Blinc, B. Zeks, Adv. Phys. 21 (1972) 693.

[50] M.G. Cottam, D.R. Tilley, B. Zeks, J. Phys. C 17 (1984) 1793.

[51] B.A. Shiwai, M.G. Cottam, Phys. Stat. Sol. (b) 134 (1986) 597.

[52] Richard D. Mattuck, Second Edition, Dover Publications, INC., New York.

[53] A. Salman, M.G. Cottam, Surf. Sci. Lett. 1 (1994) 23.

[54] Y.L. Wong, B. Cooper, Phys. Rev. B 172 (1968) 539.

[55] R.V. Leite, B.T.F. Morais, J. Milton Pereira Jr., R.N. Costa Filho, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 283 (2004) 385–391. Green's function theory for a magnetic impurity layer in a ferromagnetic Ising film with transverse field.

[56] R.V. Leite, J. Milton Pereira Jr., R.N. Costa Filho, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 295 (2005) 57–64. Localized magnetic excitations of coupled impurities in a transverse Ising ferromagnet.

[57] N. N. Chen, M. G. Cottam, Solid State Comunications 76, 437 (1990).

[58] R.V. Leite, L.O. de Oliveira Filho, J. Milton Pereira Jr., M.G. Cottam, R.N. Costa Filho, Physics Letters A 373 (2009) 3678–3683. Localized magnetic excitations for a line of magnetic impurities in a transverse Ising thin film ferromagnet.

[59] R.N. Costa Filho, U.M.S. Costa, M.G. Cottam, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 189 (1998) 234—240. Localised magnetic impurity states in a transverse Ising ferromagnet: bulk and surface effects.

[60] R.N. Costa Filho, U.M.S. Costa, M.G. Cottam, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 213 (2000) 195-200. Green function theory for a magnetic impurity layer in a semi-infinite transverse Ising model

[61] W. Lenz, Z. Phys. 21, 613 (1920).

[62] E. Ising, Z. Phys. 31, 253 (1925).

[63] R. Peierls, Proc. Cambridge Phil. Soc. 32, 477 (1936).

[64] H. A. Kramers e G. H. Wannier, Phys. Rev. 60, 252 (1941).

[65] L. Onsager, Phys. Rev. 65, 177 (1944).

[66] S. G. Brush, Rev. Mod. Phys. 39, 883 (1967).

[67] J. Oitmaa e M. Plischke, J. Phys. C: Solid State Phys. 9, 2093 (1976).

[68] R. Blinc e B. Zeks. Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics (North-Holland, Amsterdam, 1974).

[69] R. B. Stinchcombe, J. Phys. C 6, 2459 (1973).

[70] J. M. Sousa, R. V. Leite, R. R. Landim, R. N Costa Filho. Impurity modes in the one-dimentional XXZ Heisenberg model.

[71] R. J. Elliott, A. P. Young, Ferroelectrics 7, 23 (1974).

[72] I. D. Paczec, N. N. Chen e M. G. Cottam, Phys. Rev. B 45 (1992).

[73] O. V. Yazyev, "Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures," Reports on Progress in Physics, vol. 73, no. 5, p. 056501, 2010.

[74] M. Mecklenburg and B. C. Regan, "Spin and the honeycomb lattice: Lessons from graphene," Phys. Rev. Lett., vol. 106, p. 116803, Mar 2011.

[75] R. S. E.O. Kamenetskii and M. Sigalov, "Magnetic artificial atoms based on thin-film ferrite disk particles," Mar 2003.

[76] M. Rontani, "Artificial atoms: Shape the wave," Nat Mater, vol. 10, pp. 173–175, Mar. 2011.

[77] O. Astafiev, K. Inomata, A. O. Niskanen, T. Yamamoto, Y. A. Pashkin, Y. Nakamura, and J. S. Tsai, "Single artificial-atom lasing," Nature, vol. 449, pp. 588–590, Oct. 2007.

[78] R. Bratschitsch and A. Leitenstorfer, "Quantum dots: Artificial atoms for quantum optics," Nat Mater, vol. 5, pp. 855–856, Nov. 2006.

[79] M. A. Kastner, "Artificial atoms," Physics Today, vol. 46, p. 24, 1993.

[80] Maher Zakaria Ahmed Selim, Electronic and magnetic excitations in graphene and magnetic nano-ribbons.

[81] A. P. Daniel, D. Stancil, Spin Waves: Theory and Applications. Springer, 2009.

[82] M. T. Nguyen, Spin-wave excitations in ferromagnetic nanostructures. PhD thesis, University of Western Ontario, 2007.

[83] P. Mohn, Magnetism in the Solid State: An Introduction. Springer, 2 ed., 2006.

[84] J. Stohr and H. Siegmann, Magnetism From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. Springer, 1 ed., 2006.

[85] H. T. Nguyen, Dipole-Exchange Spin Waves in Magnetic Nanomaterials. Phd, The University of Western Ontario, 2009.

[86] D. R. Bs, Quantum mechanics: a modern and concise introductory course. Springer, 2007.

[87] A. Katanin and O. P. Sushkov, "Quasielastic neutron scattering from two-dimensional antiferromagnets at a finite temperature," Phys. Rev. B, vol. 83, p. 094426, Mar 2011.

[88] N. Tsyrulin, F. Xiao, A. Schneidewind, P. Link, H. M. Rønnow, J. Gavilano, C. P. Landee, M. M. Turnbull, and M. Kenzelmann, "Two-dimensional square-lattice $s = 1/2$ antiferromagnet $Cu(pz)_2$ $(ClO_4)_2$," Phys. Rev. B, vol. 81, p. 134409, Apr 2010.

[89] M. D. Lumsden, S. E. Nagler, B. C. Sales, D. A. Tennant, D. F. McMorrow, S.-H. Lee, and S. Park, "Magnetic excitation spectrum of the square lattice $s = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet $K_2V_3O_8$," Phys. Rev. B, vol. 74, p. 214424, Dec 2006.

[90] J. Cervenka, M. I. Katsnelson, and C. F. J. Flipse, "Room-temperature ferromagnetism in graphite driven by two-dimensional networks of point defects," Nat Phys, vol. 5, pp. 840–844, Nov. 2009.

[91] R. Allenspach, "Ultrathin films: magnetism on the microscopic scale," Journal of Magnetism and Magnetic Materials, vol. 129, no. 2-3, pp. 160 – 185, 1994.

[92] D. P. Arovas and A. Auerbach, "Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models," Phys. Rev. B, vol. 38, pp. 316–332, Jul 1988.

[93] D. Yoshioka, "Boson mean field theory of the square lattice Heisenberg model," Journal of the Physical Society of Japan, vol. 58, no. 10, pp. 3733–3745, 1989.

[94] S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, "Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures," Phys. Rev. B, vol. 39, pp. 2344–2371, Feb 1989.

[95] V. Y. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, "Self-consistent spin-wave theory of layered Heisenberg magnets," Phys. Rev. B, vol. 60, pp. 1082–1099, Jul 1999.

[96] M. Takahashi, "Modified spin-wave theory of a square-lattice antiferromagnet," Phys. Rev. B, vol. 40, pp. 2494–2501, Aug 1989.

[97] J. J. Milton Pereira, Microscopic theory of exchange and dipole-exchange spin waves in magnetic thin films. PhD thesis, The University of Western Ontario, 2001.

[98] Pereira, J. Milton; M. G. Cottam, "Theory of dipole-exchange spin waves in ultrathin antiferromagnetic films," Journal of Applied Physics, vol. 85, no. 8, pp. 4949–4951, 1999.

[99] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, "Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity," Rev. Mod. Phys., vol. 78, pp. 17–85, Jan 2006.

[100] E. Dagotto, "Correlated electrons in high-temperature superconductors," Rev. Mod. Phys., vol. 66, pp. 763–840, Jul 1994.

[101] G. Logvenov, A. Gozar, and I. Bozovic, "High-temperature superconductivity in a single copper-oxygen plane," Science, vol. 326, no. 5953, pp. 699–702, 2009.

[102] A. T. Boothroyd, P. Babkevich, D. Prabhakaran, and P. G. Freeman, "An hourglass magnetic spectrum in an insulating, hole-doped antiferromagnet," Nature, vol. 471, pp. 341– 344, Mar. 2011.

[103] T. Dahm, V. Hinkov, S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy, J. Fink, B. Buchner, D. J. Scalapino, W. Hanke, and B. Keimer, "Strength of the spin-fluctuationmediated pairing interaction in a high-temperature superconductor," Nat Phys, vol. 5, pp. 217–221, Mar. 2009.

[104] W. Guo and R. Han, "Spin pairing: the magnetic origin of high-tc superconductivity," Physica C: Superconductivity, vol. 364-365, pp. 79 – 86, 2001.

[105] K. Hida, "A spin wave theory of the high-tc oxide superconductor," Journal of the Physical Society of Japan, vol. 57, no. 5, pp. 1544–1547, 1988.

[106] R. N. Costa Filho, G. A. Farias, and F. M. Peeters, "Graphene ribbons with a line of impurities: Opening of a gap," Phys. Rev. B, vol. 76, p. 193409, Nov 2007.

[107] Holstein, T.; Primakoff, H. Phys. Rev., v. 58, p. 1098, 1940.

APÊNDICE A – EQUAÇÃO DE DYSON

A equação (3.47) pode ser escrita na forma de uma equação de Dyson como

$$[(\mathbf{G}^0)^{-1} - \mathbf{V}]\mathbf{G} = \mathbf{I}, \tag{A.1}$$

onde $\mathbf{G}^0$ e $\mathbf{G}$ são as matrizes função de Green para os sistemas puro e impuro, respectivamente. Para o caso do sistema puro, temos $h' = 0$ e $J' = 0$ e a equação (3.47) torna-se

$$\frac{\omega^2}{h}G_{lm}(\omega) = \frac{1}{2\pi}R_l^x\delta_{lm} - R_l^x\sum_j J_{lj}G_{jm}^0(\omega),$$

$$\frac{\omega^2}{h}\left[\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega)\right]\delta_{lj} = \delta_{lm}\delta_{lj} - R_l^x\sum_j J_{lj}\left[\frac{2\pi}{R_l^x}G_{jm}^0(\omega)\right]\delta_{lj},$$

$$\left[\frac{\omega^2}{h} + R_l^x\sum_p J_{lp}\right]\delta_{lj}\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega) = \delta_{lj},$$

ou, em forma matricial,

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

onde

$$(\mathbf{G}^0)^{-1} \equiv \left[\frac{\omega^2}{h} + R_l^x\sum_p J_{lp}\right]\delta_{lj} = W\mathbf{I} + \mathbf{U}, \tag{A.3}$$

com

$$W = \frac{\omega^2}{h}, \tag{A.4}$$

$$\mathbf{U} = R_l^x\sum_p J_{lp}\delta_{lj} \tag{A.5}$$

e

$$\mathbf{G}^0 \equiv \frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega). \tag{A.6}$$

Para o caso em que o sistema contém uma impureza, a equação (3.47) nos fornece a relação

$$\begin{aligned}\frac{\omega^2-(h+h'\delta_{lo})h'\delta_{l0}}{h+h'\delta_{lo}}\delta_{lj}\left[\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega)\right] &= \delta_{lm}\delta_{lj}-\sum_p J_{lp}R_l^x\left[\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega)\right]\delta_{lj}\\ &- R_l^x\sum_d J'_{od}(G_{om}(\omega)\delta_{ld}\delta_{lj}+G_{dm}(\omega)\delta_{lo}\delta_{lj})\\ &= \delta_{lj}+\sum_p J_{lp}R_l^x\left[\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega)\right]\delta_{lj}\\ &- J'R_l^x\sum_d(\delta_{ld}\delta_{jo}+\delta_{lo}\delta_{jd})G_{lm}(\omega), \qquad (A.7)\end{aligned}$$

ou em forma matricial,

$$\mathbf{AG}=\mathbf{I}-\mathbf{UG}-\mathbf{U'G}, \qquad (A.8)$$

onde

$$\mathbf{A}\equiv\frac{\omega^2-(h+h'\delta_{lo})h'\delta_{l0}}{h+h'\delta_{lo}}\delta_{lj}, \qquad (A.9)$$

$$\mathbf{U'}\equiv J'R_l^x\sum_d(\delta_{ld}\delta_{jo}+\delta_{lo}\delta_{jd}) \qquad (A.10)$$

e

$$\mathbf{G}\equiv\frac{2\pi}{R_l^x}G_{lm}(\omega). \qquad (A.11)$$

Podemos reescrever a (A.8) como segue.

$$\mathbf{AG}+WI\mathbf{G}-WI\mathbf{G}=\mathbf{I}-\mathbf{UG}-\mathbf{U'G},$$

ou

$$(W\mathbf{I}+\mathbf{U})\mathbf{G}=\mathbf{I}+[W\mathbf{I}-\mathbf{U'}-\mathbf{A}]\mathbf{G}\Rightarrow[(W\mathbf{I}+\mathbf{U})-(W\mathbf{I}-\mathbf{U'}-\mathbf{A})]\mathbf{G}=\mathbf{I},$$

ou ainda

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

ou

$$[\mathbf{I}-\mathbf{G}^0\mathbf{V}]\mathbf{G}=\mathbf{G}^0, \qquad (A.12)$$

onde

$$\mathbf{V}=W\mathbf{I}-\mathbf{U'}-\mathbf{A}, \qquad (A.13)$$

APÊNDICE B – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 4.20

É dada a equação de movimento da componente de Fourier da função de Green retardada $\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ para o sistema puro (Eq. 4.19), cujo Hamiltoniano é dado pela Eq. 4.10, ou seja,

$$\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[b_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[b_l, H_0]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega. \tag{B.1}$$

Pela substituição da (4.10), o comutador no último termo nos fornece a expressão

$$\begin{aligned}
[b_l, H_0] &= b_l H_0 - H_0 b_l \\
&= \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i) b_l b_i^\dagger b_i - S\sum_{i,j}\lambda J_{ij} b_l b_i^\dagger b_j \\
&- \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i) b_i^\dagger b_i b_l + S\sum_{i,j}\lambda J_{ij} b_i^\dagger b_j b_l \\
&= \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i)(b_l b_i^\dagger b_i - b_i^\dagger b_i b_l) + S\sum_{i,j}\lambda J_{ij}(b_i^\dagger b_j b_l - b_l b_i^\dagger b_j) \\
&= \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i)(b_l b_i^\dagger b_i - b_i^\dagger b_l b_i S + b_i^\dagger b_l b_i - b_i^\dagger b_i b_l) \\
&+ S\sum_{i,j}\lambda J_{ij}(b_i^\dagger b_j b_l - b_i^\dagger b_l b_j + b_i^\dagger b_l b_j - b_l b_i^\dagger b_j) \\
&= \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i)([b_l, b_i^\dagger] b_i + b_i^\dagger [b_l, b_i]) + S\sum_{i,j}\lambda J_{ij}(b_i^\dagger [b_j, b_l] + [b_i^\dagger, b_l] b_j) \\
&= \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i) b_i \delta_{li} - S\sum_{i,j}\lambda J_{ij} b_j \delta_{li},
\end{aligned} \tag{B.2}$$

onde utilizamos as relações de comutação $[b_i, b_j] = 0$ e $[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$.

Substituindo este resultado na (B.1), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \sum_i [(S\sum_j J_{ij} + h_i)\langle\langle b_i; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \delta_{li}] \\
&- S\sum_{ij}\lambda J_{ij}\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \delta_{li},
\end{aligned} \tag{B.3}$$

ou

$$\begin{aligned} \omega G^0_{lm}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + (S\sum_j J_{lj} + h_l)G^0_{lm}(\omega) \\ &- S\sum_j \lambda J_{lj} G^0_{jm}(\omega), \end{aligned} \tag{B.4}$$

onde $G^0_{lm} = \langle\langle b_l; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$ e $G^0_{jm} = \langle\langle b_j; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$. Obtemos, assim, a Eq. 4.20.

APÊNDICE C – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 4.25

É dada a equação de movimento da componente de Fourier da função de Green retardada $\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ (Eq. 4.19) para o sistema impuro (Hamiltoniano dado por $H = H_0 + H'$, onde H_0 é dado pela 4.10 e H', pela 4.17), ou seja,

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \langle\langle [b_l, H_0 + H']; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \\ &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + \langle\langle [b_l, H_0]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega + \langle\langle [b_l, H']; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \end{aligned} \tag{C.1}$$

Pela substituição das (4.10) e 4.17, os comutadores nos últimos termos nos fornecem as expressões

$$[b_l, H_0] = \sum_i (S\sum_j J_{ij} + h_i) b_i \delta_{li} - S\sum_{i,j} \lambda J_{ij} b_j \delta_{li}, \tag{C.2}$$

pela (B.2), e

$$\begin{aligned}[b_l, H'] &= b_l H' - H' b_l \\ &= (-JS)\sum_d [\lambda\alpha(b_l b_o b_d^\dagger + b_l b_o^\dagger b_d) - \beta b_l b_o^\dagger b_o - \gamma b_l b_d^\dagger b_d] + h' b_l b_o^\dagger b_o \\ &+ JS\sum_d [\lambda\alpha(b_o b_d^\dagger b_l + b_o^\dagger b_d b_l) - \beta b_o^\dagger b_o b_l - \gamma b_d^\dagger b_d b_l] - h' b_o^\dagger b_o b_l \\ &= (-JS)\sum_d [\lambda\alpha(b_l b_o b_d^\dagger + b_l b_o^\dagger b_d - b_o b_d^\dagger b_l - b_o^\dagger b_d b_l) \\ &- \beta(b_l b_o^\dagger b_o - b_o^\dagger b_o b_l) - \gamma(b_l b_d^\dagger b_d - {}_d^\dagger\, b_d b_l)] + h'(b_l b_o^\dagger b_o - {}_o^\dagger\, b_o b_l) \\ &= (-JS)\sum_d [\lambda\alpha(b_l b_o b_d^\dagger - b_o b_l b_d^\dagger + b_o b_l b_d^\dagger - b_o b_d^\dagger b_l + b_l b_o^\dagger b_d \\ &- b_o^\dagger b_l b_d + b_o^\dagger b_l b_d - b_o^\dagger b_d b_l) - \beta(b_l b_o^\dagger b_o - b_o^\dagger b_l b_o + b_o^\dagger b_l b_o - b_o^\dagger b_o b_l) \\ &- \gamma(b_l b_d^\dagger b_d - b_d^\dagger b_l b_d + b_d^\dagger b_l b_d - b_d^\dagger b_d b_l)] \\ &+ h'(b_l b_o^\dagger b_o - b_o^\dagger b_l b_o + b_o^\dagger b_l b_o - b_o^\dagger b_o b_l)\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
[b_l, H'] &= (-JS)\sum_d [\lambda\alpha([b_l, b_o]b_d^\dagger + b_o[b_l, b_d^\dagger] + [b_l, b_o^\dagger]b_d + b_o^\dagger[b_l, b_d]) \\
&- \beta([b_l, b_o^\dagger]b_o + b_o^\dagger[b_l, b_o] - \gamma([b_l, b_d^\dagger]b_d + b_d^\dagger[b_l, b_d])] \\
&+ h'([b_l, b_o^\dagger]b_o + b_o^\dagger[b_l, b_o]) \\
&= (-JS)\sum_d [\lambda\alpha(b_o\delta_{ld} + b_d\delta_{lo}) - \beta b_o\delta_{lo} - \gamma b_d\delta_{ld}] \\
&+ h'b_o\delta_{lo}, \qquad \text{(C.3)}
\end{aligned}$$

onde usamos as relações de comutação $[b_l, b_o] = [b_l, b_d] = 0$, $[b_l, b_o^\dagger] = \delta_{lo}$ e $[b_l, b_d^\dagger] = \delta_{ld}$. Substituindo estes resultados na (C.1), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + (S\sum_j J_{lj} + h_l)\langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega - S\sum_j \lambda J_{lj}\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \\
&- JS\sum_d [\lambda\alpha(\langle\langle b_o; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{ld} + \langle\langle b_d; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{lo}) - \beta\langle\langle b_o; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} \\
&- \gamma\langle\langle b_d; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{ld}] + h'\langle\langle b_o; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} \qquad \text{(C.4)}
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\delta_{lm} + (S\sum_j J_{lj} + h)G_{lm}(\omega) - S\sum_j \lambda J_{lj}G^0_{jm}(\omega) \\
&- JS\sum_d [\lambda\alpha(G_{om}(\omega)\delta_{ld} + G_{dm}(\omega)\delta_{lo}) - \beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} \\
&- \gamma G_{dm}(\omega)\delta_{ld}] + h'G_{om}(\omega)\delta_{lo}. \qquad \text{(C.5)}
\end{aligned}$$

onde $G_{lm}(\omega) = \langle\langle b_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$, $G_{jm}(\omega) = \langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$, $G_{om}(\omega) = \langle\langle b_o; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$ e $G_{dm}(\omega) = \langle\langle b_d; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega$. Obtemos, assim, a equação 4.25.

APÊNDICE D – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 7.6

Consideremos a equação de movimento para a componente de Fourier da (7.3), ou seja,

$$\omega\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\langle[a_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[a_l, H_0]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \langle\langle[a_l, H_0]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega. \tag{D.1}$$

Pois $[a_l, b_m^\dagger] = 0$. Pela substituição da (7.2) nesta equação, o comutador do último termo nos fornece:

$$\begin{aligned}
[a_l, H_0] &= a_l H_0 - H_0 a_l \\
&= \sum_i \left(\frac{1}{2} S \sum_j J_{ij} + h_i\right)(a_l a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i a_l) \\
&+ \sum_j \left(\frac{1}{2} S \sum_i J_{ij} + h_j\right)(a_l b_j^\dagger b_j - b_j^\dagger b_j a_l) \\
&- \frac{1}{2} S \sum_{i,j} \lambda J_{ij}(a_l a_i b_j^\dagger + a_l a_i^\dagger b_j) + \frac{1}{2} S \sum_{i,j} \lambda J_{ij}(a_i b_j^\dagger a_l + a_i^\dagger b_j a_l) \\
&= \sum_i \left(\frac{1}{2} S \sum_j J_{ij} + h_i\right)(a_l a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_l a_i + a_i^\dagger a_l a_i - a_i^\dagger a_i a_l) \\
&+ \sum_j \left(\frac{1}{2} S \sum_i J_{ij} + h_j\right)(a_l b_j^\dagger b_j - b_j^\dagger a_l b_j + b_j^\dagger a_l b_j - b_j^\dagger b_j a_l) \\
&- \frac{1}{2} S \sum_{i,j} \lambda J_{ij}(a_l a_i b_j^\dagger - a_i a_l b_j^\dagger + a_i a_l b_j^\dagger - a_i b_j^\dagger a_l \\
&+ a_l a_i^\dagger b_j - a_i^\dagger a_l b_j + a_i^\dagger a_l b_j - a_i^\dagger b_j a_l)
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
[a_l, H_0] &= \sum_i \left(\frac{1}{2}S\sum_j J_{ij} + h_i\right)([a_l, a_i^\dagger]a_i + a_i^\dagger[a_l, a_i]) \\
&+ \sum_j \left(\frac{1}{2}S\sum_i J_{ij} + h_j\right)([a_l, b_j^\dagger]b_j + b_j^\dagger[a_l, b_j]) \\
&- \frac{1}{2}S\sum_{i,j}\lambda J_{ij}([a_l, a_i]b_j^\dagger + a_i[a_l, b_j^\dagger] + [a_l, a_i^\dagger]b_j + a_i^\dagger[a_l, b_j]) \\
&= \sum_i \left(\frac{1}{2}S\sum_j J_{ij} + h_i\right)a_i\delta_{li} - \frac{1}{2}S\sum_{i,j}\lambda J_{ij}b_j\delta_{li} \\
&= \left(\frac{1}{2}S\sum_j J_{lj} + h_l\right)a_l - \frac{1}{2}S\sum_j \lambda J_{lj}b_j \\
&= \eta a_l - \theta b_j, \qquad \text{(D.2)}
\end{aligned}$$

onde $\theta = \frac{1}{2}S\sum_j \lambda J_{lj}$ e $\eta = (\frac{1}{2}S\sum_j J_{lj} + h_l)$.

Substituindo estes resultados na (D.1), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \langle\langle [a_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \\
&= \eta\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega - \theta\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \qquad \text{(D.3)}
\end{aligned}$$

ou

$$\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{\theta}{\eta - \omega}\langle\langle b_j; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega, \qquad \text{(D.4)}$$

obtendo, assim, a equação 7.6.

APÊNDICE E – OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO 7.20

Consideremos a equação de movimento para a componente de Fourier da função de Green retardada (7.3), ou seja,

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle a_l; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{2\pi}\langle[a_l, b_m^\dagger]\rangle + \langle\langle[a_l, H]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega \\ &= \langle\langle[a_l, H_0]; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega + \langle\langle[a_l, H']; b_m^\dagger\rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \tag{E.1}$$

Pois $[a_l, b_m^\dagger] = 0$. Pela substituição das (7.2) e (7.19) nesta equação, os comutadores dos dois últimos termos nos fornecem:

$$[a_l, H_0] = \eta a_l - \theta b_j, \tag{E.2}$$

pela (D.2) e

$$\begin{aligned}[a_l, H'] &= a_l H' - H' a_l \\ &= -JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(a_l a_o a_{d_A}^\dagger + a_l a_o^\dagger a_{d_A}) - \beta a_l a_o^\dagger a_o - \gamma a_l a_{d_A}^\dagger a_{d_A}] \\ &+ JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(a_o a_{d_A}^\dagger a_l + a_o^\dagger a_{d_A} a_l) - \beta a_o^\dagger a_o a_l - \gamma a_{d_A}^\dagger a_{d_A} a_l] \\ &+ h' a_l a_o^\dagger a_o - h' a_o a_o^\dagger a_l \\ &- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha(a_l a_o b_{d_B}^\dagger + a_l a_o^\dagger b_{d_B}) - \beta a_l a_o^\dagger a_o - \gamma a_l b_{d_B}^\dagger b_{d_B}] \\ &+ JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha(a_o b_{d_B}^\dagger a_l + a_o^\dagger b_{d_B} a_l) - \beta a_o^\dagger a_o a_l - \gamma b_{d_B}^\dagger b_{d_B} a_l] \\ &= \sum_{d_A}[\lambda\alpha([a_l, a_o]a_{d_A}^\dagger + a_o[a_l, a_{d_A}^\dagger] + [a_l, a_o^\dagger]b_{d_B} + a_o^\dagger[a_l, a_{d_A}]) \\ &- \beta([a_l, a_o^\dagger]a_o + a_o^\dagger[a_l, a_o]) - \gamma([a_l, a_{d_A}^\dagger]a_{d_A} + a_{d_A}^\dagger[a_l, a_{d_A}]) \\ &- h'(a_o^\dagger[a_o, a_l] + [a_o^\dagger, a_l]a_o]) \\ &- \sum_{d_B}[\lambda\alpha([a_l, a_o]b_{d_B}^\dagger + a_o[a_l, b_{d_B}^\dagger] + [a_l, a_o^\dagger]b_{d_B} + a_o^\dagger[a_l, b_{d_B}]) \\ &- \beta([a_l, a_o^\dagger]a_o + a_o^\dagger[a_l, a_o]) - \gamma([a_l, b_{d_B}^\dagger]b_{d_B} + b_{d_B}^\dagger[a_l, b_{d_B}]) \\ &= (-JS)\sum_{d_A}[\lambda\alpha(a_o\delta_{ld_A} + a_{d_A}\delta_{lo}) - \beta a_o\delta_{lo} - \gamma a_{d_A}\delta_{ld_A}] \\ &- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha b_{d_B}\delta_{lo} - \beta a_o\delta_{lo}] + h' a_0\delta_{lo}, \end{aligned} \tag{E.3}$$

onde usamos as relações de comutação $[a_l, a_o] = [a_l, a_{d_A}] = [a_l, b_{d_B}] = [a_l, b^\dagger_{d_B}] = 0$, $[a_l, a^\dagger_o] = \delta_{lo}$ e $[a_l, a^\dagger_{d_A}] = \delta_{ld_A}$.

Substituindo estes resultados na (E.1), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle a_l; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega &= \eta\langle\langle a_l; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega - \theta\langle\langle b_j; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega \\
&- JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(\langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{ld_A} + \langle\langle a_{d_A}; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{lo}) - \beta\langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} \\
&- \gamma\langle\langle b_{d_A}; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{ld_A}] + h'\langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} \\
&- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha(\langle\langle b_{d_B}; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{lo} - \beta\langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega\delta_{lo}], \qquad \text{(E.4)}
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm}(\omega) &= \eta G_{lm}(\omega) - \theta\langle\langle b_j; b_m\rangle\rangle_\omega \\
&- JS\sum_{d_A}[\lambda\alpha(G_{om}(\omega)\delta_{ld_A} + G_{d_Am}(\omega)\delta_{lo}) - \beta G_{om}(\omega)\delta_{lo} - \gamma G_{d_Am}(\omega)\delta_{ld_A}] \\
&- JS\sum_{d_B}[\lambda\alpha\langle\langle b_{d_B}; b^\dagger_m\rangle\rangle\delta_{lo} - \beta G_{om}(\omega)\delta_{lo}] + h' G_{om}(\omega)\delta_{lo}, \qquad \text{(E.5)}
\end{aligned}$$

onde $G_{lm}(\omega) = \langle\langle a_l; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$, $G_{d_Am}(\omega) = \langle\langle a_{d_A}; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$ e $G_{om}(\omega) = \langle\langle a_o; b^\dagger_m\rangle\rangle_\omega$, obtendo, assim, a equação 7.20.

APÊNDICE F – GREEN'S FUNCTIONS THEORY FOR AN INTERSTITIAL MAGNETIC IMPURITY IN A TRANSVERSE ISING FERROMAGNET

Artigo aceito para publicação no International Journal of Modern Physics C.
DOI: 10.1142/S0129183117500498