

EVANDRO BASTOS DOS SANTOS

*Efeito de impurezas sobre a dinâmica de spins
em filmes magnéticos ultrafinos*

Niterói

Outubro de 2015

S237 Santos, Evandro Bastos dos.

Efeito de impurezas sobre a dinâmica de spins em filmes magnéticos ultrafinos / Evandro Bastos dos Santos ; orientador: Antônio Tavares da Costa Jr. -- Niterói, 2015. 94 p. : il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, 2015.
Bibliografia: p.92-94.

1.SPIN. 2.MATERIAL MAGNÉTICO. 3.NANOESTRUTURA. 4.IMPUREZA DE SISTEMA METÁLICO. 5.TEORIA DE MEIO EFETIVO. I.Costa Júnior, Antônio Tavares da, Orientador. II.Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física, Instituição responsável. III.Título.

CDD 538.3

EVANDRO BASTOS DOS SANTOS

*Efeito de impurezas sobre a dinâmica de spins
em filmes magnéticos ultrafinos*

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Antonio Tavares da Costa Jr.

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
INSTITUTO DE FÍSICA

Niterói

Outubro de 2015

Dedicatória

a minha família.

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus pelo dom da vida e saúde.

Agradeço aos meus pais, Alberto e Iane, e meu irmão, Leandro, pelo incondicional apoio e incentivo durante esses 10 anos de caminhada desde a graduação. Em especial aos tios Thereza, Ana e Luiz Paulino, e aos primos Rafael, Fabiana e Tatiana, pelo apoio em Niterói.

A minha namorada, Michele, que nesses últimos quatro anos também foi companheira, cúmplice e incentivadora.

Ao meu orientador, Prof. Antonio Costa (Toninho), que foi muito paciente, conselheiro, amigo e sempre presente.

Aos professores Caio Lewenkopf, Pedro Venezuela, Andréa Latgè, Roberto Bechara, de quem também recebi preciosos ensinamentos.

Aos colegas de pós-graduação, Daniel Lourenço, Ingrid Hammes, Gabriel Costa, Bárbara Paes, Daiara Faria e Jorge Correa que contribuíram em momentos dentro e fora da UFF.

Ao Filipe Guimarães, pelas inúmeras dicas. Ao apoio financeiro da CAPES e do CNPq.

Aos Instituto de Física e a Universidade Federal Fluminense, pela estrutura.

Resumo

A desordem é uma característica inevitável de sistemas reais, em especial de amostras de sólidos de dimensões nanoscópicas. Os efeitos de desordem sobre as propriedades de equilíbrio de materiais magnéticos já foram extensamente estudados. Os estudos de propriedades dinâmicas, entretanto, restringem-se aos casos cristalinos ou ao limite extremo de poucas impurezas magnéticas isoladas. Neste trabalho investigamos os efeitos de impurezas substitucionais não-magnéticas em uma monocamada magnética metálica adsorvida a um substrato também metálico. Inicialmente, aplicamos técnicas de meio efetivo ao problema da determinação da susceptibilidade dinâmica transversa na aproximação de fases aleatórias (RPA). Verificamos que as previsões fornecidas pelas aproximações da matriz T e do potencial coerente, embora compatíveis entre si, contrariam fortemente a intuição física. Analisamos as duas principais aproximações envolvidas na aplicação das técnicas de meio efetivo: a substituição das médias de produtos de funções de Green monoelétrônicas pelos produtos das médias no cálculo da susceptibilidade transversa em campo médio e a substituição da média do produto de susceptibilidades transversas pelo produto das médias na equação RPA. Concluimos que a última é a principal responsável pelos resultados contra-intuitivos obtidos. Finalmente, investigamos alguns casos de desordem calculando a susceptibilidade RPA no espaço real para configurações específicas com números finitos de impurezas substitucionais.

Abstract

Disorder is an inevitable feature of real systems, particularly in samples of nanoscopic dimensions. The effect of disorder on equilibrium properties of magnetic materials has been widely studied. Studies of dynamic properties, however, are restricted to crystalline samples and the extreme limit of a few isolated magnetic impurities. In this work we investigate the effect of non-magnetic substitutional impurities in a magnetic metallic monolayer adsorbed to a metallic substrate. We initially applied effective medium techniques to the calculation of the transverse dynamic susceptibility in the random phase approximation (RPA). We found that the predictions of the T-matrix and the coherent potential approximations strongly contradicted physical intuition. We analyzed two main approximations involved in implementing effective medium approximations: the substitution of the average of product of Green functions by products of averages, in the calculation of the mean-field transverse susceptibility, and substitution of the average of the product of transverse susceptibilities by products of averages in the RPA equation. We conclude that the latter is the main responsible for the counterintuitive results obtained. Finally, we investigate some cases of disordered systems by calculating the RPA susceptibility in real space for specific configurations with finite numbers of substitutional impurities.

Lista de Figuras

- 1 Densidade espectral associada a excitações de Stoner, em que a ausência de picos é assinatura do caráter descorrelacionado desse tipo de excitação. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$ p. 16
- 2 Exemplo da parte imaginária de $\chi^{+-}(\omega, q_x = 0)$. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$. A energia do pico está associada a energia de excitação da onda de spin e a largura é inversamente proporcional ao tempo de vida. p. 20
- 3 Densidade espectral para vários q 's em um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$ p. 21
- 4 Esquerda: Espectros de excitação de ondas de spin; Direita: Relação de dispersão χ^{+-} em função do vetor de onda \vec{q} . O ponto $q_x = 0$ está associado ao campo magnético externo. p. 22
- 5 Comparação do cálculo via CPA e via ATA para DOS spin up, para um plano magnético sobre um substrato metálico. O quadro superior é a região próxima a $\omega = 12$ p. 33
- 6 Comparando cálculo via CPA e ATA para a autoenergia, para um plano magnético, sobre um substrato metálico. p. 34
- 7 Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0$ p. 36
- 8 Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0.01$ p. 37
- 9 Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0.05$ p. 38

| | | |
|----|--|-------|
| 10 | Energia de excitação em função da concentração de impurezas para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. O cálculo foi realizado somente em CPA. | p. 39 |
| 11 | Comparação da variação da susceptibilidade HF entre o cálculo exato e o cálculo de meio efetivo, para concentração equivalente a uma impureza. Esquerda: Parte real. Direita: Parte Imaginária | p. 46 |
| 12 | Variação na susceptibilidade HF para diversos valores de q_x | p. 47 |
| 13 | Plano Magnético colocado sobre um substrato metálico não-magnético, semi-infinito no sentido $-z$, em visão perspectiva. | p. 50 |
| 14 | Densidade espectral como função da energia para quatro tamanhos distintos com $q = 0$, sem impurezas. A curva vermelha é o cálculo feito no espaço recíproco. | p. 52 |
| 15 | Densidade espectral como função da energia para quatro tamanhos distintos, com $q = \frac{1}{N}$ e sem impurezas. A curva vermelha é o cálculo feito no espaço recíproco. | p. 53 |
| 16 | Densidade espectral para um plano de dimensões 20x20 e $t' = 0.5t$, com uma impureza. Exato e aproximado. \vec{q} em unidades de $\frac{1}{N} \frac{2\pi}{a}$ | p. 54 |
| 17 | Densidade espectral para um plano de dimensões 24x24 e $t' = t$, com uma impureza. Exato e aproximado. \vec{q} em unidades de $\frac{1}{N} \frac{2\pi}{a}$ | p. 55 |
| 18 | Densidade espectral para um plano de dimensões 18x18, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$ | p. 56 |
| 19 | Densidade espectral para um plano de dimensões 20x20, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$ | p. 57 |
| 20 | Densidade espectral para um plano de dimensões 22x22, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$ | p. 58 |
| 21 | Densidade espectral para um plano de dimensões 23x23, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ | p. 59 |
| 22 | Densidade espectral para um plano de dimensões 24x24, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ | p. 60 |
| 23 | Espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$ | p. 61 |

| | | |
|----|---|------|
| 24 | Energia de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$. Normalizado em relação ao cristalino . . . | p.62 |
| 25 | largura de linha para os espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$. Normalizado em relação ao cristalino | p.63 |
| 26 | Parâmetro de amortecimento para todos os tamanhos. Para $q_x = 0$ e $q_x = 1$. Normalizado em relação ao cristalino | p.64 |
| 27 | Densidades espectrais para $t' = 0.5t$. Tamanho 20x20. | p.65 |
| 28 | Parâmetro de amortecimento para $t' = 0.5t$. Tamanho 20x20. | p.66 |
| 29 | Energias de excitação para $t' = 0.5t$. Tamanho 20x20. | p.67 |
| 30 | Plano Magnético retangular colocado sobre um substrato metálico não-magnético, semi-infinito no sentido $-z$, em visão perspectiva. | p.68 |
| 31 | Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5x20, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.69 |
| 32 | Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5x22, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.70 |
| 33 | Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5x24, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.71 |
| 34 | Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5x30, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.72 |
| 35 | Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5x40, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.73 |
| 36 | Energia de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos retangulares, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.74 |
| 37 | largura de linha para os espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos retangulares, com $q = \frac{1}{N_y}$ | p.75 |
| 38 | Relação de dispersão para a densidade espectral como função de q_y , para um plano magnético com dimensões 5x40 | p.76 |
| 39 | Representação gráfica da integral A.1, representada por I_1 , no plano complexo. | p.80 |

Sumário

| | | |
|----------|---|-------|
| 1 | Introdução | p. 1 |
| 1.1 | Motivação | p. 1 |
| 1.2 | Descrição do Ferromagnetismo Itinerante | p. 3 |
| 1.3 | Excitações Magnéticas | p. 5 |
| 1.3.1 | Teoria da Resposta Linear | p. 6 |
| 1.3.2 | Susceptibilidade Dinâmica Transversa | p. 11 |
| 1.3.3 | Susceptibilidade na Aproximação Hartree-Fock | p. 12 |
| 1.3.4 | Susceptibilidade Magnética na Aproximação RPA | p. 16 |
| 2 | Efeitos de desordem sobre as excitações de spin: teorias de meio efetivo | p. 23 |
| 2.1 | Aproximação de Impurezas Isoladas | p. 26 |
| 2.1.1 | Um Orbital por Sítio | p. 29 |
| 2.2 | A Liga Diluída | p. 30 |
| 2.3 | Resultados e Discussão | p. 34 |
| 3 | Efeito de uma única impureza sobre χ^{HF} | p. 41 |
| 3.1 | Cálculo da Variação da Susceptibilidade Hartree-Fock | p. 42 |
| 3.2 | Comparação entre meio efetivo e cálculo exato | p. 44 |
| 3.3 | Resultados Numéricos | p. 45 |
| 4 | Desordem no Espaço Real | p. 49 |
| 4.1 | Definição do Hamiltoniano no Espaço Real | p. 50 |

| | | |
|----------|--|--------------|
| 4.2 | Resultados Numéricos | p. 51 |
| 4.2.1 | Sistema Cristalino | p. 52 |
| 4.2.2 | Sistema Desordenado | p. 53 |
| 4.2.3 | Resultado para filmes Retangulares | p. 67 |
| 5 | Conclusões e perspectivas | p. 77 |
| | Apêndice A - Cálculo do Estado Fundamental | p. 79 |
| | Apêndice B - Susceptibilidade na presença de uma única impureza | p. 83 |
| B.1 | Expressão Analítica para uma impureza | p. 83 |
| B.2 | Comparação entre CPA e Resultado Exato | p. 90 |
| | Referências | p. 92 |

1 *Introdução*

1.1 Motivação

Atualmente é muito comum mencionar que os materiais magnéticos fazem parte do cotidiano das pessoas. Eles constituem dispositivos como televisores, computadores, *smartphones* e *tablets*, para armazenamento de dados. Não apenas o desenvolvimento de novos dispositivos, mas também o aperfeiçoamento com aumento da capacidade de armazenamento e processamento, além da diminuição do tamanho são os principais desafios tecnológicos enfrentados e que estão intimamente ligados a uma "batalha" comercial envolvendo empresas do ramo de tecnologia.

A miniaturização dos transistores desenvolvidos a partir de materiais semicondutores é a principal responsável pelos avanços tecnológicos dos dispositivos eletrônicos, porém espera-se que rapidamente atinja o limite atômico. Para que os avanços se perpetuem, a spintrônica surge como forte alternativa aos materiais semicondutores que considera as interações eletrônicas e as interações de spin (magnéticas).

A spintrônica contribui, além do armazenamento de dados, para avanços em processamento de informação e transmissão de dados. Diferentemente da eletrônica, que considera apenas a carga do elétron, a spintrônica considera os graus de liberdade de spin do elétron, de forma que as opções se tornem mais estensas que na eletrônica convencional. A spintrônica não é um substituto para a eletrônica, mas sim um complemento. Quando unificamos os dois conceitos, considerando carga e spin do elétron, os pesquisadores ficam cada vez mais próximos do utópico computador quântico[1].

A spintrônica surgiu em 1988, quando os grupos liderados por Peter Gruenberg [2] e Albert Fert [3], estudavam como a aplicação de um campo magnético poderia afetar a corrente elétrica em sistemas multicamadas Fe/Cr. Esse efeito, conhecido como magnetoresistência, era fraco em ferromagnetos normais. Assim, após o estudo de Gruenberg e Fert, o efeito da magnetoresistência foi maximizado em heteroestruturas ferromagnéticas.

ticas. Essa foi a primeira vez que o grau de liberdade de spin do elétron foi explorado como recurso para melhorar o funcionamento de um dispositivo eletrônico. Esses trabalhos pioneiros foram o início de uma grande busca por parte das empresas de tecnologia em aplicá-la aos seus dispositivos, tornando-os menores e mais rápidos.

Idealmente, antes de qualquer tipo de aplicação, os fenômenos envolvidos nos processos devem ser muito bem entendidos e estudados. Estudos de excitação de ondas de spin estão envolvidos em todos esses processos e, principalmente, em mecanismos de bombeamento de spin e espectroscopia de espalhamento de elétrons por perda de energia com polarização de spins. O tempo de vida das ondas de spin é, particularmente, muito curto, tornando-se mais uma barreira para o avanço da spintrônica.

O comportamento dinâmico de filmes magnéticos ultrafinos é essencialmente determinado pelo espectro de ondas de spin, que tem sido largamente estudados tanto teoricamente [4, 5, 6] como experimentalmente [7, 8, 9]. Apesar de muitos esforços no crescimento de filmes ultrafinos ferromagnéticos com interfaces de alta qualidade, um certo grau de desordem parece ser inevitável em amostras reais. Além disso, quando essas películas são produzidas para dispositivos não é prático utilizar processos de crescimento de alta qualidade. Desse modo, é muito importante compreender o comportamento dinâmico de filmes ultrafinos ferromagnéticos com desordem.

A desordem é inevitável em amostras reais, mas os efeitos em fenômenos dinâmicos são notáveis. Diversas técnicas de meio efetivo tem sido empregadas no estudo de propriedades de equilíbrio, porém estudos em propriedades dinâmicas são raros. Entre as décadas de 60 e 70 diversos trabalhos envolvendo o cálculo da constante de rigidez foram realizados. Inicialmente, em 1971 e 1972, [10, 11, 12] Hasegawa e Kanamori simplificaram o problema ao utilizar um orbital por sítio e a interação elétron-elétron calculada na aproximação Hartree-Fock (HF) e o problema de um elétron em um potencial desordenado tratado pela aproximação do potencial coerente (CPA). Para esse modelo a relação de dispersão de ondas de spin do tipo $\omega = Dq^2$ foi calculado, em 1973, por Fukuyama [13] e Hill e Edwards [14], e foi re-calculada por Riedinger e Nauciel-Bloch [15], em 1975, para ligas NiFe. Hennion e Hennion [16], em 1978, fizeram medições do parâmetro D em outras ligas de níquel por espalhamento de neutrons. Em 1978, Edwards e Fung calcularam as correções de vértices para o parâmetro D , usando o modelo de Hubbard com um orbital por sítio e CPA. Em nenhum trabalho houve o estudo do efeito da desordem nos espectros de ondas de spin utilizando um modelo itinerante.

Este trabalho é uma primeira tentativa de incluir efeitos de desordem no cálculo

do espectro de ondas de spin para filmes ultrafinos ferromagnéticos usando um modelo de elétrons itinerantes depositado sobre substratos metálicos não-magnéticos. Em nossos cálculos usamos a aproximação de fase aleatória (RPA) para determinar a susceptibilidade dinâmica transversa. A estrutura eletrônica é descrita por um modelo simplificado de ligações fortes com um orbital por sítio. A desordem é introduzida pressupondo que as duas camadas interfaciais são compostas por ligas binárias, simulando uma interdifusão da material ferromagnético no substrato e vice-versa.

Fizemos vários tratamentos para a inclusão da liga binária. No primeiro tratamento calculamos uma função de Green que representasse uma média configuracional. Em sequência, fizemos um modelo analítico simplificado para uma única impureza. Por fim, executamos os cálculos no espaço real. Nos capítulos seguintes, essas técnicas mencionadas serão discutidas.

1.2 Descrição do Ferromagnetismo Itinerante

O magnetismo em metais é chamado itinerante porque os elétrons responsáveis pelo momento magnético tem mobilidade não nula, ou seja, fazem parte dos elétrons de condução do metal. Sendo assim, para descrevê-los, é necessário considerar tanto seus graus de liberdade de spin quanto os orbitais. Outro ingrediente fundamental na descrição do magnetismo metálico é a interação elétron-elétron. Um gás de elétrons independentes não apresenta magnetização espontânea. Uma parte dos elétrons de condução de um metal ocupa bandas estreitas de energia, com caráter predominantemente determinado pelos orbitais atômicos d . Um modelo mínimo para o magnetismo em metais tem que conter uma contribuição da energia de banda e a contribuição da repulsão elétron-elétron. Um dos modelos mais simples e mais utilizados que contempla minimamente os dois aspectos é conhecido como modelo de Hubbard. Em essência, ele substitui as 10 bandas de caráter d de um metal de transição por uma única banda tipo s e considera uma interação elétron-elétron efetiva que atua apenas quando dois elétrons ocupam o mesmo sítio atômico.

O hamiltoniano para o modelo de Hubbard é definido como

$$H = H_0 + \sum_l [U_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + \hbar\omega(n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow})], \quad (1.1)$$

em que $H_0 = \sum_{\sigma,i,j} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}$ e o operador número $n = a^\dagger a$, é escrito em notação de

segunda quantização. $\hbar\omega$ é a energia associada ao campo externo magnético aplicado na direção S_z . Nesta tese adotaremos a aproximação de primeiros vizinhos para a parte de banda do hamiltoniano, $t_{ij} = t$ se i e j são primeiros vizinhos, $t_{ij} = 0$ caso contrário. Desta forma, a largura de banda é proporcional a t . Adotaremos t como unidade de energia. Podemos estimar o valor de t de forma simples. A largura da banda dos metais de transição é, no volume, tipicamente da ordem de 5 eV. No nosso modelo a largura da banda no volume é $12t$. Portanto $t \sim 0.5$ eV.

O modelo de Hubbard, apesar da simplificação drástica que representa quando comparado com o problema original, ainda é um problema muito difícil, por envolver explicitamente interações de muitos corpos, por isso, há a necessidade de descrever a interação entre os elétrons do cristal de uma forma aproximada. A tentativa mais simples é aproximar as interações entre os elétrons através de um campo médio. Chamaremos essa aproximação de Hartree-Fock.

Na interação elétron-elétron podemos considerar o operador número como um valor médio somado a uma flutuação.

$$n_{l\sigma} = \langle n_{l\sigma} \rangle + \delta n_{l\sigma} \quad (1.2)$$

É conveniente definir as expressões para n e m como

$$n = \langle n_{l\uparrow} \rangle + \langle n_{l\downarrow} \rangle \quad (1.3)$$

$$m = \langle n_{l\uparrow} \rangle - \langle n_{l\downarrow} \rangle, \quad (1.4)$$

ou seja, a ocupação é a soma das médias de todos os elétrons e a magnetização é a diferença entre as quantidades de spins distintos. Ao usarmos o valor para $n_{l\sigma}$ definido em 1.2, podemos aproximar o produto desses operadores como

$$n_{l\uparrow}n_{l\downarrow} \approx \langle n_{l\uparrow} \rangle n_{l\downarrow} + \langle n_{l\downarrow} \rangle n_{l\uparrow}. \quad (1.5)$$

Nessa expressão, as flutuações representadas pelos termos $\delta_{l\sigma}n_{\uparrow}\delta_{l\sigma}n_{\downarrow}$ foram desprezadas, pois são muito menores que os valores médios.

Então podemos redefinir o hamiltoniano em termos desse produto,

$$H = \sum_{i\sigma} \left[\left(E_i + \frac{U_i}{2}(n_i - \sigma m_i) \right) a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + \sum_{j \neq i} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \hbar \omega m_i \right] \quad (1.6)$$

em que $\sigma = +1$ para a sub-banda majoritária de spins (que chamaremos de *up*) e $\sigma = -1$ para a sub-banda minoritária de spin (que chamaremos de *down*).

Note que o hamiltoniano depende dos parâmetros E_i (energia de sítio), n_i e m_i que são determinados pelo estado fundamental do próprio hamiltoniano. Sendo assim, o estado fundamental tem que ser determinado de forma autoconsistente. O cálculo desse estado fundamental é descrito em detalhes no apêndice A.

1.3 Excitações Magnéticas

O comportamento de diversas propriedades magnéticas é determinado, não só pelo estado fundamental, mas também pelos estados excitados do sistema ferromagnético [17]. Através do espectro de ondas de spin podemos calcular diversas propriedades termodinâmicas como a dependência da magnetização com a temperatura e sua relaxação para o equilíbrio quando perturbada.[18]. Por isso, o estudo das propriedades de ondas de spin tem importância fundamental quando há interesse em compreender essas propriedades e características. Segundo a literatura [17, 6, 19], as excitações e os espectros de ondas de spin tem sido bastante estudados nos últimos tempos.

Ondas de spin são as excitações coletivas de mais baixa energia em materiais magnéticos. Elas podem ser investigadas no regime de Resposta Linear, que consiste em aplicar o campo magnético transversal ao sólido para perturbar o estado fundamental e, então, obter a resposta em primeira ordem no campo. Conhecendo os espectros de excitação de spin é possível obter energias de excitação de ondas de spin e os respectivos tempo de vida[17]. É através do cálculo da susceptibilidade dinâmica transversal (χ^{+-}), que é definido como sendo a resposta, em primeira ordem no campo, que o material magnético sofre quando este é está sujeito a um campo magnético externo ou local.

Assim como usamos a aproximação Hartree-Fock para o cálculo do estado fundamental, também utilizamos o cálculo da susceptibilidade na aproximação Hartree-Fock.

1.3.1 Teoria da Resposta Linear

Uma das abordagens mais simples para prever uma resposta de um sistema a um campo é a Teoria da Resposta Linear [20]. De acordo com essa teoria, perturbações fracas de primeira ordem, são aplicadas a um sistema de modo que a variação na resposta (operador) seja proporcional ao campo aplicado.

O campo $\phi(\vec{r}, t)$ se acopla a um observável A do sistema e logo temos que,

$$H_{int} = \int d^3r \hat{A}(\vec{r}) \phi(\vec{r}, t) \quad (1.7)$$

é a perturbação causada pelo campo $\phi(\vec{r}, t)$.

A primeira aproximação válida nesse método é que o campo $\phi(\vec{r}, t)$ se anula quando o tempo t atingir valores muito grandes. Com isso a perturbação também irá se anular quando t for muito grande. Vamos considerar que

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e^{-\eta(t)} H_{int}. \quad (1.8)$$

Nesse caso \hat{H} é o hamiltoniano evoluído e \hat{H}_0 é o hamiltoniano em $t = -\infty$, ou seja, o hamiltoniano não perturbado. $\eta \rightarrow 0^+$ é um parâmetro que garante que a interação é "ligada adiabaticamente", ou seja, para instantes infinitamente remotos no passado e no futuro o hamiltoniano total é o não-perturbado, e evolui suavemente do não perturbado em $t \rightarrow -\infty$ para o perturbado em $t = 0$ e novamente para o não perturbado em $t \rightarrow +\infty$. No instante $t \rightarrow -\infty$

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle. \quad (1.9)$$

E em $t = 0$, o hamiltoniano já evoluiu e, então

$$H = H_0 + H_{int}. \quad (1.10)$$

A perturbação H_{int} será responsável por uma variação pequena, um operador \hat{B} .

$$\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle = \langle \psi_l(t) | B_l(\vec{r}, t) | \psi_l(t) \rangle, \quad (1.11)$$

que está escrito na representação de interação, em que

$$\hat{B}_l = e^{iH_0t/\hbar} \hat{B}_s e^{-iH_0t/\hbar} \quad (1.12)$$

$$|\psi_l\rangle = e^{iH_0t/\hbar} |\psi_s\rangle. \quad (1.13)$$

$|\psi_l\rangle$ é o autoestado na representação de interação e $|\psi_s\rangle$ é o autoestado na representação de Schrodinger[21]. Logo as equações de movimento[21] são:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_l\rangle = H_{int} |\psi_l(t)\rangle \quad (1.14)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} B_l = [B_l, H_0] \quad (1.15)$$

Integrando a equação 1.14 de $-\infty$ até t ,

$$|\psi_l(t)\rangle = |\phi_0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H_{int} |\psi_l(t')\rangle \equiv |\phi_0\rangle + |\psi_1\rangle. \quad (1.16)$$

Substituindo em 1.11

$$\begin{aligned} \langle B_l(\vec{r}, t) \rangle &= \langle \phi_0 | B_l(r) | \phi_0 \rangle + \langle \phi_0 | B_l(\vec{r}, t) | \psi_1 \rangle + \\ &\langle \psi_1 | B_l(\vec{r}, t) | \phi_0 \rangle + \langle \psi_1 | B_l(\vec{r}, t) | \psi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Calculando a diferença entre $\langle B \rangle$ e o valor não perturbado, temos que

$$\delta \langle B_l(\vec{r}, t) \rangle = B_l(\vec{r}, t) + \langle \phi_0 | B_l(\vec{r}) | \phi_0 \rangle \quad (1.18)$$

$$= \langle \phi_0 | B_l(\vec{r}, t) | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | B_l(\vec{r}, t) | \phi_0 \rangle + \langle \psi_1 | B_l(\vec{r}, t) | \psi_1 \rangle. \quad (1.19)$$

Agora, vamos utilizar somente o termo de 1ª ordem,

$$|\psi_1\rangle \approx \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H_{int}(t') |\psi_l(t')\rangle, \quad (1.20)$$

para que possamos ter

$$\delta\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle \approx \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \phi_0 | B_l(\vec{r}, t) H_{int}(t') - H_{int}(t') B_l(\vec{r}, t) | \phi_0 \rangle \quad (1.21)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \phi_0 | [B_l(\vec{r}, t), H_{int}(t')] | \phi_0 \rangle \quad (1.22)$$

Substituindo 1.7 em 1.22,

$$\delta\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle = \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \frac{1}{i\hbar} \theta(t-t') \langle \phi_0 | [B_l(\vec{r}, t), A_I(\vec{r}', t')] | \phi_0 \rangle \varphi(\vec{r}', t'). \quad (1.23)$$

Da definição 1.12 podemos calcular

$$B_l(\vec{r}, t) A_l(\vec{r}, t) = e^{iH_0 t/\hbar} B_s(\vec{r}) e^{-iH_0(t-t')/\hbar} A_s(\vec{r}') e^{-iH_0'/\hbar}. \quad (1.24)$$

Como sabemos, ϕ_0 é um autoestado de \hat{H}_0 , por isso

$$\langle \phi_0 | B_l(\vec{r}, t) A_l(\vec{r}, t') | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_l(\vec{r}, t-t') A_l(\vec{r}') | \phi_0 \rangle. \quad (1.25)$$

Rescrevendo $\delta\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle$,

$$\delta\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle = \int d^3r \int dt' \chi_{BA}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') \varphi(\vec{r}', t') \quad (1.26)$$

é a variação de B_l na aproximação de primeira ordem do campo, em que

$$\chi_{BA}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = -\frac{1}{i\hbar} \theta(t-t') \langle \phi_0 | [B_H(\vec{r}, t-t'), A_H(\vec{r}', 0)] | \phi_0 \rangle \quad (1.27)$$

$$\chi_{BA}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = \langle \langle B_H(\vec{r}, t-t'), A_H(\vec{r}', 0) \rangle \rangle^R \quad (1.28)$$

$$\langle \langle B_H(\vec{r}, t-t'), A_H(\vec{r}', 0) \rangle \rangle^R = -\frac{1}{i\hbar} \theta(t) \langle [B_H(\vec{r}, t), A_H(\vec{r}', 0)] \rangle \quad (1.29)$$

Essas equações são chamadas de equações de Kubo para a Resposta Linear.

\hat{B}_H e \hat{H}_H são as formas escritas na representação de Heisenberg para o sistema não perturbado, H_0 .

O valor esperado no estado fundamental, $T = 0$, é diferente para o sistema não perturbado. Para $T \neq 0$, pode ser generalizado de forma imediata. Considerando um *ensemble* canônico, temos

$$\langle \phi_0 | \dots | \phi_0 \rangle = \frac{\sum_n e^{-\beta \tau n} \langle n | \dots | n \rangle}{\sum_n e^{-\beta \tau n}} \quad (1.30)$$

Para encontrar a Função de Green, calculamos as equações de movimento

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \langle \hat{B}(t), \hat{A}(0) \rangle \rangle^R &= \frac{d}{dt} \theta(t) \langle [\hat{B}(t), \hat{A}(0)] \rangle \\ &= \frac{d\theta(t)}{dt} \langle [\hat{B}(t), \hat{A}(0)] \rangle + \theta(t) \langle [\frac{d\hat{B}(t)}{dt}, \hat{A}(0)] \rangle. \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$(1.33)$$

Conhecendo $i\hbar \frac{d}{dt} B(t) = [B(t), H]$ e $\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t)$, temos que

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \langle \hat{B}(t), \hat{A}(0) \rangle \rangle^R = \delta(t) \langle [\hat{B}(t), \hat{A}(0)] \rangle + \langle \langle [\hat{B}(t), \hat{H}], \hat{A}(0) \rangle \rangle^R \quad (1.34)$$

Fazendo uma transformada de Fourier em relação ao tempo, chegamos em

$$\hbar\omega \langle \langle \hat{B}, \hat{A} \rangle \rangle_\omega^R = \langle [\hat{B}, \hat{A}] \rangle + \langle \langle [\hat{B}, \hat{H}] \rangle \rangle_\omega^R \quad (1.35)$$

Ao definir $\langle \langle \hat{B}, \hat{A}(0) \rangle \rangle^R$ em relação ao tempo, surge uma nova função de Green de ordem mais alta $\langle \langle [\hat{B}(t), \hat{H}], \hat{A}(0) \rangle \rangle^R$, que envolve a média termodinâmica de um produto de operadores. Para obter as funções de Green desejadas podemos, por aproximações, desacoplar essas equações através da resolução de um sistema fechado de equações.

Para entender o que isso significa, vamos calcular a resposta associada a experimentos de FMR, em que existe um campo magnético transversal oscilatório, com frequência ω e localizado em um sítio do material, que definimos como 0.

$$\vec{h}(t) = h_0[\cos(\omega t)\hat{x} - \sin(\omega t)\hat{y}] \quad (1.36)$$

E o acoplamento entre o campo e o spin será

$$g\mu_B\vec{h}(t) \cdot \vec{S} = \frac{g\mu_B h_0}{2}[e^{i\omega t}S^+ + e^{-i\omega t}S^-] \quad (1.37)$$

Utilizando que a componente de spin é $S_i^+ = S_i^x + iS_i^y$, associada a um sítio i temos que $\delta\langle B_l(\vec{r}, t) \rangle$ que foi definido na equação 1.26 pode ser escrito como

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = \frac{g\mu_B h_0}{2} \int dt' [e^{i\omega t'} \chi_{i0}^{++}(t-t') + e^{-i\omega t'} \chi_{i0}^{+-}(t-t')] \quad (1.38)$$

em que as susceptibilidades χ_{i0}^{++} e χ_{i0}^{+-} são

$$\chi_{i0}^{++}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_i^+(t), S_0^+(0)] \rangle \quad (1.39)$$

$$\chi_{i0}^{+-}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_i^+(t), S_0^-(0)] \rangle. \quad (1.40)$$

A componente de spin $S_z(t) = S_z$ se conserva no tempo devido a simetria de rotação no espaço de spin que o hamiltoniano garante. Quando calculamos $\langle [S_i^+(t), S_0^+(0)] \rangle$ em termos dos autoestados do hamiltoniano temos que S_0^+ irá levantar um spin no sítio 0 e S_i^+ irá abaixar um spin no sítio i . Como os estados que compõe os produtos internos são ortogonais entre si, $\langle [S_i^+(t), S_0^+(0)] \rangle = 0$. De modo que resta apenas

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = \frac{g\mu_B h_0}{2} \int dt' [e^{-i\omega t'} \chi_{i0}^{+-}(t-t')]. \quad (1.41)$$

Definindo a transformada de Fourier como

$$\chi_{i0}^{+-}(\omega) = \int dt' [e^{i\omega t'} \chi_{i0}^{+-}(t-t')]. \quad (1.42)$$

e substituindo em 1.41, temos que

$$\delta\langle S_i^+(t)\rangle = \frac{g\mu_B h_0}{2}\chi_{i0}^{+-}(\omega)e^{-i\omega t'}. \quad (1.43)$$

Ou em forma trigonométrica

$$\delta\langle S_i^+(t)\rangle = \frac{g\mu_B h_0}{2}|\chi_{i0}^{+-}(\omega)|e^{i\omega t'+\phi}. \quad (1.44)$$

Assim, o módulo de $\chi_{i0}^{+-}(\omega)$ é a amplitude da precessão com frequência ω da componente de spin S^+ no sítio i , quando um campo oscilatório é aplicado no sítio 0.

1.3.2 Susceptibilidade Dinâmica Transversa

Uma forma de encontrar estados excitados é calcular a resposta de um campo transversal aplicado ao sistema. A esse campo, as componentes transversais de spin serão acopladas e, então, será possível medir a susceptibilidade transversa.

A susceptibilidade de spin é uma função de Green [22, 23]

$$\chi_{ij}^{+-}(t) = \langle\langle S_i^+(t), S_j^-(0)\rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\langle[S_i^+(t), S_j^-(0)]\rangle \quad (1.45)$$

em que $S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}$ e $S_j^- = c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}$.

Para encontrarmos a função de Green $\chi_{ij}^{+-}(t)$, utilizaremos a correlação

$$\chi_{ijkl}^{+-}(t) = \langle\langle S_{ij}^+(t), S_{kl}^-(0)\rangle\rangle \quad (1.46)$$

em que $S_{ij}^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}$ e $S_{kl}^- = c_{k\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow}$.

A susceptibilidade original que está definida na equação 1.45 também pode ser representada por $\chi_{ij}^{+-} \equiv \chi_{iijj}^{+-}$. A equação de movimento para essa função de Green generalizada é

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi_{ijkl}^{+-}(t) = \delta(t)\langle[S_{ij}^+(t), S_{kl}^-(0)]\rangle + \langle\langle[S_{ij}^+(t), H], S_{kl}^-(0)\rangle\rangle \quad (1.47)$$

Para o primeiro termo do lado direito temos

$$\delta(t)\langle [S_{ij}^+(t), S_{kl}^-(0)] \rangle = c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \delta_{jk} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \delta_{il} \quad (1.48)$$

e para o segundo termo,

$$[S_{ij}^+(t), H] = \sum_n (t_{jn} c_{i\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow} - t_{ni} c_{n\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + (U_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - U_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \quad (1.49)$$

Voltando novamente à equação de movimento 1.47, temos que

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{ijkl}^{+-}(t) = \delta(t) \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \delta_{jk} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \delta_{il} \rangle + \sum_n \langle \langle (t_{jn} c_{i\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow} - t_{ni} c_{n\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}); S_{kl}^- \rangle \rangle + \quad (1.50)$$

$$+ (U_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - \langle \langle U_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}; S_{kl}^- \rangle \rangle)$$

1.3.3 Susceptibilidade na Aproximação Hartree-Fock

A aproximação Hartree-Fock consiste em tratar os efeitos da interação elétron-elétron em termos de um campo efetivo médio, como feito na expressão 1.5. A susceptibilidade transversa é dada em termos da média do comutador entre S^+ e S^- ,

$$\chi_{ijkl}^{+-} = \frac{-i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_{ij}^+(t), S_{kl}^-(0)] \rangle \quad (1.51)$$

em que a média dos comutadores é calculada na aproximação HF sem correlação entre os spins \uparrow e \downarrow . Logo

$$\chi_{ijkl}^{HF} = \frac{-i}{\hbar} \Theta(t) [\langle c_{i\uparrow}^\dagger(t) c_{l\uparrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}(t) c_{k\downarrow}^\dagger \rangle - \langle c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}(t) \rangle \langle c_{l\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger(t) \rangle] \quad (1.52)$$

além disso, temos

$$c_{j\downarrow}(t) c_{k\downarrow}^\dagger = c_{j\downarrow}(t) c_{k\downarrow}^\dagger - c_{k\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}(t) \quad (1.53)$$

chegamos a:

$$\chi_{ijkl}^{HF}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)[\langle c_{i\uparrow}^\dagger(t)c_{l\uparrow} \rangle \langle \{c_{i\downarrow}^\dagger(t), c_{k\downarrow}\} \rangle - \langle c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}(t) \rangle \langle \{c_{i\uparrow}^\dagger(t), c_{l\uparrow}\} \rangle] \quad (1.54)$$

Podemos definir a função de Green de uma partícula[22] como

$$G_{mn}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle \{c_{m\sigma}(t), c_{n\sigma}^\dagger\} \rangle. \quad (1.55)$$

Assim substituindo em 1.54

$$\chi_{ijkl}^{HF}(t) = [\langle c_{i\uparrow}^\dagger(t)c_{l\uparrow} \rangle G_{jk}^\downarrow(t) + \langle c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}(t) \rangle G_{il}^\uparrow(t)] \quad (1.56)$$

As funções de correlação em 1.56 também podem ser expressas em termos das funções de Green de uma partícula

$$G_{il}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\{J_{il}^\sigma(t) + J_{li}^{-\sigma}(t)\}, \quad (1.57)$$

em que a função degrau $\Theta(t)$ é definida como

$$\Theta(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{-1}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} d\omega \quad (1.58)$$

Calculando as transformadas de Fourier das funções de correlação, podemos chegar a

$$\tilde{J}_{li}^\sigma(\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} \tilde{J}_{il}(\omega). \quad (1.59)$$

Assim, a função de Green de uma partícula pode ser reescrita como

$$G_{il}^\sigma = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \tilde{G}_{il}^\sigma(\omega) d\omega \quad (1.60)$$

e a sua transformada de Fourier é

$$\tilde{G}_{il}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \tilde{J}_{li}^{\sigma}(\omega_2) \frac{e^{\beta\hbar\omega} + 1}{\omega - \omega_2 + i\eta} \quad (1.61)$$

Para $\tilde{G}_{il}^{-\sigma}$, função de Green avançada, será análogo. A diferença entre a função de Green avançada e retardada será

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{il}^{\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{il}^{-\sigma}(\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \times \\ &\times \tilde{J}_{li}^{\sigma}(\omega_2) (e^{\beta\hbar\omega} + 1) \left(\frac{1}{\omega - \omega_2 + i\eta} - \frac{1}{\omega - \omega_2 - i\eta} \right) \end{aligned} \quad (1.62)$$

Usando

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\eta} = P \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x), \quad (1.63)$$

temos que

$$\tilde{G}_{il}^{\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{il}^{-\sigma}(\omega) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \tilde{J}_{li}^{\sigma} (e^{\beta\hbar\omega} + 1). \quad (1.64)$$

A expressão 1.64 é conhecido como Teorema do Salto e representa a descontinuidade que existe na função de Green sobre o eixo real, como já mencionado anteriormente.

Finalmente, a função de correlação será

$$\tilde{J}_{li}^{\sigma} = i\hbar f(\omega) \{ \tilde{G}_{il}^{\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{il}^{-\sigma}(\omega) \}. \quad (1.65)$$

Em seguida, substituímos na transformada de Fourier temos que

$$\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}(t) \rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} f(\omega) \{ \tilde{G}_{il}^{\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{il}^{-\sigma}(\omega) \} d\omega. \quad (1.66)$$

Substituindo em 1.56, temos que χ_{ijkl}^{HF} tem a forma

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{HF} = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega' f(\omega') \{ & \tilde{G}_{li}^{\uparrow}(\omega) - \tilde{G}_{li}^{-\uparrow}(\omega) \} \tilde{G}_{jk}^{\downarrow}(\omega' + \omega) + \\ & + \{ \tilde{G}_{jk}^{\downarrow}(\omega) - \tilde{G}_{jk}^{-\downarrow}(\omega) \} \tilde{G}_{li}^{-\uparrow}(\omega' - \omega), \end{aligned} \quad (1.67)$$

e a sua transformada de Fourier é

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF}(\vec{q}_{||}, \omega) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N_{||}} \sum_{k_{||}} [& G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{q}_{||} + \vec{k}_{||}, \omega + \omega') - \\ - G_{ij}^{-\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{-\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' - \omega) + & G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{-\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' - \omega) - \\ - G_{ji}^{-\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||} + \vec{q}_{||}, \omega' + \omega)] \end{aligned} \quad (1.68)$$

Essa aproximação não é suficiente para que possamos observar excitações de spin. Ao observar a figura 1, percebemos que não há qualquer informação sobre excitações, ou de modo mais direto, não existe qualquer pico de ressonância indicando a existência de excitação coletiva. Na figura , a parte imaginária da susceptibilidade representa um espectro contínuo de excitações de spin, mas os pontos de excitação não estão claros.

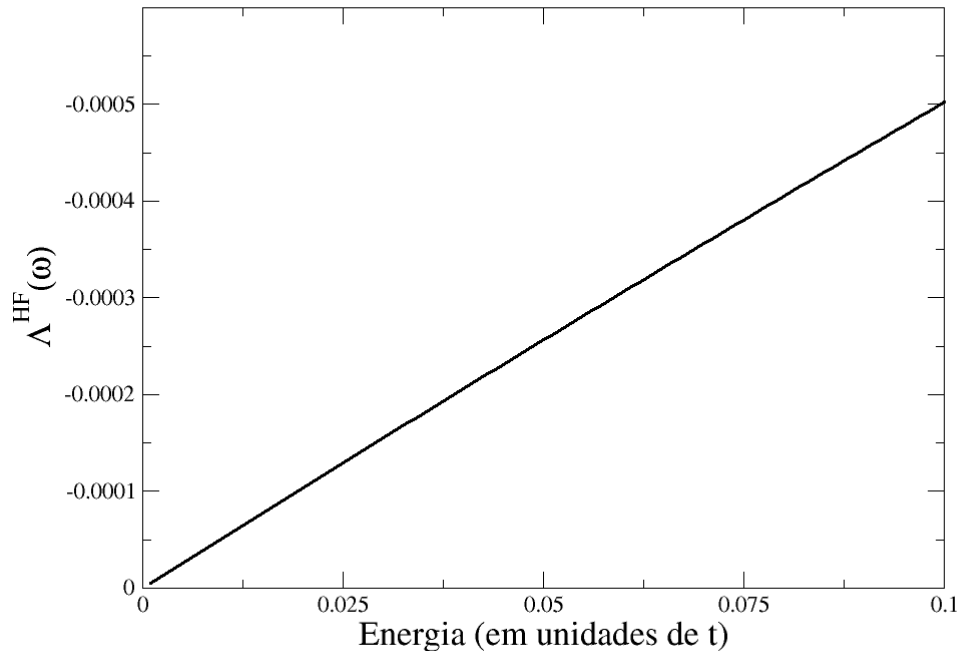


Figura 1: Densidade espectral associada a excitações de Stoner, em que a ausência de picos é assinatura do caráter descorrelacionado desse tipo de excitação. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$

A densidade espectral fornecida pela aproximação Hartree-Fock mostra um contínuo de excitações de partícula independente, compatível com o caráter de campo médio da aproximação. Elétrons em sub-bandas com spins diferentes tem dinâmicas independentes. Sendo assim, o par elétron-buraco criado pelo operador S^- não pode formar um estado ligado. Elétron e buraco de spins opostos propagam-se descorrelacionadamente. Para encontrar excitações correlacionadas é necessário ir além da aproximação HF no cálculo da susceptibilidade transversa. Uma forma de encontrar os espectros de excitações de spin é fazer uma análise na equação de movimento.

Uma forma de levar em conta correlações além de HF no tratamento das excitações de spin é adiar a aproximação de campo médio até a equação de movimento para χ^{+-} , como veremos na seção a seguir.

1.3.4 Susceptibilidade Magnética na Aproximação RPA

Como a aproximação Hartree-Fock não foi suficiente para visualizar os estados excitados temos que buscar uma aproximação melhor.

Vamos, agora, utilizar a aproximação de fases aleatórias[24] (RPA), que é usada para descrever a resposta linear dinâmica de sistemas eletrônicos. Nesta aproximação o produto dos quatro operadores que aparecem na equação de movimento 1.51, será aproximado pelo produto de dois operadores e pelo produto do valor médio dos outros dois operadores, de tal forma que

$$c_i^\dagger c_j c_k^\dagger c_l \approx \langle c_i^\dagger c_j \rangle c_k^\dagger c_l - \langle c_l^\dagger c_l \rangle c_k^\dagger c_j + \langle c_k^\dagger c_l \rangle c_i^\dagger c_j - \langle c_k^\dagger c_j \rangle c_i^\dagger c_l. \quad (1.69)$$

Uma vez que os valores esperados da forma $\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle$ são nulos, temos

$$c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \approx \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \quad (1.70)$$

$$c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \approx \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.71)$$

Substituindo em 1.51,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{ijkl}^{+-}(t) &= \delta(t) \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \delta_{jk} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \delta_{il} \rangle + \\ &+ \sum_{mn} (\delta_{im} t_{jn} - \delta_{jn} t_{mi}) \chi_{mnkl}^{+-}(t) + \\ &+ \sum_{mn} \delta_{im} \delta_{jn} (U_j \langle n_{j\uparrow} \rangle - U_i \langle n_{i\downarrow} \rangle) \chi_{mnkl}^{+-}(t) + \\ &+ \sum_{mn} \delta_{mn} U_m (\delta_{im} \langle c_{m\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle - \delta_{jm} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{m\uparrow} \rangle) \chi_{mnkl}^{+-}(t) \end{aligned} \quad (1.72)$$

Após a transformada de Fourier, podemos perceber que a equação de movimento se tornou um sistema de equações algébricas, por isso é conveniente expressá-las em forma matricial e definir que

$$D_{ijkl} = \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \delta_{jk} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \delta_{il} \rangle \quad (1.73)$$

$$K_{ijkl} = \delta_{ik} t_{jl} - \delta_{jl} t_{ki} \quad (1.74)$$

$$J'_{ijkl} = \delta_{ik} \delta_{jl} (U_j \langle n_{j\uparrow} \rangle - U_i \langle n_{i\downarrow} \rangle) \quad (1.75)$$

$$J_{ijkl} = \delta_{kl} U_k (\delta_{ik} \langle c_{k\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle - \delta_{jk} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} \rangle). \quad (1.76)$$

Escrevendo a equação de movimento em termos das matrizes acima,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi^{+-}(t) = \delta(t) \hat{D} + (\hat{K} + \hat{J}' + \hat{J}) \chi^{+-}(t) \quad (1.77)$$

Vamos utilizar as seguintes transformadas de Fourier

$$\chi^{+-}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} \chi^{+-}(\omega) \quad (1.78)$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} \quad (1.79)$$

temos então que

$$\hbar\omega \chi^{+-}(t) = \delta(t) \hat{D} + (\hat{K} + \hat{J}' + \hat{J}) \chi^{+-}(\omega) \quad (1.80)$$

Então vamos considerar a equação de movimento da susceptibilidade usando o hamiltoniano de Hubbard, o mesmo que já definimos anteriormente, e o comutador com H_{int} será

$$[S_{ij}^+(t), H_{int}^{HF}] = \sum_n U_n [c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}, \langle n_{n\uparrow} \rangle n_{n\downarrow} + \langle n_{n\downarrow} \rangle n_{n\uparrow}] \quad (1.81)$$

$$= \sum_{mn} \delta_{mi} \delta_{mj} (U_j \langle n_{j\uparrow} \rangle - U_i \langle n_{i\downarrow} \rangle) c_{m\uparrow}^\dagger n_{m\downarrow} \quad (1.82)$$

Este termo corresponde à $\sum_{mn} J'_{ijmn} \delta_{mn}$. A equação de movimento na aproximação HF é

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi^{HF}(t) = \delta(t) \hat{D} + (\hat{K} + \hat{J}') \chi^{HF}(t) \quad (1.83)$$

χ^{HF} representa χ^{+-} calculada em teoria monoelétrica, por exemplo aproximação Hartree-Fock[25]. Fazendo uma transformada de Fourier

$$\hbar\omega\chi^{HF}(\omega) = \hat{D} + (\hat{K} + \hat{J}')\chi^{HF}(\omega) \quad (1.84)$$

$$\hbar\omega\chi^{+-}(\omega) = \hat{D} + (\hat{K} + \hat{J}' + \hat{J})\chi^{+-}(\omega) \quad (1.85)$$

logo,

$$\chi^{+-}(\omega) - (\hbar\omega - \hat{K} - \hat{J}')^{-1}\hat{J}\chi^{+-}(\omega) = (\hbar\omega - \hat{K} - \hat{J}')^{-1}\hat{D} \quad (1.86)$$

$$\chi^{HF}\omega = (\hbar\omega - \hat{K} - \hat{J}')^{-1}\hat{D} \quad (1.87)$$

Portanto,

$$\chi^{+-}(\omega) = \chi^{HF}(\omega) + \chi^{HF}(\omega)\hat{P}\chi^{+-}(\omega) \quad (1.88)$$

em que $\hat{D}\hat{P} = \hat{J}'$ e $Pijkl = -U_k\delta_{kl}\delta_{jl}\delta_{ik}$.

Substituindo,

$$\chi_{ij}^{+-}(\omega) = \chi_{ij}^{HF}(\omega) - \sum_m \chi_{im}^{HF}(\omega)U_m\chi_{mj}^{+-}(\omega) \quad (1.89)$$

ou, em forma matricial.

$$\chi^{+-}(\omega) = \chi^{HF}(\omega) - \chi^{HF}(\omega)U\chi^{+-}(\omega) \quad (1.90)$$

Em que $U_m = U_m\delta_{mn}$. Podemos, finalmente, obter a susceptibilidade na RPA em termos da susceptibilidade na aproximação HF.

$$\chi^{+-}(\omega) = [1 + \chi^{HF}(\omega)U]^{-1}\chi^{HF}(\omega) \quad (1.91)$$

Inspecionando a definição de χ^{+-} , percebemos que ela pode ser interpretada como a função de Green do operador que cria excitações de spin, S^- . Sendo assim, os termos

diagonais de sua parte imaginária podem ser interpretados como a densidade espectral de excitações de spin.

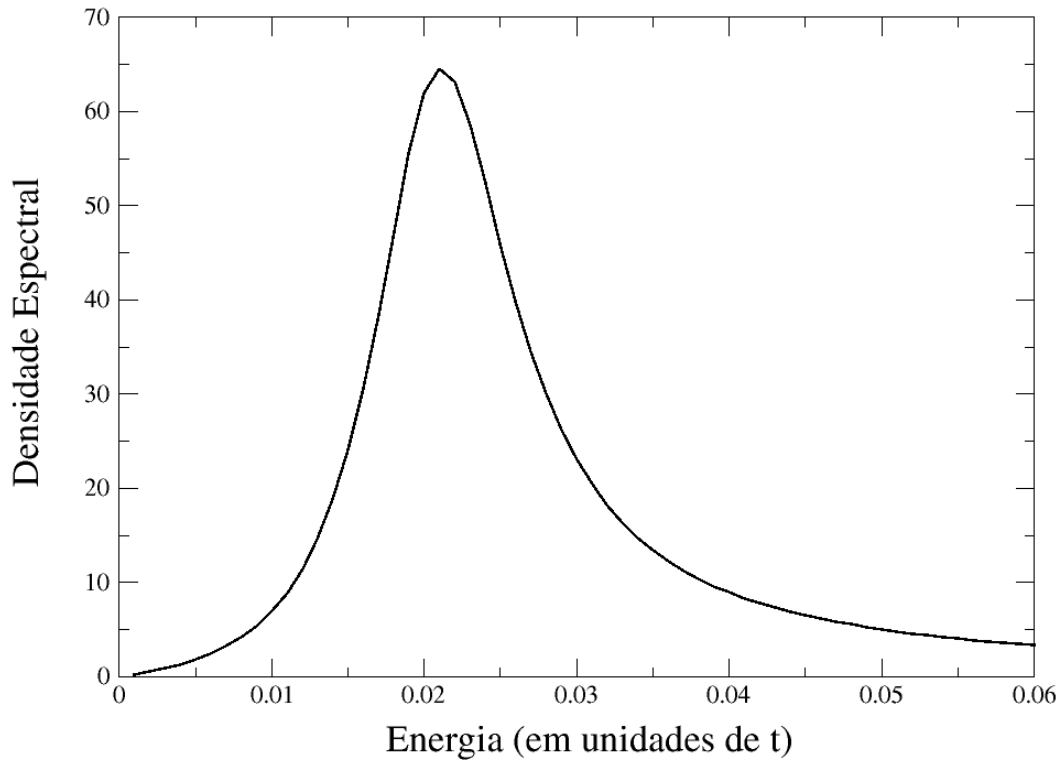


Figura 2: Exemplo da parte imaginária de $\chi^{+-}(\omega, q_x = 0)$. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$. A energia do pico está associada a energia de excitação da onda de spin e a largura é inversamente proporcional ao tempo de vida.

Na figura 2, a parte imaginária representa o espectro de ondas de spin, com uma forma lorentziana. O ponto ω , em que $\chi^{+-}(\omega)$ é máximo, é a energia de excitação da onda de spin e a largura a meia altura é proporcional ao tempo de vida da excitação[26]. Uma propriedade importante é o parâmetro de amortecimento, que também pode ser extraído do espectro de ondas de spin. A razão entre a largura e a energia do pico é definida como o parâmetro de amortecimento.

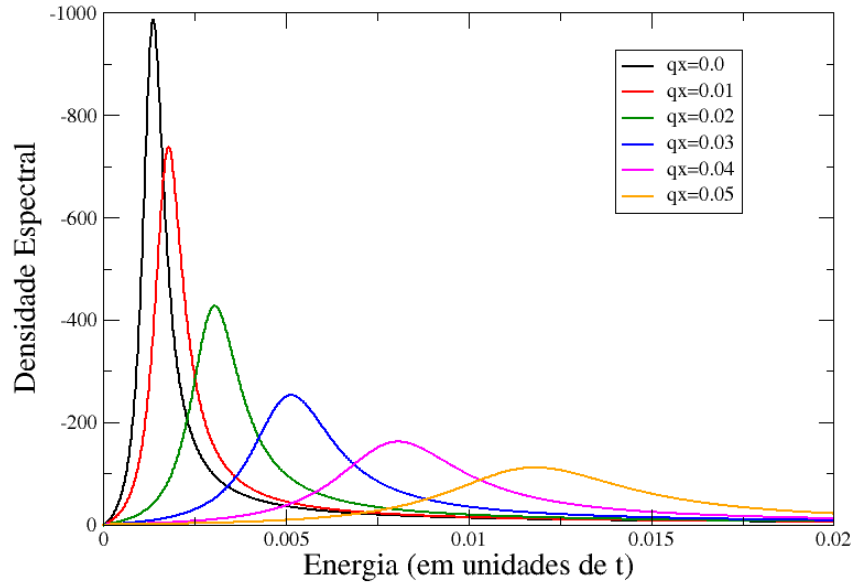


Figura 3: Densidade espectral para vários q 's em um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Com $U = 12$, $E_F = 0.15$, $n = 1.68$ e $\hbar\omega = 10^{-4}$

Em que definimos $\Lambda(\omega) = -\frac{1}{\pi}Im\chi(\omega)$.

Na figura 3, temos a parte imaginária de χ^{+-} plotada para vários valores de \vec{q} . O vetor de onda \vec{q} está escrito em unidades de $\frac{2\pi}{a}$, em que a é o parâmetro de rede.

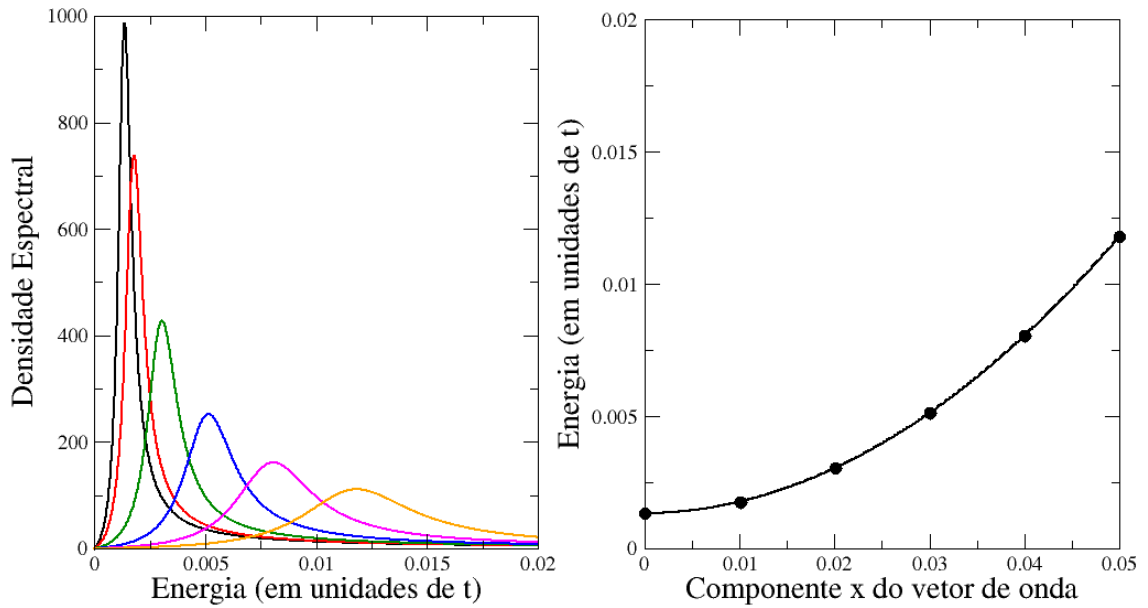


Figura 4: Esquerda: Espectros de excitação de ondas de spin; Direita: Relação de dispersão χ^{+-} em função do vetor de onda \vec{q} . O ponto $q_x = 0$ está associado ao campo magnético externo.

Uma propriedade importante é que quanto maior o vetor de onda \vec{q} , maior é a energia de excitação da onda de spin e menor é o tempo de vida. A relação entre χ^{+-} e \vec{q} , obedece uma relação de dispersão que, para valores de q pequenos, tem a forma $\chi^{+-}(q) = Dq^2$ [17]. O parâmetro D é denominado *stiffness* [27] (rigidez), como mostrado na figura 4

2 Efeitos de desordem sobre as excitações de spin: teorias de meio efetivo

No crescimento de amostras reais de materiais, o surgimento de defeitos é inevitável. Nenhuma amostra real é perfeitamente cristalina. Nessa tese, estudamos o espectro de excitações de spin de filmes magnéticos depositados em substratos não-magnéticos. Dos vários tipos de defeitos possíveis nesses sistemas, estamos interessados, em especial, nos relacionados à interdifusão de átomos entre o substrato e o filme magnético. Esse tipo de defeito pode ser modelado teoricamente com relativa facilidade e deve ter efeitos importantes sobre as propriedades magnéticas do filme.

A forma mais simples de modelar o resultado da interdifusão de um átomo do substrato (não-magnético) para o filme magnético é considerar impurezas substitucionais não-magnéticas no filme magnético. Elas devem afetar a magnetização do filme e as interações entre os momentos magnéticos do filme. Portanto, devem afetar as características das ondas de spin que se propagam ao longo do filme.

Como já vimos no capítulo anterior, o espectro de excitações de spin pode ser obtido a partir da análise da susceptibilidade dinâmica transversa. Esta, por sua vez, pode ser escrita em termos de funções de Green monoelétrônicas do sistema em questão. Na verdade, uma grande quantidade de grandezas mensuráveis pode ser escrita em termos de funções de Green monoelétrônicas. Sendo assim, em última análise, para determinar o efeito da desordem sobre o espectro de excitações de spin do filme magnético, com impurezas substitucionais não-magnéticas, precisamos calcular as funções de Green monoelétrônicas do sistema com impurezas.

A forma tradicional de calcular o efeito de desordem sobre as funções de Green monoelétrônicas é aproximá-las usando as funções de Green de um meio efetivo cristalino equivalente. Essa aproximação envolve o conceito de média configuracional. Como, em

princípio, cada configuração de impurezas no sistema é aleatória, faz mais sentido calcular as propriedades físicas de sistemas desordenados por médias sobre um *ensemble* de configurações de impurezas, ao invés de se analisar uma configuração em particular.

Uma das técnicas de meio efetivo mais utilizadas no cálculo de propriedades eletrônicas de materiais é a aproximação do potencial coerente (CPA) [28]. A ideia central desta aproximação é expressar o hamiltoniano do meio efetivo incluindo uma autoenergia, que é convenientemente determinada para representar os efeitos da desordem. Cada Função de Green em CPA é reescrita introduzindo uma autoenergia $\Sigma(z)$,

$$G(z) = (z - \mathcal{H})^{-1} = (z - H_0 - \Sigma(z))^{-1}. \quad (2.1)$$

Essa autoenergia carrega todas as informações das configurações e dos efeitos de desordem na função de Green. A autoenergia é invariante sob operações de translação.

O hamiltoniano original pode ser reescrito adicionando e subtraindo um potencial de referência, pois o hamiltoniano também é invariante translacional.

$$\tilde{V}(z) = \sum_n V_n(z) \quad (2.2)$$

Substituindo no hamiltoniano, escrevemos:

$$H = [H_0 + \tilde{V}(z)] + \sum_n [V_n - V_n(z)] \quad (2.3)$$

$$H = \tilde{H}(z) + v(z) \quad (2.4)$$

em que $v(z) = \sum_n v_n(z)$ descreve o espalhamento relativo a uma média de referência não-hermitiana e periódica.

Utilizando a função de Green livre,

$$\tilde{G} = [z - \tilde{H}(z)]^{-1} \quad (2.5)$$

É possível escrever g em função de \tilde{G} ,

$$g(z) = [z - \tilde{H} - v]^{-1} \quad (2.6)$$

$$= \tilde{G} + \tilde{G}vg \quad (2.7)$$

$$= \tilde{G} + \tilde{G}t\tilde{G}. \quad (2.8)$$

Em que $t = v + v\tilde{G}v\tilde{G}v$. Fazendo $\langle t \rangle = T(z)$,

$$G(z) = \tilde{G}(z) + \tilde{G}(z)T(z)\tilde{G}(z). \quad (2.9)$$

Sendo a função $G(z)$ conhecida, temos:

$$(z - H_0 - \Sigma(z))^{-1} = \tilde{G}(z) + \tilde{G}(z)T(z)\tilde{G}(z). \quad (2.10)$$

A equação acima, invertida fica:

$$\Sigma(z) = \tilde{V} + T(1 + \tilde{G}T)^{-1}. \quad (2.11)$$

A primeira parcela é exatamente a aproximação inicial e a segunda representa os efeitos de impureza na média configuracional.

$$\Sigma(z) = \tilde{V} + \tilde{\Sigma}(z). \quad (2.12)$$

A Função de Green $G(z) = (z - H_0 - \Sigma(z))^{-1}$ também pode ser escrita por $G(z) = (z - \tilde{H} - \tilde{\Sigma}(z))^{-1}$.

Como exemplo, vamos considerar uma matriz B,

$$\tilde{V}_n(z) = V_n^B. \quad (2.13)$$

Se no sítio n for preenchido com átomos do tipo A, $V_n = 0$, sendo a concentração de

A igual a x .

$$T \approx x \sum_n t_n^A \quad (2.14)$$

e,

$$t_n^A = [1 - (V_n^A - V_n^B)G_B]^{-1}(V_n^A - V_n^B). \quad (2.15)$$

A auto-energia será

$$\Sigma(z) = \sum_n [V_n^B + xt_n^A]. \quad (2.16)$$

A autoenergia, representada na expressão 2.16, deve ser inserida na função de Green e de modo direto teremos a função de Green calculada na média configuracional. Nas próximas seções veremos como podemos calcular a matriz t_n .

2.1 Aproximação de Impurezas Isoladas

Uma primeira aproximação de tratar as impurezas substitucionais é considerar que não existe efeito de espalhamentos múltiplos. Por isso, na aproximação de impurezas isoladas, é conveniente aproximar o operador $T(z)$ utilizando as formas explicitas da autoenergia $\Sigma(z)$, na forma autoconsistente ou não-autoconsistente, que veremos nas seções futuras.

$$T(z) = \sum_n \langle \tau_n \rangle \quad (2.17)$$

e

$$\langle \tau_n \rangle = \langle t_n \rangle [1 + \tilde{G} \sum_{m \neq n} \langle \tau_m \rangle] + \langle (t_n - \langle t_n \rangle) \tilde{G} \sum_{m \neq n} (\tau_m - \langle \tau_m \rangle) \rangle \quad (2.18)$$

em que,

$$\langle t_n \rangle = xt_n^A + yt_n^B \quad (2.19)$$

é o operador espalhamento médio associado a cada sítio. Nessa aproximação, as flutuações, representadas no segundo termo de 2.18, podem ser desconsideradas.

$$\langle \tau_n \rangle = \langle t_n \rangle [1 + \tilde{G} \sum_{m \neq n} \langle t_m \rangle]. \quad (2.20)$$

Usando o fato que $\sum_{m \neq n} \langle t_m \rangle = T - \langle t_n \rangle$, temos:

$$\langle \tau_n \rangle = [1 + \langle t_n \rangle \tilde{G}]^{-1} \langle t_n \rangle [1 + \tilde{G}T]. \quad (2.21)$$

usando 2.61 e 2.19.

$$\sigma(z) \equiv \tilde{V}(z) + \tilde{\Sigma}(z) \quad (2.22)$$

$$= \sum_n \tilde{V}(z) + [1 + \langle t_n \rangle \tilde{G}]^{-1} \langle t_n \rangle \quad (2.23)$$

$$\equiv \tilde{V}_n(z) + \tilde{\sigma}_n(z) \quad (2.24)$$

$$= \sum_n \tilde{\sigma}_n \quad (2.25)$$

Essa relação é exata na aproximação de impurezas isoladas. Se algum $\tilde{V}(z)$ razoável é conhecido, as matrizes de espalhamento simples podem ser calculadas e essa relação representa o resultado final.

Com esse quadro não-autoconsistente, o segundo termo nessa relação é simplesmente o potencial efetivo correspondendo às médias das matrizes t ,

$$\langle t_n \rangle = [1 - \tilde{\sigma}_n \tilde{G}]^{-1} \tilde{\sigma}_n. \quad (2.26)$$

Essa equação representa a aproximação da matriz t média, ou simplesmente, ATA. Uma outra situação possível é autoconsistente que é conhecida por aproximação do potencial coerente, ou CPA. A condição fundamental para a autoconsistência é:

$$\langle t_n[\tilde{V}(z)] \rangle = 0 \quad (2.27)$$

quando a média da variação da matriz t em função do potencial de referência for zero.

Podemos, devido a periodicidade, considerar as médias no sítio de ordem zero. Na CPA, $\tilde{V}(z)$ é obtido autoconsistentemente da condição 2.27, sendo mais preciso que a ATA.

Para obtermos as contribuições separadas de A e B, calcula-se as médias sobre as possíveis configurações de todos os sítios, exceto em $n = 0$.

$$\langle g \rangle_{0=A} = \tilde{G} + \tilde{G} \langle \tau \rangle_{0=A} \tilde{G} \quad (2.28)$$

e

$$\langle \tau \rangle_{0=A} = \langle \tau_0 \rangle_{0=A} + \sum_{n \neq 0} \langle \tau_n \rangle_{0=A} \quad (2.29)$$

$$= t_0^A [1 + \tilde{G} \sum_{n \neq 0} \langle \tau_n \rangle_{0=A}] + \sum_{n \neq 0} \langle \tau_n \rangle_{0=A}. \quad (2.30)$$

Nessa aproximação, cada átomo é tratado como um conjunto de médias e assim podemos fazer:

$$\langle \tau_n \rangle_{0=A} \rightarrow \langle \tau_n \rangle \quad (2.31)$$

com $n \neq 0$.

O operador $\langle \tau_n \rangle_{0=A}$ fica reduzido a

$$\langle \tau_n \rangle_{0=A} = t_0^A [1 + \tilde{G} \sum_{n \neq 0} \langle \tau_n \rangle] \quad (2.32)$$

$$= t_0^A \langle t_0 \rangle^{-1} \langle \tau_0 \rangle \quad (2.33)$$

$$= \langle \tau_0 \rangle + y(t_0^A + t_0^B) \langle t_0 \rangle^{-1} \langle \tau_0 \rangle \quad (2.34)$$

e então,

$$\langle \tau \rangle_{0_A} = \langle \tau \rangle + y(t_0^A + t_0^B) \langle t_0 \rangle^{-1} \langle \tau_0 \rangle \quad (2.35)$$

$$\langle \tau \rangle_{0_B} = \langle \tau \rangle - x(t_0^A + t_0^B) \langle t_0 \rangle^{-1} \langle \tau_0 \rangle \quad (2.36)$$

No ATA (não autoconsistente) \tilde{G} , $t_0^{A(B)}$ e, $\langle \tau_0 \rangle$ são conhecidos e as equações são suficientes. No CPA (autoconsistente), $\langle t_n \rangle$ e $\langle \tau_n \rangle$ desaparecem e $\langle g \rangle_{0=A(B)}$ se reduz a

$$\langle g \rangle_{0=A(B)} = \tilde{G} + \tilde{G} t_0^{A(B)} \tilde{G} \quad (2.37)$$

$$= [1 - \tilde{G}(V_0^{A(B)} - \tilde{V}_0)]^{-1} \tilde{G} \quad (2.38)$$

2.1.1 Um Orbital por Sítio

Conforme mencionado no capítulo 1, neste trabalho descrevemos a contribuição de banda para o hamiltoniano eletrônico através de um modelo tight-binding com um orbital por sítio

$$H = \sum_{n,n \neq m} |n\rangle h_{nm} \langle m| + \sum_n |n\rangle \varepsilon_n \langle n| \quad (2.39)$$

$$H = H_0 + v \quad (2.40)$$

ε_n pode ter valores ε_A ou ε_B dependendo de quem ocupa o sítio n . As integrais de hopping são independentes se assumimos que os cristais puros A e B tem a mesma largura de banda.

Logo é útil expressar ε_A e ε_B em termos de ω e definir o zero de energia.

$$\varepsilon_A = \frac{1}{2} \omega \delta \quad (2.41)$$

$$\varepsilon_B = -\frac{1}{2} \omega \delta \quad (2.42)$$

$$\delta = \frac{1}{\omega} (\varepsilon_A - \varepsilon_B) \quad (2.43)$$

Assim, para um dado H_0 , só precisamos de dois parâmetros, x e δ , concentração e

separação dos níveis atômicos, respectivamente.

2.2 A Liga Diluída

A aproximação de liga diluída consiste em considerar um cristal perfeito formado apenas por átomos do tipo B e introduzir no sítio 0 um átomo do tipo A em substituição ao do tipo B.

$$H = H_0 + \sum_n |n\rangle \varepsilon_B \langle n| + |0\rangle (\varepsilon_A - \varepsilon_B) \langle 0| \quad (2.44)$$

$$H = H_B + |0\rangle \delta \langle 0| \equiv H_B + v \quad (2.45)$$

Dessa forma, podemos escrever a Função de Green como:

$$G = (z - H)^{-1} = G_B + G_B v G \quad (2.46)$$

$$= G_B + G_B t_0 G_B \quad (2.47)$$

Escrevendo a Função de Green para a rede B.

$$G_B = (z - H_B)^{-1} = G_0(z - \varepsilon_B) \quad (2.48)$$

$$t_0 = (1 - v G_B)^{-1} v_0 = v_0 + v_0 G_B t_0 \quad (2.49)$$

$$t_0 = |0\rangle t(z) \langle 0| \quad (2.50)$$

em que,

$$t(z) = \delta(1 - \delta F_B(z))^{-1} \quad (2.51)$$

$$F_B(z) = \langle 0| G_B(z) |0\rangle = F_0(z - \varepsilon_B) \quad (2.52)$$

A alteração percebida na densidade de estados (DOS) total é dada por

$$\Delta\tilde{g}(E) = N[g(E) - g_B(E)] \quad (2.53)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{ImTr}(G_B t_0 G_B) \quad (2.54)$$

$$= -\frac{\delta g'_B(1 - \delta I_B) + \delta I'_B g_B}{(1 - \delta I_B)^2 + (\delta \pi g_B)^2} \quad (2.55)$$

Para grandes valores de $|\delta|$ a impureza pode alcançar estados ressonantes ou estados ligados. As condições

$$1 - \delta I_B(E_r) = 0 \quad (2.56)$$

e

$$\Gamma_r \equiv \frac{|\pi g_B(E_r)|}{|I'_B(E_r)|} \quad (2.57)$$

$$U|E_r| \quad (2.58)$$

são satisfeitas e a variação na DOS se torna

$$\Delta\tilde{g}(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_r}{[(E - E_r)^2] + \Gamma_r^2} \quad (2.59)$$

O estado ligado é dado por

$$E_b \approx \varepsilon_B + \delta \quad (2.60)$$

Sendo a concentração de A muito pequena ($x \ll 1$).

$$\Sigma(z) = \varepsilon_B + xt(z) \quad (2.61)$$

$\Sigma(z)$ é diagonal na representação de Wanier, e a DOS fica sendo:

$$g(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_0[E^+ - \varepsilon_B - xt(E^+)] \quad (2.62)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_B[E^+ - xt(E^+)] \quad (2.63)$$

É possível notar que a célula localizada sobre o potencial aleatório $v_n(z) = |n\rangle[\varepsilon_n - \tilde{V}(z)\langle n|$ implica que o potencial espalhador $t_n(z)$ pode ser calculado em termos da matriz diagonal $\tilde{G}(z)$.

$$t_n(z) = |n\rangle\tau_n(z)\langle n| \quad (2.64)$$

em que,

$$\tau_n(z) = \frac{[\varepsilon_n - \tilde{V}]}{1 - [\varepsilon_n - \tilde{V}(z)]\tilde{G}(z)} \quad (2.65)$$

a média do operador espalhamento é então

$$\langle t_n \rangle = |n\rangle \left[\frac{x(\varepsilon_A - \tilde{V})}{1 - [\varepsilon_A - \tilde{V}]\tilde{G}} + \frac{y(\varepsilon_B - \tilde{V})}{1 - [\varepsilon_B - \tilde{V}]\tilde{G}} \right] \langle n| \quad (2.66)$$

Voltando ao resultado geral na expressão 2.61, $\Sigma(z)$ é dado por

$$\Sigma(z) = \tilde{V}(z) + \frac{\langle \tau(z) \rangle}{1 + \tilde{G}(z)\langle \tau(z) \rangle} \quad (2.67)$$

Podemos utilizar a expressão das equações 2.66 e 2.67 para calcular a DOS tanto na ATA quanto na CPA. Para o cálculo no ATA é necessário apenas um passo e para realizar o cálculo no CPA, mais de um passo é necessário até que a auto-energia atinja a convergência.

Na figura abaixo, calculamos a DOS para um filme magnético fino nas duas aproximações.

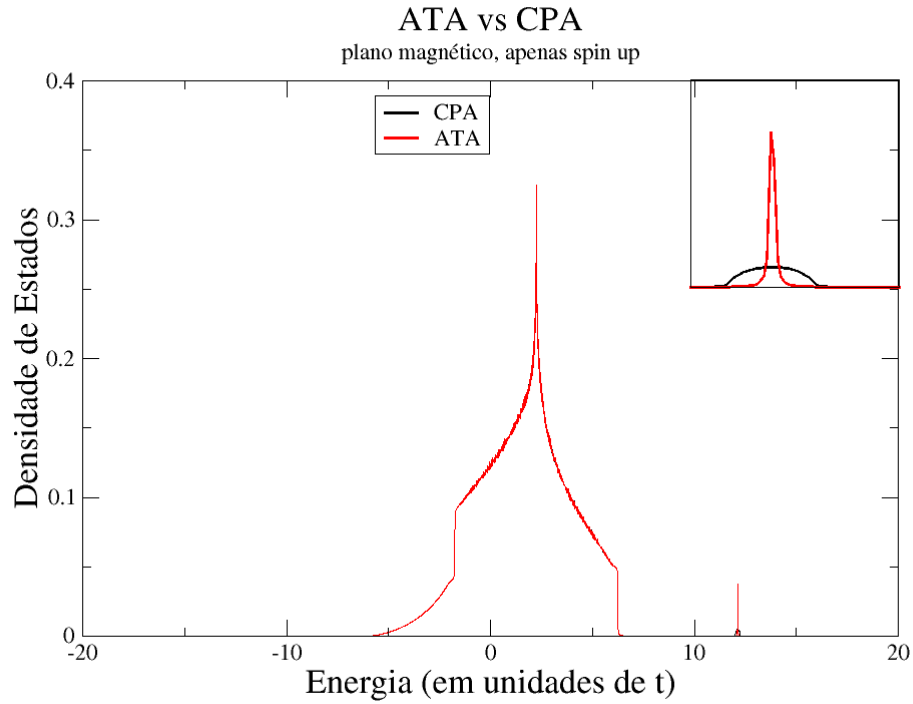


Figura 5: Comparação do cálculo via CPA e e via ATA para DOS spin up, para um plano magnético sobre um substrato metálico. O quadro superior é a região próxima a $\omega = 12$

Observe que o resultado em CPA é um conjunto contínuo de vários estados em um intervalo de energia muito bem definido e em ATA existe apenas um estado ligado. Com isso vemos quais os estados possíveis em cada energia de uma maneira mais precisa, tornando a CPA uma aproximação muito melhor que a ATA.

O cálculo da autenergia $\Sigma(\omega)$ também foi feito e está apresentado na figura 6.

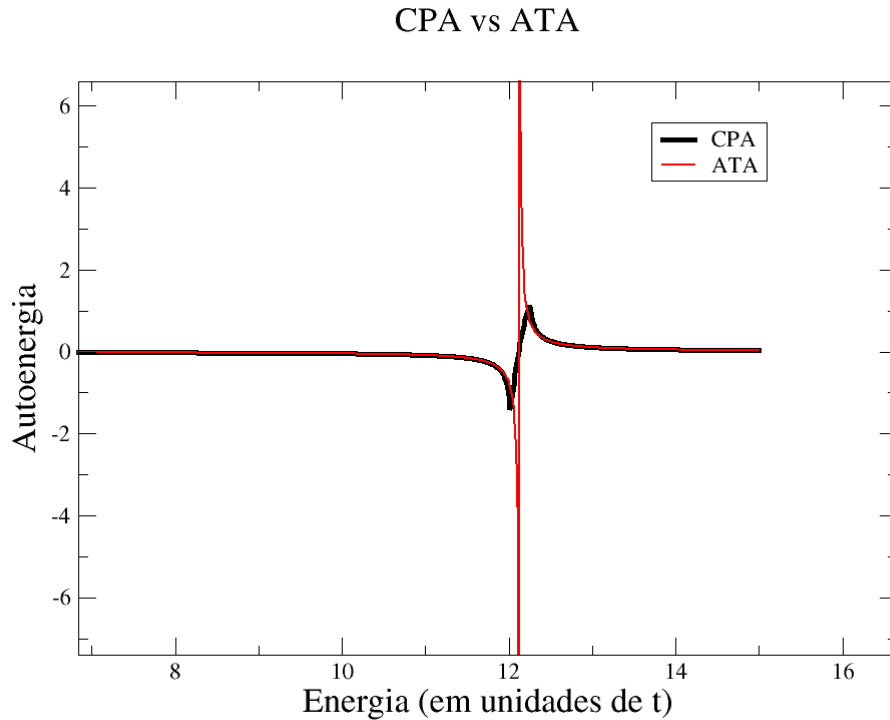


Figura 6: Comparando cálculo via CPA e ATA para a autoenergia, para um plano magnético, sobre um substrato metálico.

Qualitativamente, temos o mesmo resultado do cálculo feito para a DOS. O estado ligado que aparece é muito melhor descrito na CPA do que em ATA. Porque conseguimos ver quais estados possíveis em um intervalo de energia com mais precisão, do que em um único ponto. Observe que o acoplamento do estado ligado (discreto) com a DOS (contínuo) é suave em CPA e, em ATA, aparenta ser um único estado com grande divergência. Isso ocorre pelo fato de que a CPA ocorre depois de um processo autoconsistente que busca o melhor resultado possível. O ATA é um passo único e pode ser interpretado como o primeiro passo CPA. Isso não garante um bom resultado ao ATA.

Na próxima seção serão mostrados os resultados calculados em CPA.

2.3 Resultados e Discussão

Nosso trabalho agora é calcular a função $\chi^{RPA}(\vec{q})$ na aproximação CPA e obter as propriedades de ondas de spin.

A função $\chi^{RPA}(\vec{q})$ é escrita, como já foi visto,

$$\chi^{RPA}(\omega) = [1 + \chi^{HF}(\omega)U]^{-1}\chi^{HF}(\omega) \quad (2.68)$$

e

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF}(\vec{q}_{||}, \omega) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N_{||}} \sum_{k_{||}} [& G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{q}_{||} + \vec{k}_{||}, \omega + \omega') - \\ & - G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' - \omega) + G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' - \omega) - \\ & - G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||} + \vec{q}_{||}, \omega' + \omega)]. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Inspecionando a equação que define χ^{RPA} , vemos que para calcular sua média configuracional é necessário calcular a média configuracional de um funcional não-linear de χ^{HF} . Será necessário adotar alguma aproximação para relacionar esse cálculo com o da média configuracional de χ^{HF} . Trataremos disso mais tarde. Vamos primeiro analisar o cálculo da média configuracional de χ^{HF} .

Nossa modelagem para o cálculo em CPA é considerar um potencial de referência que seja dado por

$$\tilde{V}^{\sigma} = x\varepsilon_a^{\sigma} + y\varepsilon_b^{\sigma}. \quad (2.70)$$

Em que ε_a^{σ} é a energia de sítio para as impurezas, ε_b^{σ} é a energia para os sítios cristalinos e σ representa índice de spin. $\varepsilon_a^{\sigma} = \varepsilon_0 + \delta_0$ terão valores simétricos para spin *up* ou *down*, pois estaremos considerando impurezas não magnéticas e $\delta_0 = \pm \frac{Um}{2}$. $\varepsilon_b^{\sigma} = \varepsilon_0 \pm \frac{Um}{2}$. ε_0 é a energia de sítio para o substrato, U é a interação coulombiana e $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ é a magnetização. $\Sigma(\omega)$ e m são obtidos pelo processo autoconsistente descrito no apêndice A. Cada matriz t_n^{σ} é calculada de acordo com a equação 2.15 e a autoenergia $\Sigma(\omega)$ de acordo com a equação 2.67. t_n^{σ} e $\Sigma(\omega)$ são calculados autoconsistentemente utilizando os valores obtidos de $\Sigma(\omega)$ e m , até atingir a convergência.

A partir de agora, e em todos os capítulos, utilizaremos os parâmetros $E_F = 0.15$, $U = 12$ e $n = 1.68$. O *hopping* entre o substrato e a camada magnética é $t' = 0.5t$.

Escrevemos a função de Green em CPA, temos

$$\tilde{G}^\sigma(\omega) = G^\sigma(\omega) + \Sigma^\sigma(\omega). \quad (2.71)$$

Após o estado fundamental ser recalculado em CPA, também calculamos a susceptibilidade de spin em CPA utilizando a equação 2.69. O cálculo em ATA é feito utilizando o primeiro passo da CPA.

No figura abaixo, calculamos o $\chi^{RPA}(\vec{q})$ para um $\vec{q} = 0.01\hat{x}$ bem definido e para várias concentrações de impurezas x .

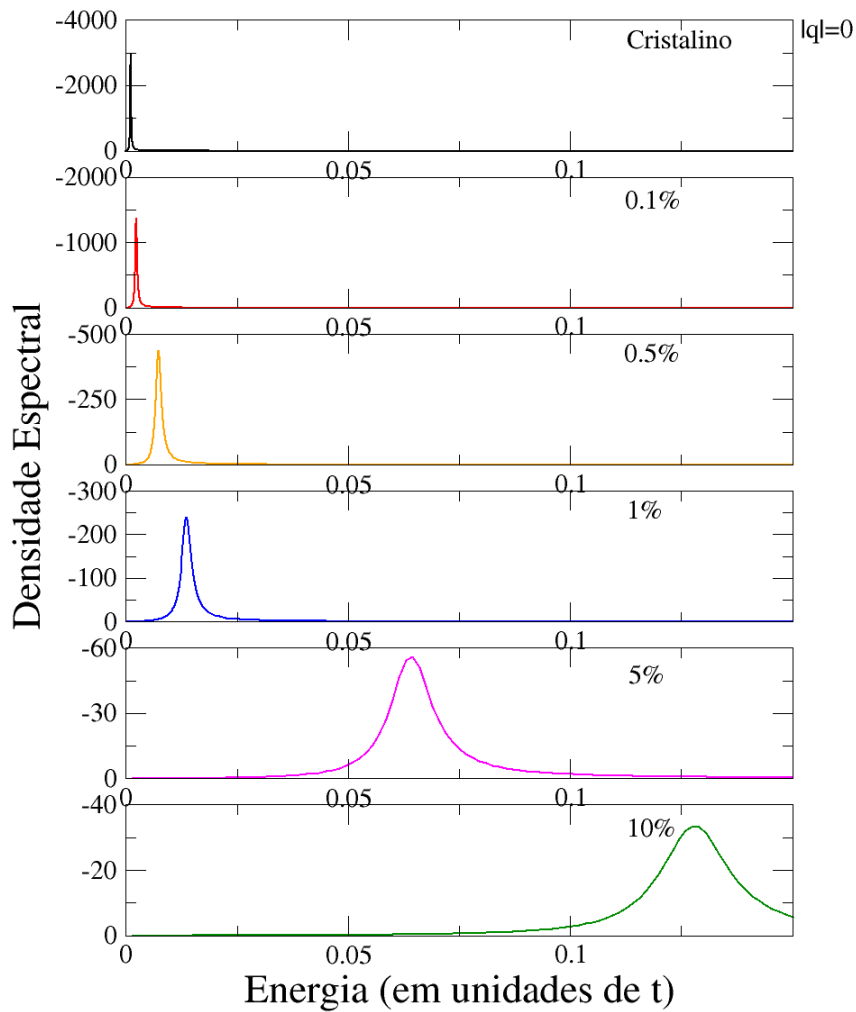


Figura 7: Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0$.

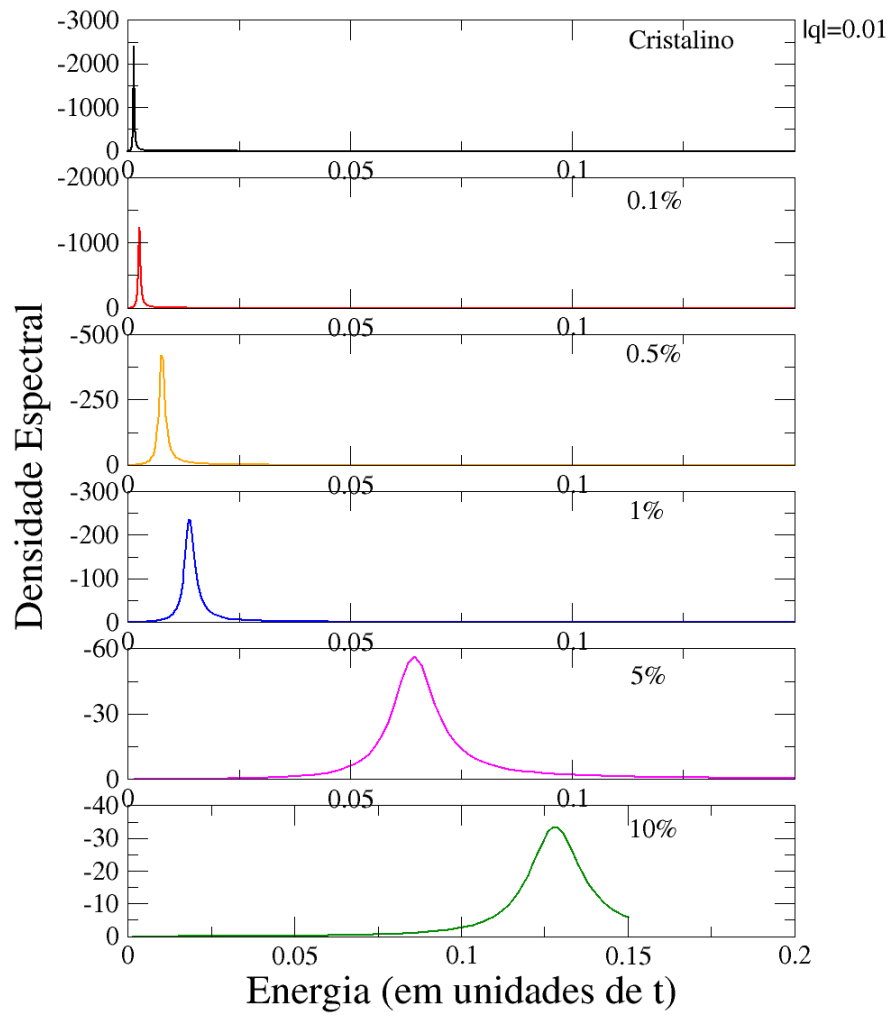


Figura 8: Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0.01$.

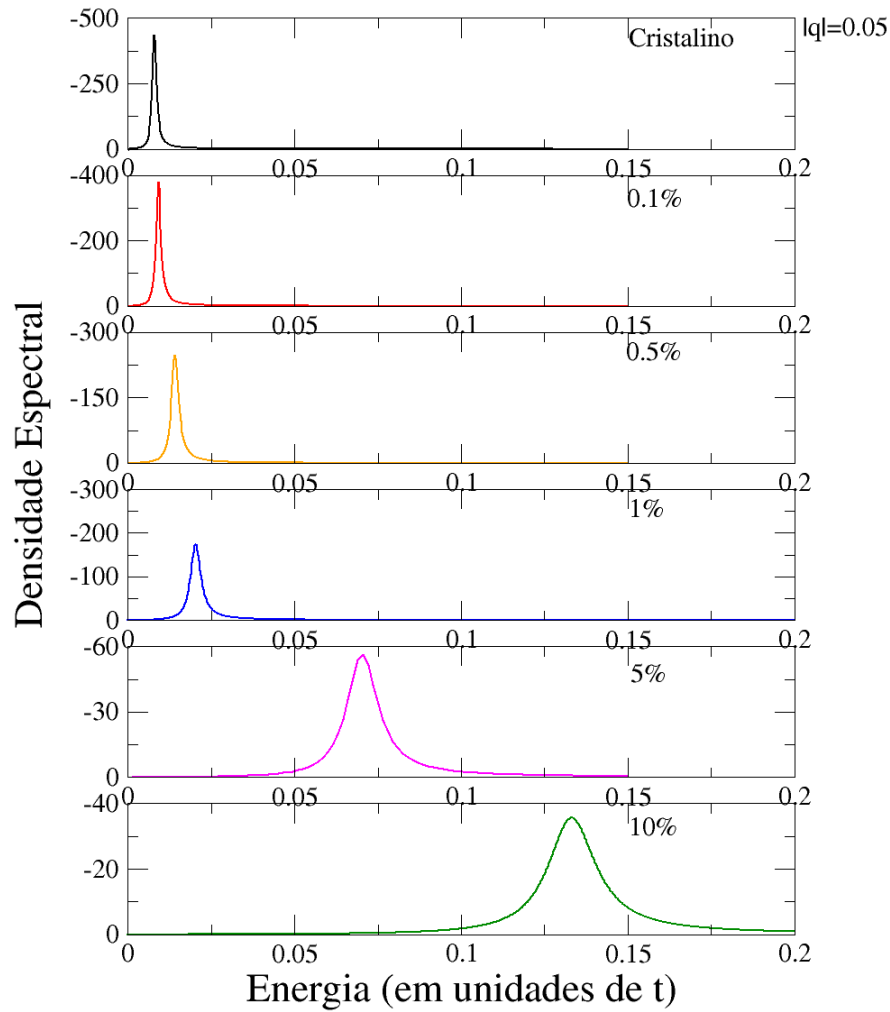


Figura 9: Densidades espectrais obtidas em várias concentrações para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. Cálculo realizado em CPA, com $q_x = 0.05$.

Temos uma situação situação contra-intuitiva, em que uma concentração de cerca de 0.1% de impurezas seria capaz de causar um efeito de aumento da ordem de 10% na energia de excitação. E, em casos um pouco diferentes, para $x = 10\%$, essa aumento atinge patamares da ordem de 1000%.

De acordo com Ehrenreich[28], no CPA é possível atingir concentrações de 10% com bons resultados. Porém percebemos alguns discrepâncias. Para $q_x = 0$, a diferença entre o sistema cristalino e o desordenado chega a 1000%, quanto que ao $q_x = 0.05$, a diferença atinge 70%. Tal discrepância intuitiva não pode ser real.

Esse comportamento não é comumente observado em filmes de materiais magnéticos, que costumam ser bem descritos pelo modelo que utilizamos. Uma suspeita é que o intervalo de concentrações para o qual a CPA é aplicável ao cálculo de propriedades

dinâmicas seja mais restrito que aquele para a determinação de propriedades de equilíbrio. Para verificar essa hipótese realizamos cálculos com concentrações extremamente baixas de impurezas. Os resultados estão apresentados na figura 10. Note que, mais uma vez, a variação da energia de excitação é relativamente grande para variações de concentração muito pequenas.

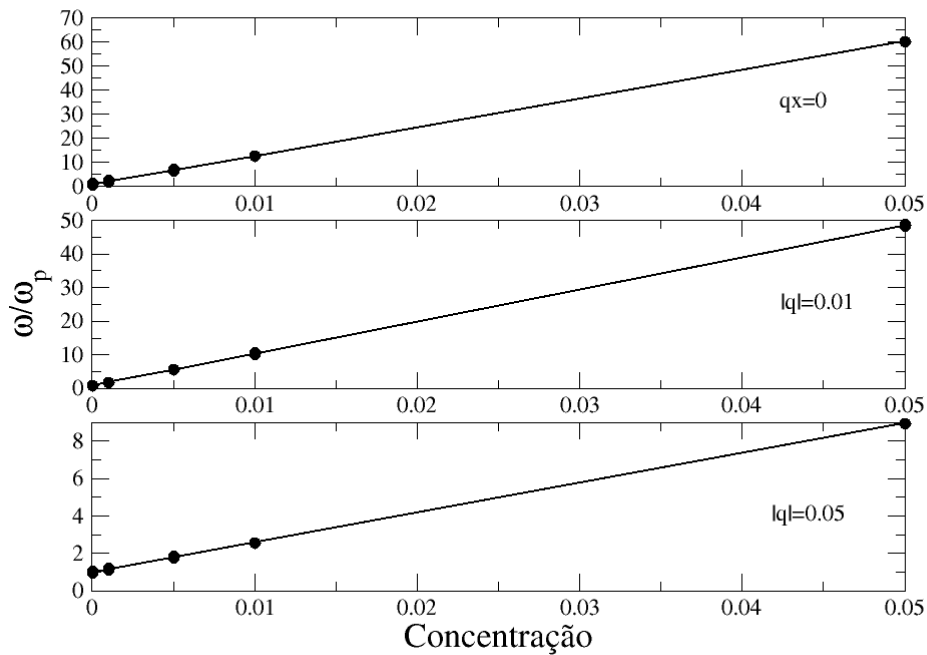


Figura 10: Energia de excitação em função da concentração de impurezas para um filme fino sobre um substrato metálico não-magnético. O cálculo foi realizado somente em CPA.

Mais uma vez observamos que a energia de excitação muda muito entre cada concentração de impurezas. Enquanto que para $x = 0.01\%$ a energia de excitação ocorre em aproximadamente $\omega = 0.002$ e, para $x = 5\%$, a energia é em $\omega = 0.06$. Nosso resultado esperado para essa configuração é de que uma concentração tão pequena quanto $x = 0.01\%$ não poderia causar efeitos tão drásticos para a susceptibilidade de spin. Esse é um resultado fisicamente contra-intuitivo.

Nesse ponto é importante relembrar a sequência de aproximações que adotamos para obter os resultados que acabamos de analisar. Primeiramente, adotamos a aproximação $\langle \chi^{HF} \chi^{RPA} \rangle \approx \langle \chi^{HF} \rangle \langle \chi^{RPA} \rangle$, que nos permitiu resolver a equação RPA numa forma idêntica à de um sistema cristalino com a susceptibilidade HF substituída pela sua média configuracional. Em seguida, adotamos a CPA para calcular $\langle G \rangle$ e fizemos a aproximação

$\langle GG \rangle = \langle G \rangle \langle G \rangle$ no cálculo da média configuracional de χ^{HF} . É difícil avaliar a qualidade de cada aproximação dessas, sobretudo a qualidade desta combinação de aproximações. Sendo assim, vamos adotar duas outras abordagens. Uma delas corresponde a tratar exatamente o efeito de uma única impureza sobre χ^{HF} . Com isso, poderemos avaliar a qualidade da aproximação $\langle GG \rangle = \langle G \rangle \langle G \rangle$ no cálculo de χ^{HF} em CPA. Essa abordagem será apresentada no próximo capítulo. Em seguida, apresentaremos o cálculo de χ^{RPA} de um sistema desordenado no espaço real, sem nenhuma aproximação. Isso nos permitirá avaliar o efeito da aproximação $\langle \chi^{HF} \chi^{RPA} \rangle = \langle \chi^{HF} \rangle \langle \chi^{RPA} \rangle$ sobre a solução da equação RPA.

3 *Efeito de uma única impureza sobre χ^{HF}*

No capítulo anterior, vimos que quando os efeitos de desordem são tratados numa aproximação de meio efetivo como a CPA, uma concentração muito pequena de impurezas seria capaz de gerar efeitos drásticos, aparentemente incompatíveis com perturbações tão pequenas. Identificamos duas aproximações que poderiam ser responsáveis por esse comportamento anômalo: substituir $\langle GG \rangle$ por $\langle G \rangle \langle G \rangle$ no cálculo de χ^{HF} e substituir $\langle \chi^{HF} \chi^{RPA} \rangle$ por $\langle \chi^{HF} \rangle \langle \chi^{RPA} \rangle$ na equação RPA. Neste capítulo, vamos avaliar os efeitos da primeira aproximação no limite de uma única impureza.

Nesse tipo de sistema desordenado perdemos a simetria de translação do cristal ao introduzir qualquer grau de desordem. Sendo assim, o vetor de onda de Bloch não é mais um bom número quântico e as susceptibilidades de spin, em princípio, são matrizes em \vec{k} e \vec{k}' . O que significa, entre outras propriedades, que um campo externo espacialmente harmônico com vetor de onda \vec{k} vai produzir resposta não nula com todos os outros \vec{k}' possíveis e não somente com $\vec{k}' = \vec{k}$.

Vamos usar a expressão conhecida para o χ_{ij}^{HF} ,

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF} = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega' f(\omega') \{ & \tilde{G}_{ji}^{\uparrow}(\omega) - \tilde{G}_{ji}^{-\uparrow}(\omega) \} \tilde{G}_{ij}^{\downarrow}(\omega' + \omega) + \\ & + \{ \tilde{G}_{ij}^{\downarrow}(\omega) - \tilde{G}_{ij}^{-\downarrow}(\omega) \} \tilde{G}_{ji}^{-\uparrow}(\omega' - \omega), \end{aligned} \quad (3.1)$$

Nosso trabalho agora é obter uma expressão exata para G_{ij}^{σ} quando colocamos uma única impureza em um filme magnético. O valor encontrado para G_{ij}^{σ} é então substituído em χ_{ij}^{HF} e teremos uma expressão exata para a susceptibilidade. Veremos também que é possível obter uma expressão para o χ_{ij}^{RPA} .

3.1 Cálculo da Variação da Susceptibilidade Hartree-Fock

Vamos modelar o efeito de uma impureza substitucional sobre as propriedades eletrônicas do sistema através de um potencial perturbador agindo sobre o sítio no qual a impureza se encontra.

$$W = v|i\rangle\langle i|. \quad (3.2)$$

v é a diferença entre o potencial do material cristalino e a impureza, podendo ter componentes *up* e *down*.

Vamos denotar que G_{ij}^0 seja a Função de Green do cristal puro e utilizamos a equação de Dyson[29] para calcular a função de Green do sistema com impureza. Assim obtemos

$$G_{ij} = G_{ij}^0 + G_{i0}^0 W (1 - G_{00}^0 W)^{-1} G_{0j}^0 \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF}(\vec{q}_{||}, \omega) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') [G_{ji}^{\uparrow}(\omega') G_{ij}^{\downarrow}(\omega + \omega') - G_{ji}^{*\downarrow}(\omega') G_{ij}^{*\uparrow}(\omega' - \omega) + \\ + G_{ij}^{\downarrow}(\omega') G_{ij}^{*\uparrow}(\omega' - \omega) - G_{ij}^{*\uparrow}(\omega') G_{ij}^{\downarrow}(\omega' + \omega)] \quad (3.4) \end{aligned}$$

Fazendo a transformada de Fourier inversa da Função de Green 3.3.

$$G_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} G^0(\vec{k}, \omega) + \frac{1}{N^2} \sum_{k,k'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{ik'\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} G^0(\vec{k}, \omega) A(\omega) G^0(\vec{k}', \omega) \quad (3.5)$$

em que $A(\omega) = v(1 - G_{00}^0 \delta)^{-1}$ é o termo que representa a autoenergia devido à desordem. Como pode ser visto, não importa em qual sítio a impureza é colocada. Para qualquer $G_{ii}^0 = G_{00}^0$.

A Transformada de Fourier inversa de χ_{ij}^{HF} ,

$$\chi_{ij}^{HF}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{q,q'} e^{iq\cdot\vec{R}_i} e^{-iq'\cdot\vec{R}_j} \chi^{HF}(q, q', \omega) \quad (3.6)$$

é usada para identificar as parcelas do cálculo de $\chi_{ij}^{HF}(\omega)$ que representam $\chi^{HF}(q, q', \omega)$.

Obteremos uma expressão para χ^{HF} , tal que possamos escrever

$$\chi^{HF} = \chi^{0HF} + \delta\chi^{0HF}. \quad (3.7)$$

em que χ^{0HF} é a representação para o cristal puro que já foi vista no capítulo anterior, e $\delta\chi^{0HF}$ é uma correção que representa cada configuração de impureza. Como já conhecemos χ^{0HF} , vamos obter $\delta\chi^{0HF}$, para que possamos ter χ^{HF} em sua forma completa.

Esse cálculo está detalhado no apêndice B. A susceptibilidade χ^{HF} será

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega_f + iy) \times \\ &\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy + \omega) A^{\downarrow}(\omega_f + iy + \omega) \times \\ &\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy + \omega) + \\ &+ G^{0\uparrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy) A^{\uparrow}(\omega_f + iy) \times \\ &\times G^{0\uparrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q} + \vec{q}', \omega_f + iy + \omega)] \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega_f + iy) \times \\ &\times A^{\uparrow}(\omega_f + iy) G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega_f + iy) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy + \omega) \times \\ &\times A^{\downarrow}(\omega_f + iy + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega_f + iy + \omega)] \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q} + \vec{q}', \omega_f + iy) \times \\ &\times G^{0\uparrow*}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy - \omega) A^{\uparrow*}(\omega_f + iy - \omega) \times \\ &\times G^{0\uparrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy - \omega) + G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy) \times \\ &\times A^{\downarrow*}(\omega_f + iy) G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega_f + iy - \omega)] \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned}
I_4 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k}+\vec{q}, \omega_f+iy) A^{\downarrow*}(\omega_f+iy) \times \\
&\times G^{0\downarrow*}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega_f+iy) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega_f+iy-\omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega_f+iy-\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega_f+iy-\omega)] \quad (3.11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_f-\omega}^{\omega_f} d\omega' \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega'+\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}-\vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}-\vec{q}', \omega') + \\
&+ G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) A^{\downarrow}(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}', \omega'+\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega')] \quad (3.12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_6 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_f-\omega}^{\omega_f} d\omega' \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) A^{\downarrow}(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega'+\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega')] \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Logo,

$$\delta\chi_{HF} = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5 + I_6 \quad (3.14)$$

Essa é a correção na Susceptibilidade Hartree-Fock.

3.2 Comparação entre meio efetivo e cálculo exato

Uma expressão análoga também é calculada para a aproximação CPA. A diferença entre $\delta\chi_{Anal}^{HF}$ e $\delta\chi_{CPA}^{HF}$ ocorre no último termo de cada expressão de forma resumida, temos

$$\begin{aligned}
\delta\chi_{Anal}^{HF} &\rightarrow \left[\sum_k G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) \right]^2 - \left[\sum_k G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) \right]^2 + \\
&+ \left[\sum_k G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) \right]^2 + \left[\sum_k G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') \right]^2 \quad (3.15) \\
\delta\chi_{CPA}^{HF} &\rightarrow \sum_k \left[G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) \right]^2 - \left[G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) \right]^2 + \\
&+ \left[G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) \right]^2 + \left[G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') \right]^2 \quad (3.16)
\end{aligned}$$

em que t é a matriz obtida em 2.64. Detalhes da expressão estão disponíveis no apêndice B.

3.3 Resultados Numéricos

Inicialmente vamos utilizar as equações 3.15 e 3.16 para verificar e comparar a diferença entre o cálculo tipo CPA e o cálculo analítico.

Para esses cálculos, o *hopping* entre o substrato e a camada magnética é $t' = 0.5t$.

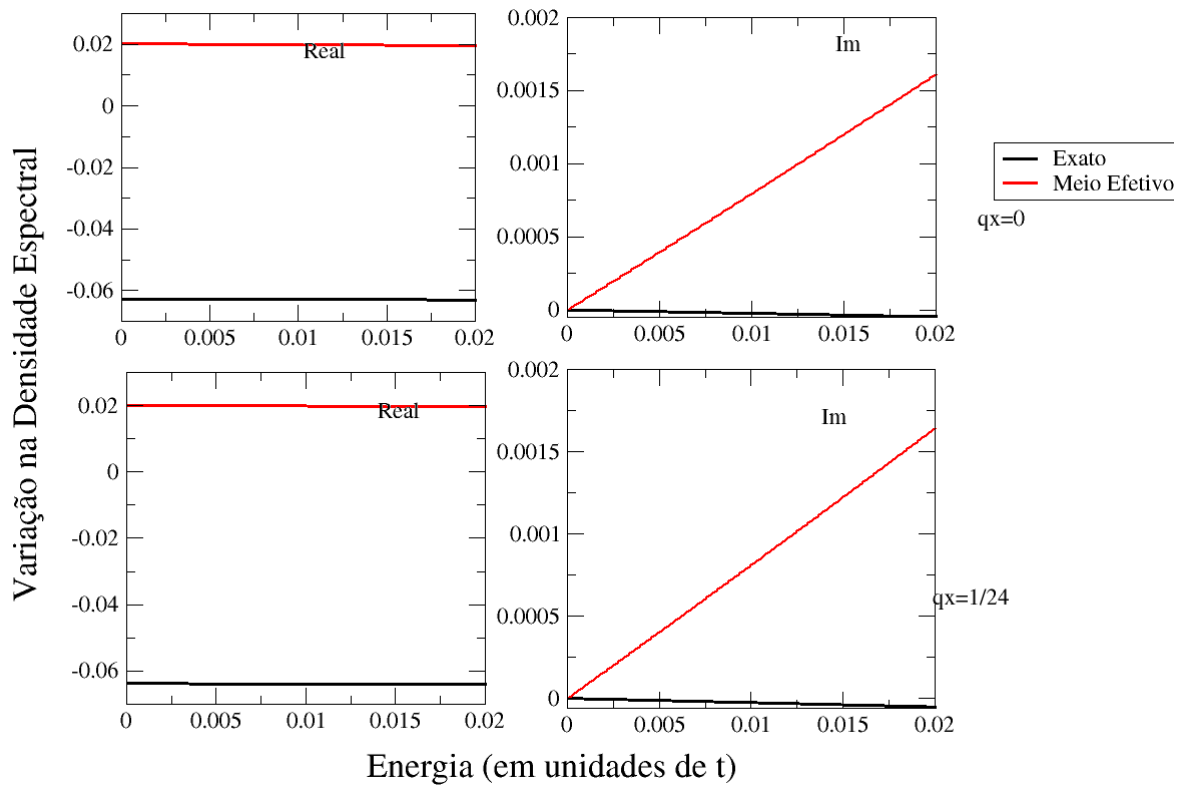


Figura 11: Comparação da variação da susceptibilidade HF entre o cálculo exato e o cálculo de meio efetivo, para concentração equivalente a uma impureza. Esquerda: Parte real. Direita: Parte Imaginária

O resultado mostra que o cálculo de meio efetivo diverge muito rapidamente, se comparado com o cálculo exato. Chegando a 5 vezes maior para energia $\omega = 0.02$.

Analisamos na figura 12 os efeitos que uma impureza causa na susceptibilidade HF.

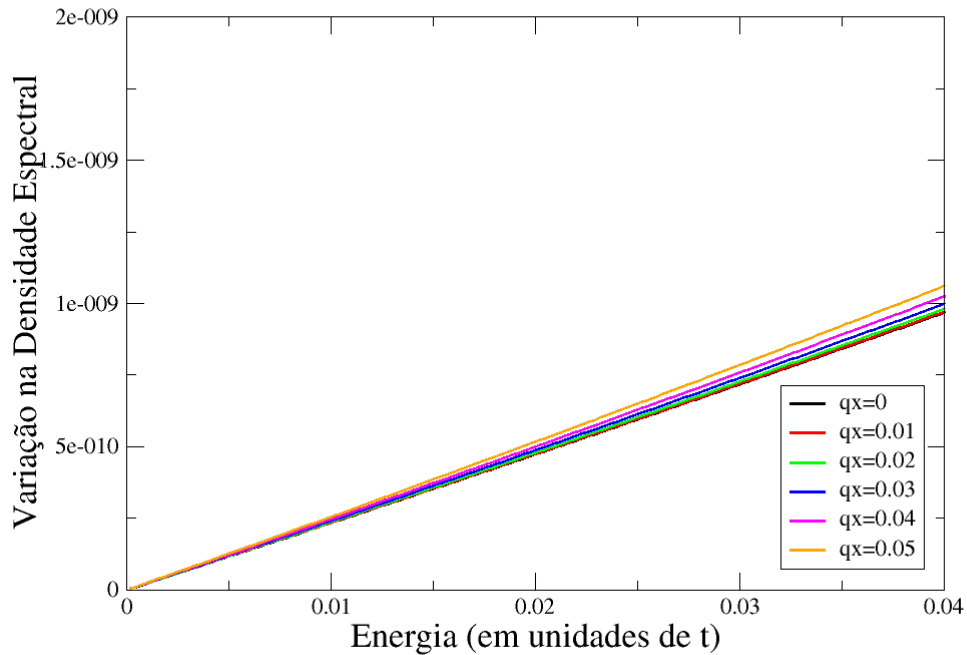


Figura 12: Variação na susceptibilidade HF para diversos valores de q_x .

Observando a figura 12, percebemos que a variação na susceptibilidade HF tem o mesmo comportamento para os valores de q apresentados.

A diferença imposta pelas equações 3.15 e 3.16 é linear na concentração de impureza $\frac{1}{N}$. Porém é de segunda ordem no potencial espalhador. No limite de potenciais fracos essa diferença pode ser negligenciada. Entretanto, existem situações de interesse que não pode ser necessariamente tratadas nesse limite. Por exemplo, a presença de impurezas não magnéticas em filmes ferromagnéticos deveriam ser descritos por potenciais de impureza da ordem do acoplamento de troca ferromagnético, que é bastante forte.

Essa modelagem analítica que foi calculada numericamente garante bons resultados que estão de acordo com o que é encontrado. Mas por outro lado ela é muito limitada, pois temos que nos restringir a somente uma única concentração de uma impureza substitucional. Mas isso não é proibido. De forma geral, para cada impureza uma expressão analítica deve ser calculada e depois simulada numericamente. Com o aumento do numero de impurezas, a quantidade de termos aumenta consideravelmente. Por isso, apesar de preciso e adequado, o método não se torna muito prático quando o intuito for efetuar um cálculo sistemático de como a concentração de impurezas substitucionais afetaria os espectros e as propriedades da susceptibilidade de spin.

A forma alternativa encontrada para que possamos ter um estudo sistemático, em que a concentração de impurezas possa afetar os espectros de ondas de spin, é calcular o valor de χ_{ij} no espaço real, ou seja, na "força bruta". No capítulo seguinte, vamos mostrar como esse cálculo é feito e apresentar os resultados encontrados além de comparar com os resultados obtidos em CPA e no modelo analítico.

4 *Desordem no Espaço Real*

No capítulo anterior, usamos um resultado exato para uma única impureza para avaliar a qualidade das aproximações tipo meio efetivo para o cálculo da χ^{HF} . Neste capítulo, vamos adotar uma abordagem "força bruta" para avaliar a qualidade da aproximação $\langle \chi^{HF} \chi^{RPA} \rangle = \langle \chi^{HF} \rangle \langle \chi^{RPA} \rangle$ na solução da equação RPA.

No cálculo da aproximação CPA, o que obtemos é uma aproximação em termos de uma média configuracional para a Função de Green. O ponto chave para o cálculo mais preciso possível é a correta obtenção da Função de Green. De fato, o cálculo incorreto da Função de Green provocará um efeito grande na susceptibilidade *Hartree-Fock*, que é definida como uma convolução de Funções de Green, e na susceptibilidade *RPA*, que é definida como uma parte inversa à susceptibilidade *Hartree-Fock*. Relembrando essas definições, temos que a Função de Green aparece na expressão, na forma

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF}(\vec{q}_{||}, \omega) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N_{||}} \sum_{k_{||}} [G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{q}_{||} + \vec{k}_{||}, \omega + \omega') - \\ - G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' + \omega) + G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||} - \vec{q}_{||}, \omega' + \omega) - \\ - G_{ji}^{\uparrow}(\vec{k}_{||}, \omega') G_{ij}^{\downarrow}(\vec{k}_{||} + \vec{q}_{||}, \omega' + \omega)]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

A convolução de duas funções $\langle G_{ij} G_{kl} \rangle$ é aproximada por $\langle G_{ij} \rangle \langle G_{kl} \rangle$, em que algumas parcelas do produto são desprezadas. Isso não seria um grande problema se tratássemos grandezas estáticas e que dependessem, diretamente e apenas, dessa convolução. Mas, no caso da susceptibilidade dinâmica, temos um efeito maximizado pela inversão de χ_{ij}^{HF} , dado pela expressão 1.91.

Quando calculamos o

$$\chi^{RPA}(\omega) = [1 + \chi^{HF}(\omega)U]^{-1} \chi^{HF}(\omega) \quad (4.2)$$

percebemos que mesmo os valores desprezados em $\langle G_{ij}G_{kl} \rangle$ sendo mínimos eles são amplificados no cálculo do χ^{RPA} .

4.1 Definição do Hamiltoniano no Espaço Real

O cálculo no espaço real pode ser visto como menos difícil do que no espaço recíproco. Isso ocorre, principalmente, pela não necessidade de efetuar uma Transformada de Fourier durante o processo de cálculo para obtenção das Funções de Green.

Nós efetuamos o cálculo no espaço real para que pudéssmos entender os efeitos ao desconsiderar as flutuações quando fazemos $\langle GG \rangle = \langle G \rangle \langle G \rangle$ na equação RPA. Consideramos como substratos pilares que são semi-infinitos na direção z e possuem seção quadrada finita. No topo dos pilares adicionamos uma camada monoatômica ferromagnética com seção idêntica. No plano xy utilizamos condições periódicas de contorno para minimizar os efeitos de tamanho finito. Esquemáticamente apresentamos na figura 13.

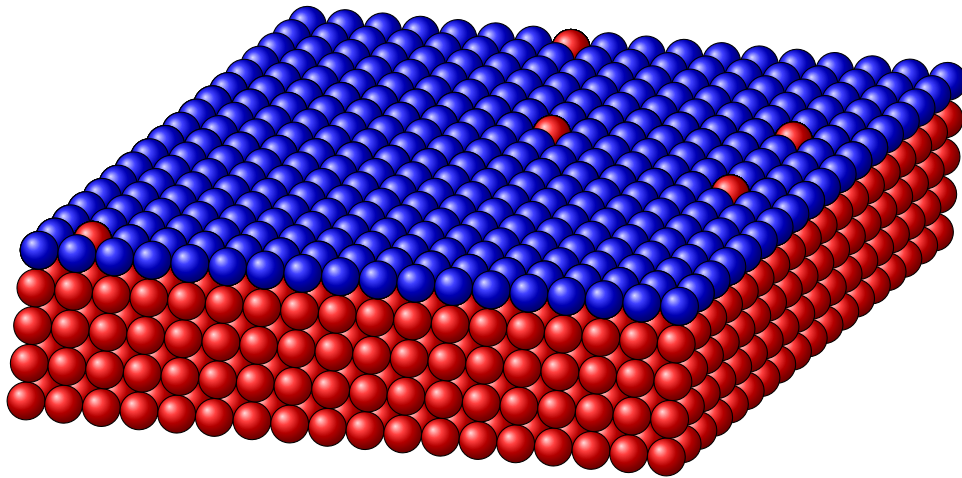


Figura 13: Plano Magnético colocado sobre um substrato metálico não-magnético, semi-infinito no sentido $-z$, em visão perspectiva.

Para tratar esse sistema, nosso hamiltoniano será escrito como sendo uma matriz composta da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = E_0 \pm \frac{Um}{2} + H_{ext} \quad (4.3)$$

Com esse hamiltoniano, chegamos que a Função de Green para o conjunto de planos é,

$$G^\sigma = (\omega - \mathcal{H} - i\eta)^{-1} \quad (4.4)$$

$$G = (\omega - E_0 \mp \frac{Um}{2} - H_{ext})^{-1} \quad (4.5)$$

Para conectar o conjunto de planos magnéticos com o substrato, podemos utilizar a equação de Dyson.

$$G_{ij} = G_{ij}^0 + G_{i1}h_{10}G_{0j}h_{01}G_{1j} \quad (4.6)$$

$$G_{1j} = G_{1j}^0 + G_{11}^0h_{10}G_{0j} \quad (4.7)$$

$$G_{0j} = G_{00}^0h_{01}G_{1j}. \quad (4.8)$$

Logo, substituindo 4.8 em 4.7, invertendo, e o resultado substituindo em 4.6, temos que

$$G_{ij} = G_{ij}^0 + G_{i1}h_{10}G_{00}^0h_{01}(1 - G_{11}^0h_{10}G_{00}^0h_{01})^{-1}G_{1j}^0. \quad (4.9)$$

G_{ij} é a Função de Green para cada plano magnética quando devidamente conectado ao substrato, G_{ij}^0 representa os planos sem a conexão ao substrato. h_{10} e h_{01} são matrizes transpostas entre si e representam os *hoppings* entre o substrato e o primeiro plano magnético.

Em nossos primeiros cálculos, foi imposto ao parâmetro η do substrato um valor de dez vezes o η dos planos magnéticos, sendo este $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$, com o único intuito de que os cálculos numéricos possam ser efetivamente rápidos mantendo a precisão desejada. Em todos os cálculos, para que pudéssemos simular o cálculo de um plano infinito, foi realizado com condições periódicas de contorno com $h_{N+1} = hh$.

4.2 Resultados Numéricos

O cálculo no espaço real tem mais variáveis que o cálculo feito no espaço recíproco. Isso se deve, principalmente, porque temos que definir uma quantidade de sítios que vamos tratar, já que o cálculo infinito é garantido pela transformada de Fourier para o

espaço recíproco. Dessa forma, nossa escolha foi por tamanhos que pudessem representar, da melhor forma, o mesmo cálculo no espaço recíproco ou um limite em que os efeitos possam ser considerados equivalentes.

4.2.1 Sistema Cristalino

A primeira investigação foi a de identificar qual seria o tamanho adequado para que o cálculo feito no espaço real correspondesse ao cálculo feito no espaço recíproco ou que tivéssemos um limite de convergência.

Ao observar a figura 14, percebemos que para excitações de spin no modo uniforme ($q = 0$), a diferença é muito pequena, sendo influenciada somente pela energia do campo externo, que neste caso é $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$. Para $q = \frac{1}{N}$, observamos que o comportamento muda consideravelmente com o tamanho. Por exemplo, a energia de excitação para o tamanho 18x18 ocorre em valores próximos a $\omega = 0.15$ enquanto que para o tamanho 24x24 ocorre próximo de $\omega = 0.07$.

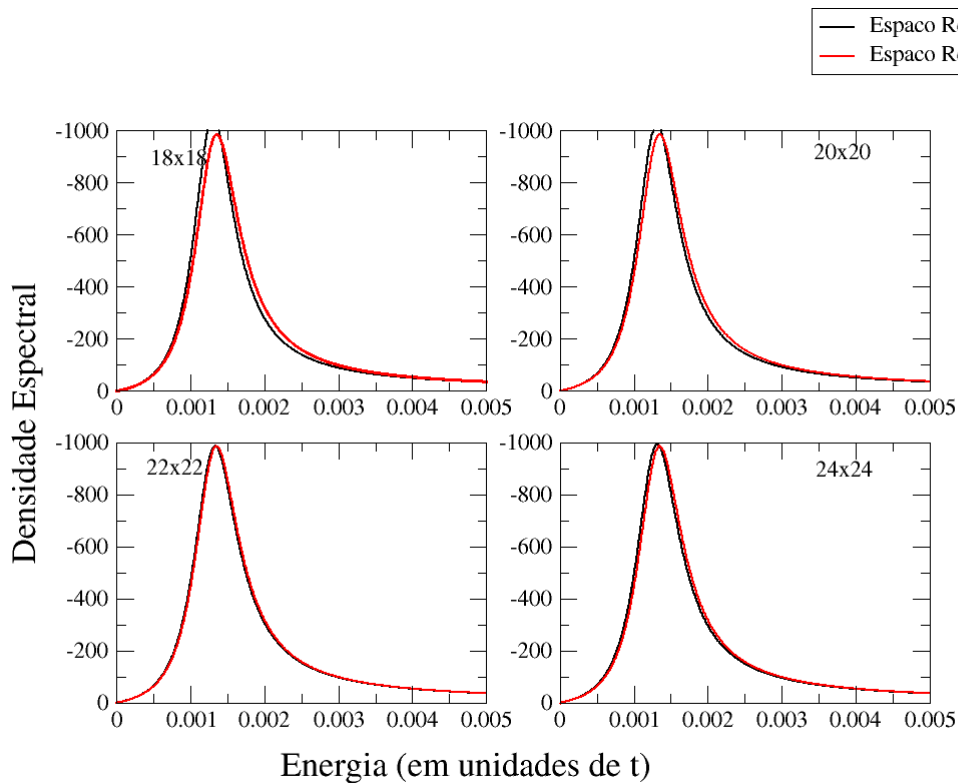


Figura 14: Densidade espectral como função da energia para quatro tamanhos distintos com $q = 0$, sem impurezas. A curva vermelha é o cálculo feito no espaço recíproco.

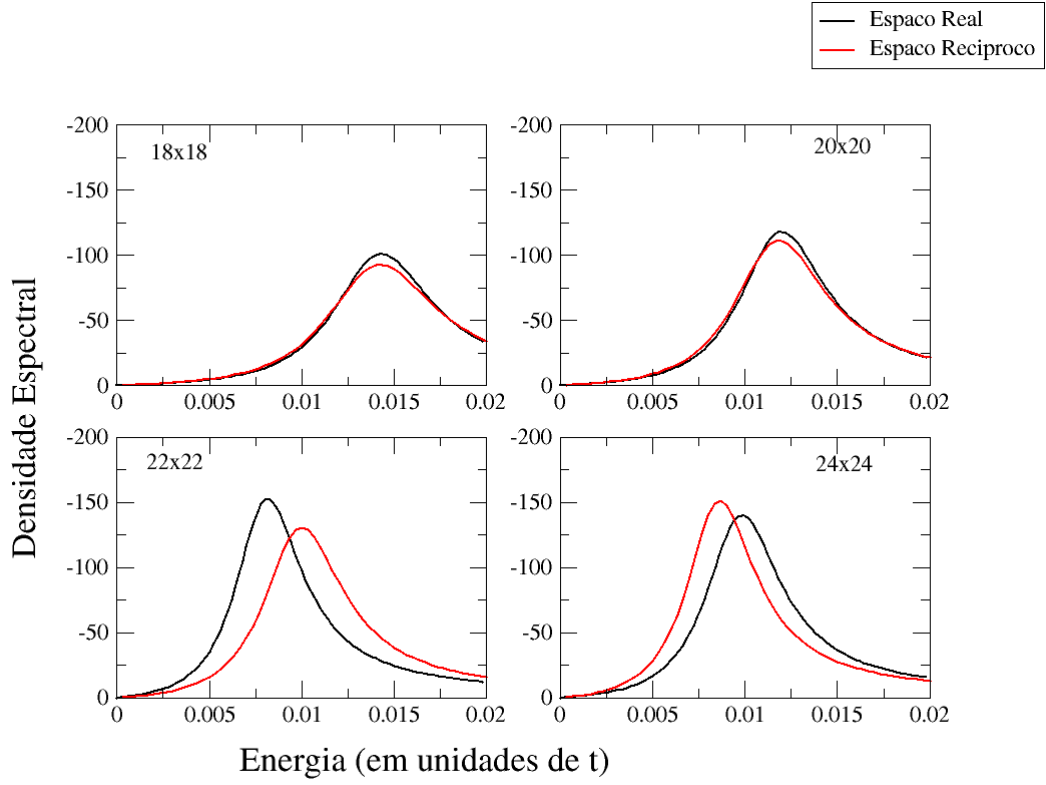


Figura 15: Densidade espectral como função da energia para quatro tamanhos distintos, com $q = \frac{1}{N}$ e sem impurezas. A curva vermelha é o cálculo feito no espaço recíproco.

4.2.2 Sistema Desordenado

O processo de inserção de impurezas no plano magnético é escolher um ou mais sítios aleatoriamente e fazer com que a interação coulombiana seja $U_i = 0$. Com isso, o sítio i fica com propriedades não magnéticas. Essa mesma definição foi feita no cálculo com CPA e no modelo analítico.

A média da susceptibilidade em RPA tem a forma

$$\langle \chi^{RPA}(q, q') \rangle = \langle \chi^{HF}(q, q') \rangle + \sum_k \langle \chi^{HF}(q, k) U \chi^{RPA}(k, q') \rangle. \quad (4.10)$$

De fato, o que temos que fazer é aproximar o segundo termo, porém isso não é fácil, pois envolve produto de funções. A aproximação mais simples é fazer

$$\langle \chi^{RPA}(q, q') \rangle = \langle \chi^{HF}(q, q') \rangle + \sum_k \langle \chi^{HF}(q, k) \rangle U \langle \chi^{RPA}(k, q') \rangle. \quad (4.11)$$

Essa aproximação desconsidera as correções de ordem superiores da média do produto das funções. Nas figuras 16 e 17, calculamos a susceptibilidade RPA de forma exata, como previsto na equação 4.10. E de forma aproximada como previsto na equação 4.11.

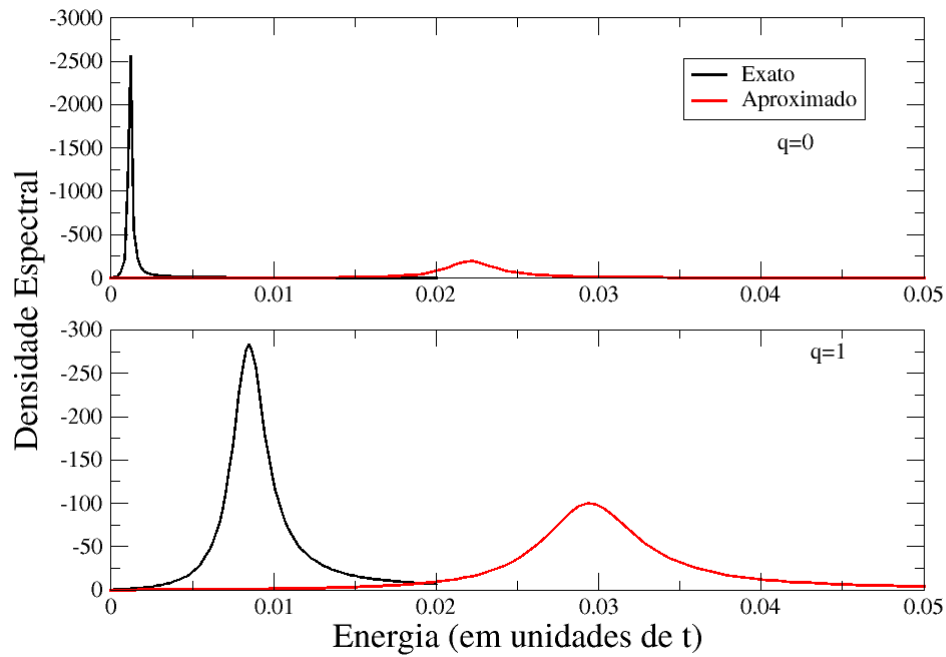


Figura 16: Densidade espectral para um plano de dimensões 20×20 e $t' = 0.5t$, com uma impureza. Exato e aproximado. \vec{q} em unidades de $\frac{1}{N} \frac{2\pi}{a}$.

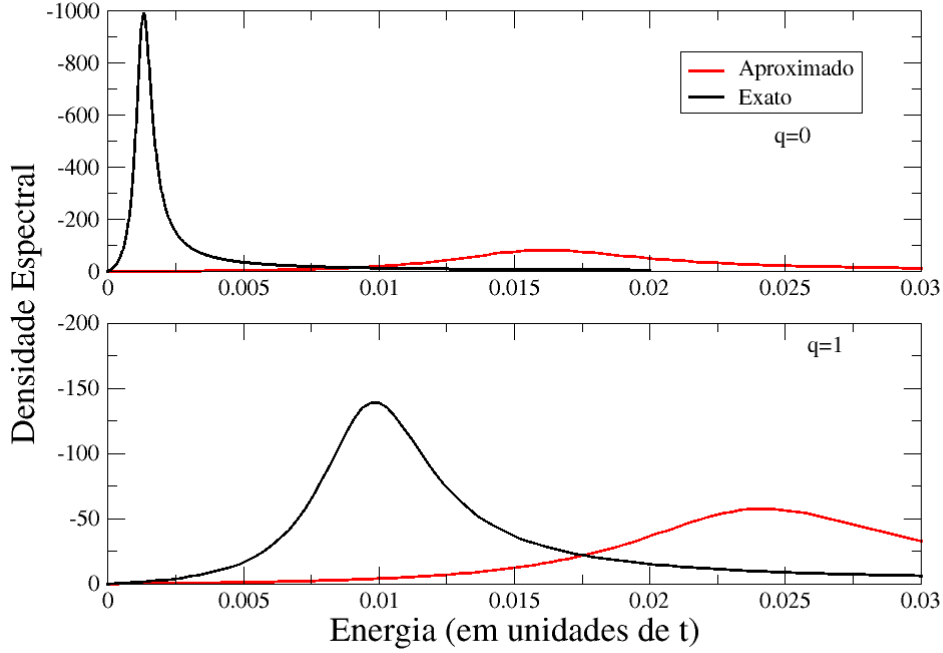


Figura 17: Densidade espectral para um plano de dimensões 24×24 e $t' = t$, com uma impureza. Exato e aproximado. \vec{q} em unidades de $\frac{1}{N} \frac{2\pi}{a}$.

O que percebemos no primeiro momento é que as curvas são muito distintas. Esse cálculo é feito para o modo uniforme ($q = 0$) e com uma impureza substitucional, de forma que todos os efeitos são minimizados. Isso ocorre porque as correções nessa aproximação são da mesma ordem da susceptibilidade para o sistema cristalino.

$$\langle \chi^{RPA} \chi^{HF} \rangle = \langle \chi^{RPA} \rangle \langle \chi^{HF} \rangle + \sum_{i=1, N} \delta \langle \chi_i^{RPA} \chi_i^{HF} \rangle \quad (4.12)$$

em que $\delta \langle \chi_i^{RPA} \chi_i^{HF} \rangle$ denota as correções em $\langle \chi^{RPA} \chi^{HF} \rangle$ que, ao efetuar a soma, é da mesma ordem do sistema cristalino.

Então, a solução para esse problema é calcular a susceptibilidade de maneira exata.

Alguns tamanhos de planos foram calculados com maiores detalhes. No caso do plano de dimensões 18×18 , observamos que o aumento da concentração de impureza não garante uma variação monotônica tanto na energia de excitação quanto na largura de linha. Para tamanhos relativamente pequenos, em comparação a um plano de dimensões 24×24 , a

partir de certas concentrações no caso do 18x18 em $x \approx 18\%$, o espectro de ondas de spin começa a perder a forma lorentziana. Para um sistema tipo *bulk* pode ser visto na referência [30]. Este comportamento é mostrado na figura 18.

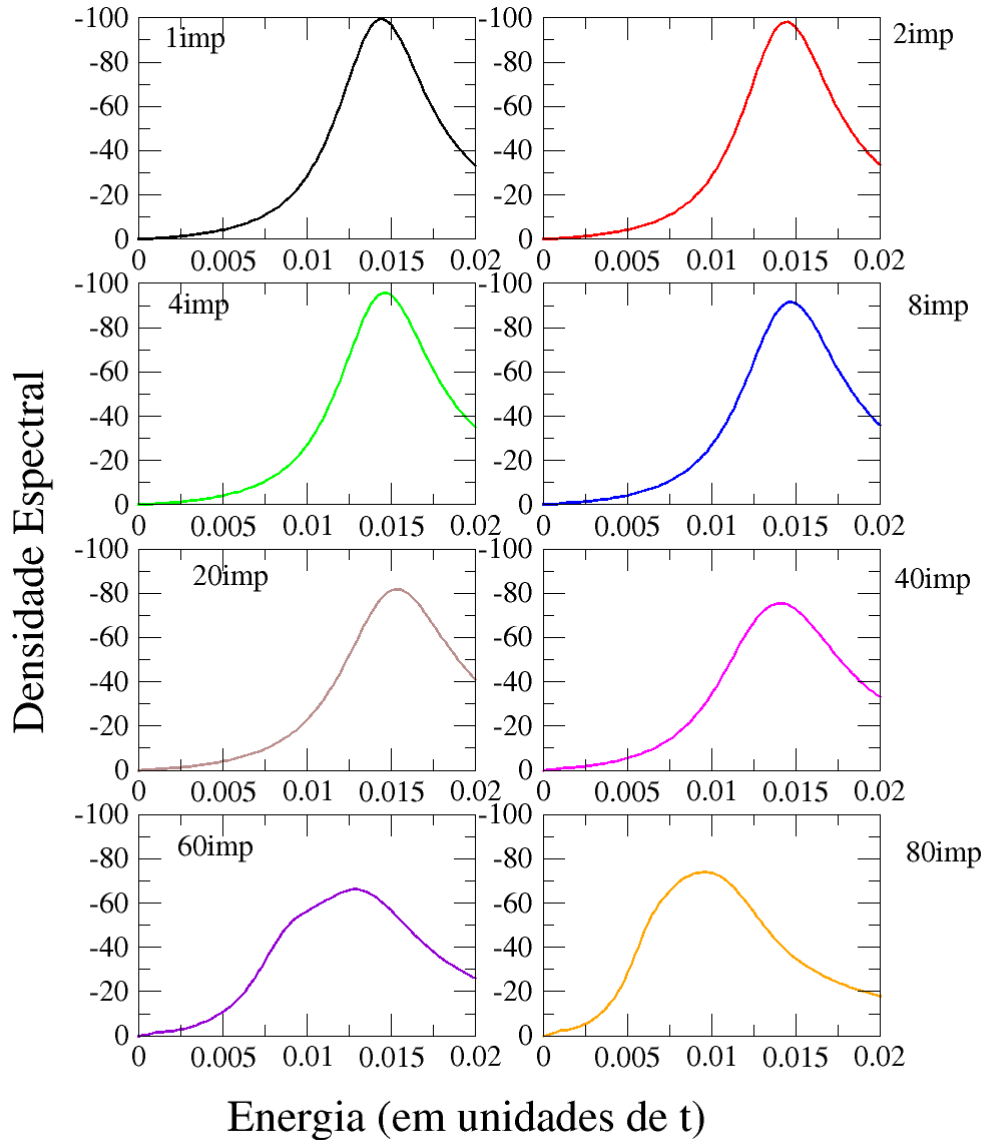


Figura 18: Densidade espectral para um plano de dimensões 18x18, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$

Para o tamanhos 20x20 e 22x22 temos os mesmos efeitos qualitativos, como mostrado nas figuras 19 e 20.

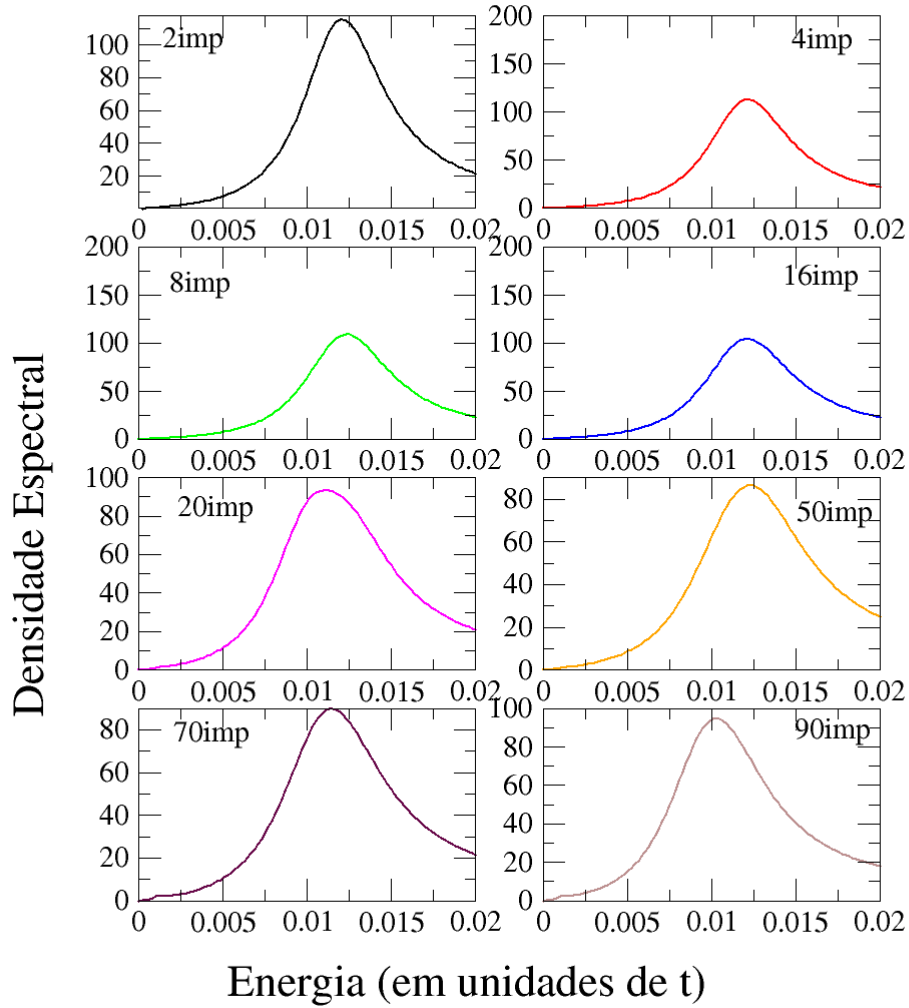


Figura 19: Densidade espectral para um plano de dimensões 20x20, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$

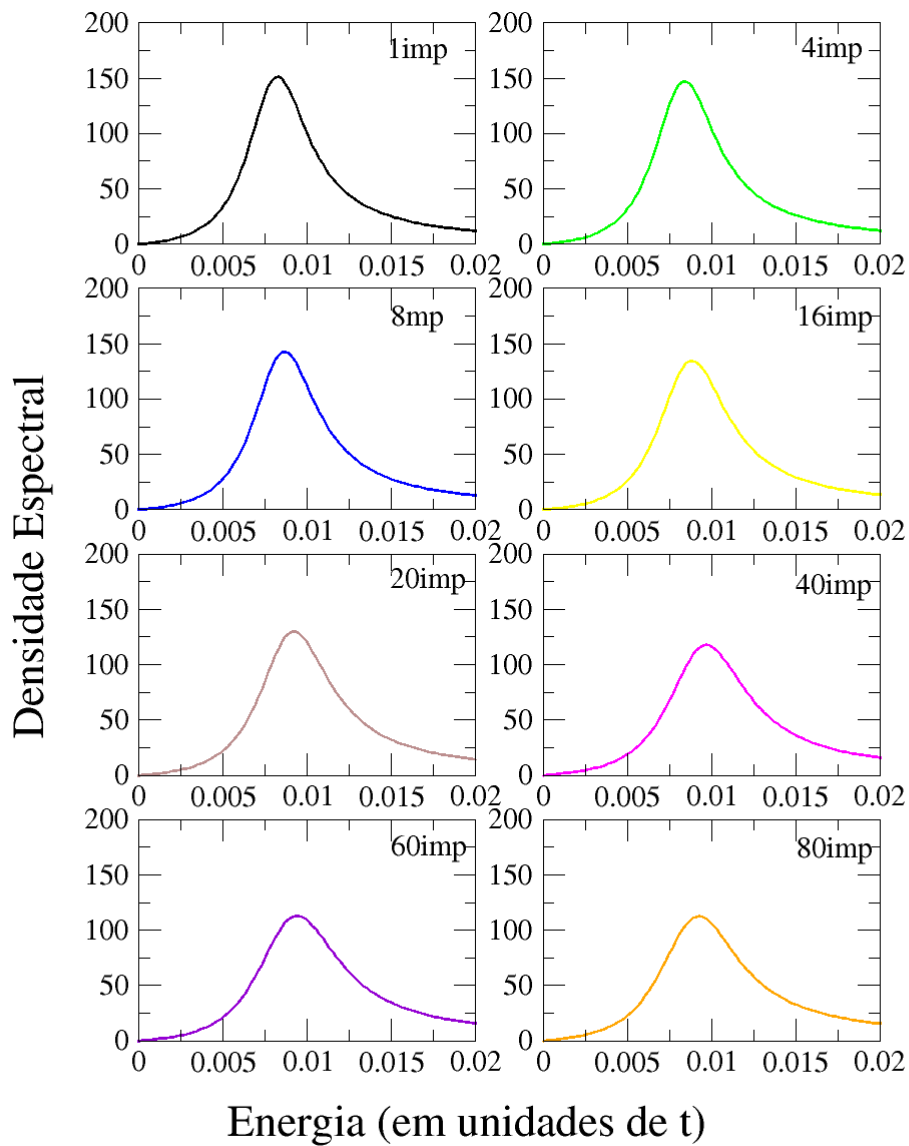


Figura 20: Densidade espectral para um plano de dimensões 22x22, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$ e $q = \frac{1}{N}$

Para os tamanhos 23x23 (figura 21) e 24x24 (22) os efeitos são reduzidos e os comportamentos de χ^{+-} aparentam ter uma forma mais monotônica com respeito a variação da concentração.

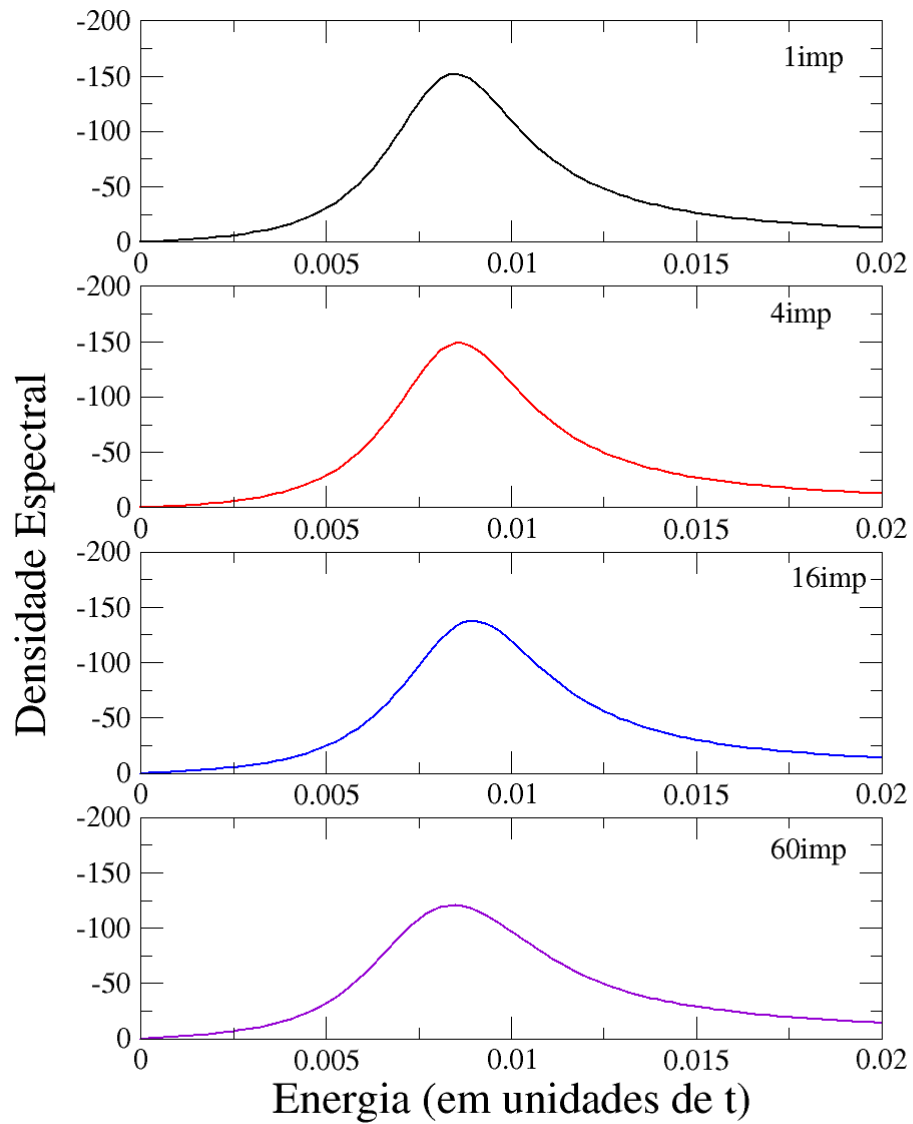


Figura 21: Densidade espectral para um plano de dimensões 23×23 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$

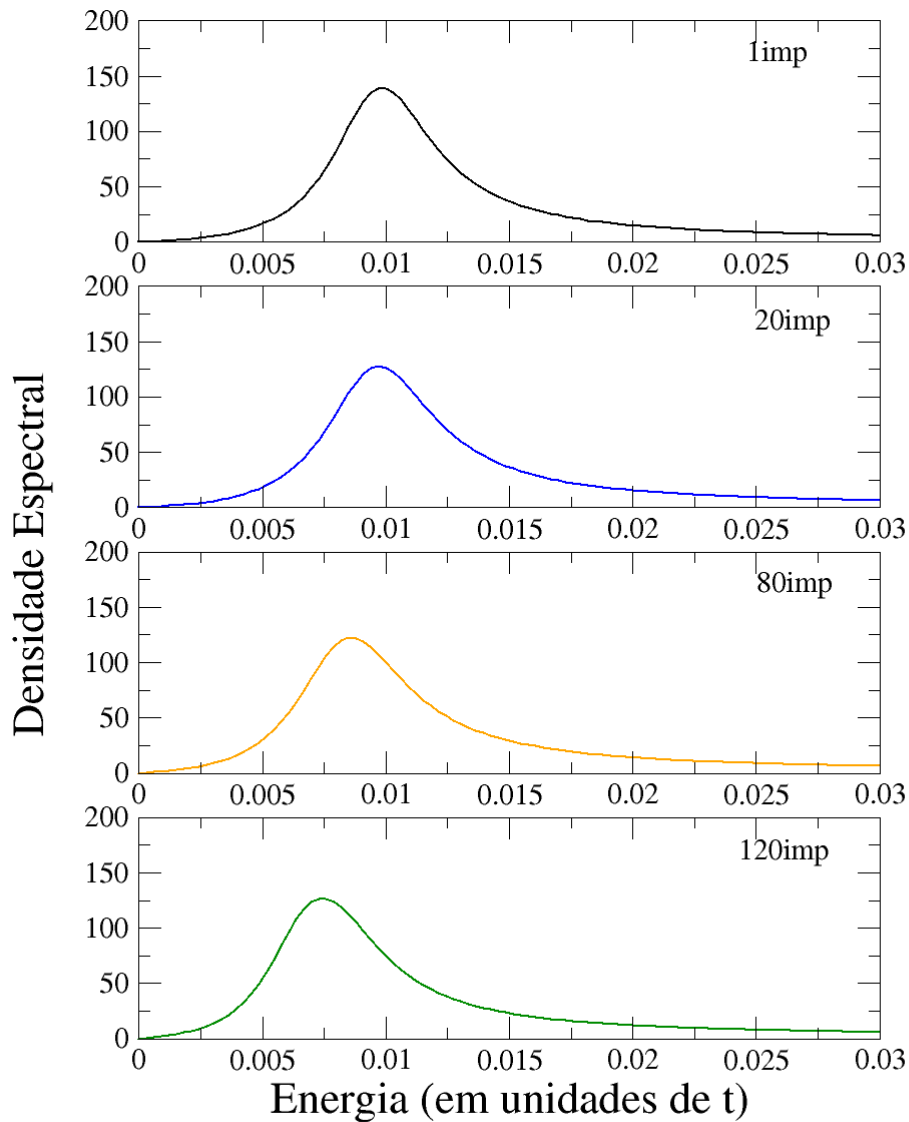


Figura 22: Densidade espectral para um plano de dimensões 24x24, com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$

Nas figuras 18, 19, 20 e 22 não é perceptível a ocorrência da mudança na forma do espectro de excitação. Para isso, fizemos alguns cálculos, de diversas configurações, para esses mesmos tamanhos, com concentrações que chegaram próximas de 25% para, então, termos um padrão sistemático desse comportamento. Como notado anteriormente, nos tamanhos menores a variação da forma ocorreu muito antes de 20%, em que a forma não é perfeitamente lorentziana. Observamos que tamanhos maiores, 24x24, mesmo em altas concentrações (25%) todas as configurações mantiverem a perfeita forma lorentziana. De certo modo, é garantido que, ao menos para tamanhos superiores a 24x24, as quantidades calculadas para ondas de spin serão confiáveis.

Na figura 23, é possível perceber que o para o tamanho 18x18 há muitas curvas que não são lorentzianas e no sistema 24x24 todas são perfeitamente.

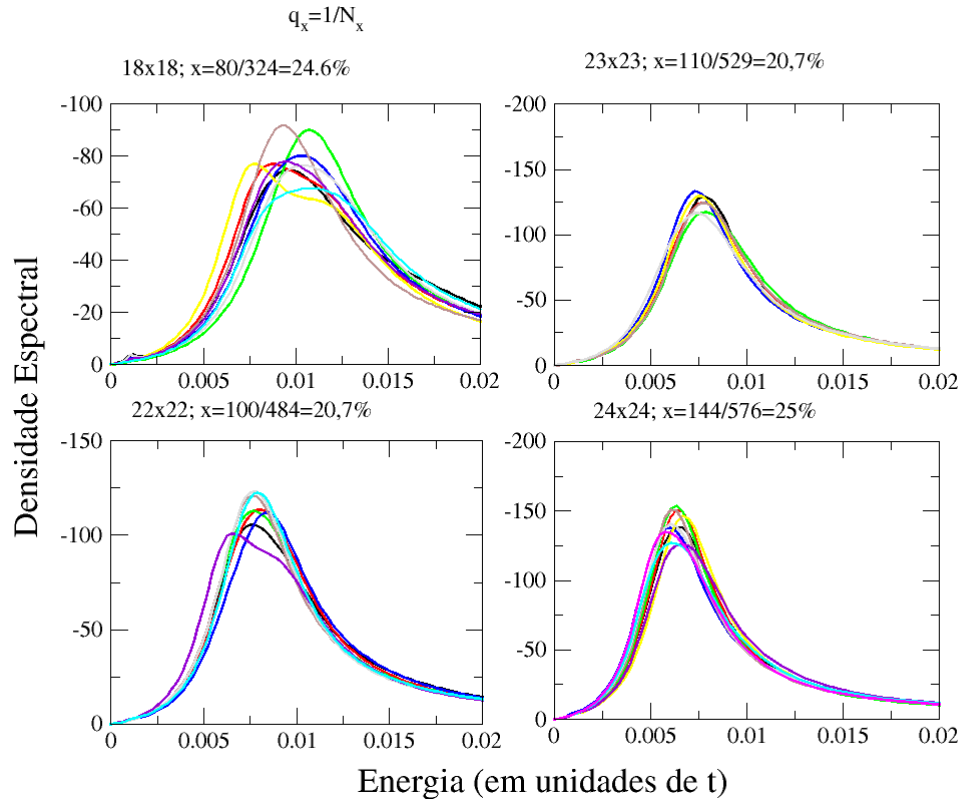


Figura 23: Espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$

Os pontos de excitação de ondas de spin foram calculados para todos os tamanhos, alguns com diversas configurações. Na figura 24, fica perceptível o comportamento não monotônico que já havíamos mencionado, inclusive aparecendo um máximo em torno de $x = 0.1$.

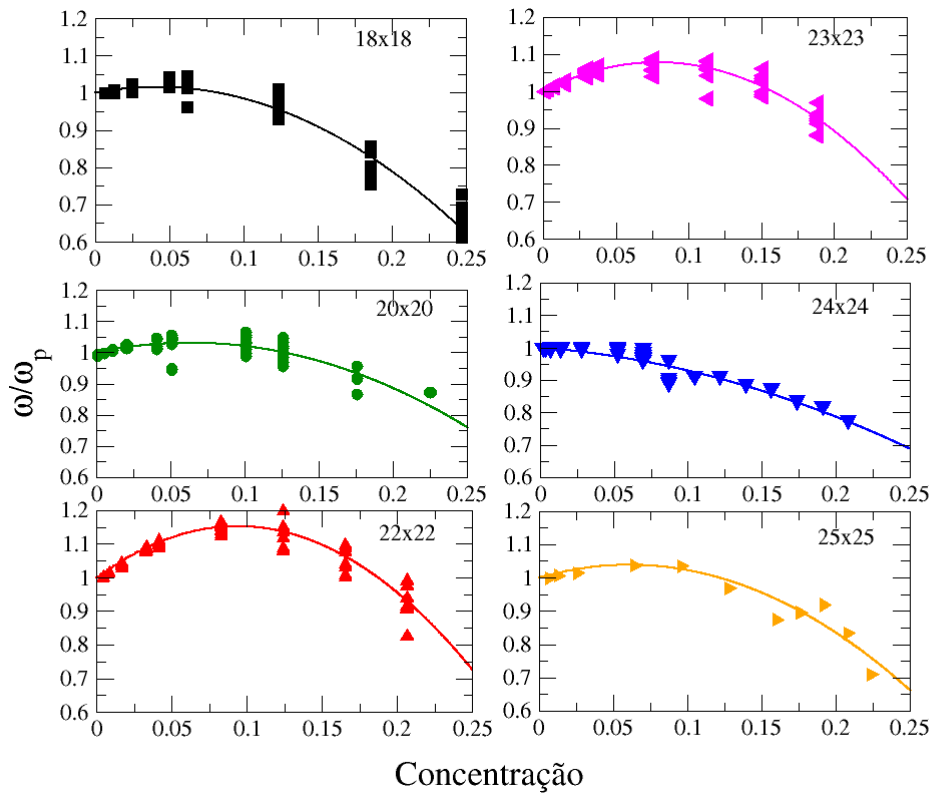


Figura 24: Energia de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$. Normalizado em relação ao cristalino

A largura de linha (figura 25), que, como já vimos, é proporcional ao tempo de vida das ondas de spin, tem o mesmo comportamento não monotônico dos pontos de excitação. Também observamos que a dispersão é maior para concentrações altas isso ocorre devido à transformada de Fourier da densidade espectral ser independente da posição para uma impureza. E para concentrações maiores a dispersão aumenta.

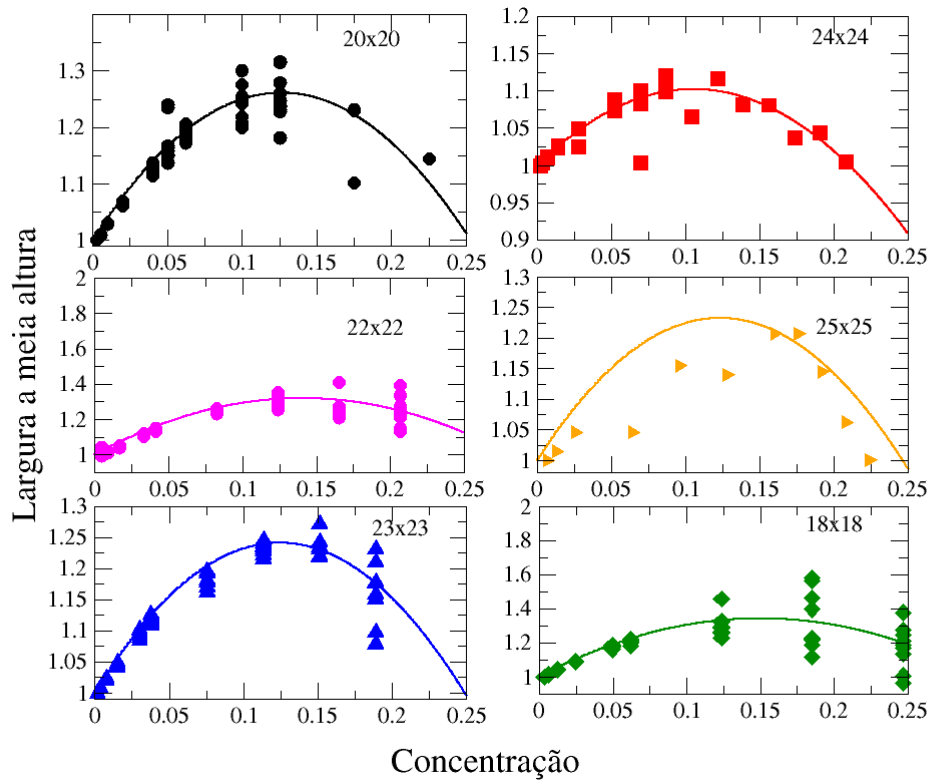


Figura 25: largura de linha para os espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos, com $q = \frac{1}{N}$. Normalizado em relação ao cristalino

Em todos os tamanhos, percebemos que os comportamentos qualitativos são equivalentes. E isso pode ser confirmado na figura 26 quando calculamos o parâmetro de amortecimento[31], tanto para o modo uniforme quanto para o primeiro modo. Observamos que para pequenas concentrações há equivalência para todos os tamanhos.

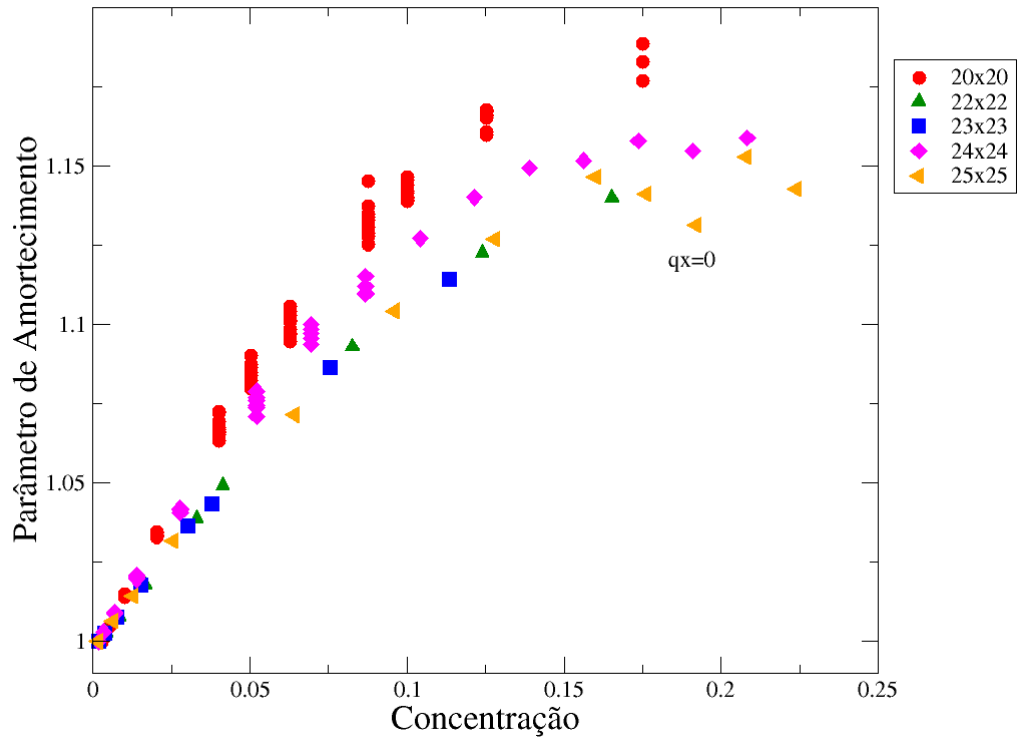


Figura 26: Parâmetro de amortecimento para todos os tamanhos. Para $q_x = 0$ e $q_x = 1$. Normalizado em relação ao cristalino

Na figura 26, para altas concentrações a divergência é muito alta, mas isso está relacionado com a perda da forma lorentziana que mostramos na figura 23.

Outra análise realizada é quando diminuimos o hopping entre o substrato e o filme, chamaremos de t' , simulando uma menor interferência na interação. Na figura 27 é mostrado que a largura de linha para esse sistema é menor do que o feito com $t' = t$, figura 19. Com isso a sensibilidade aos efeitos de desordem é maior.

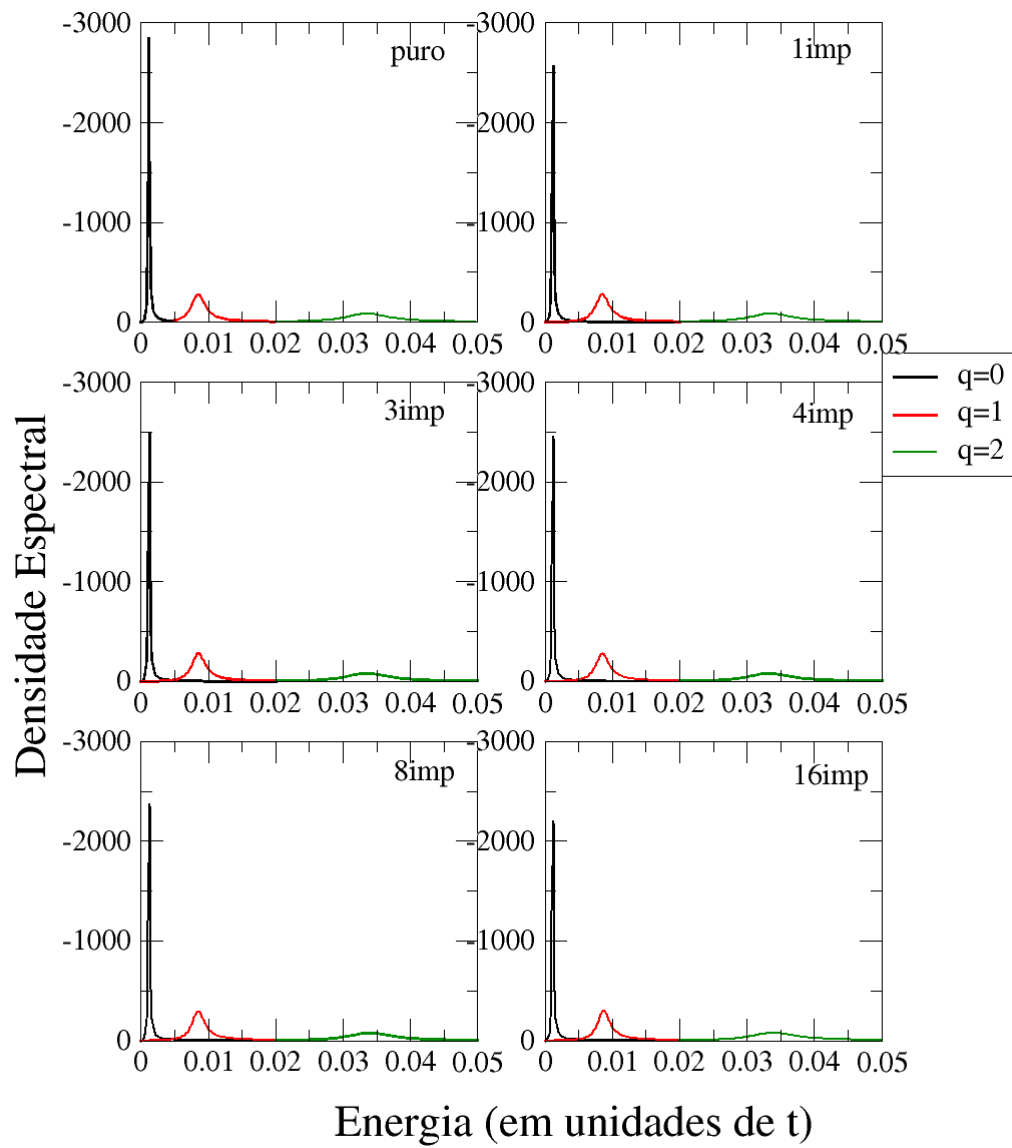


Figura 27: Densidades espectrais para $t' = 0.5t$. Tamanho 20x20.

Para esse caso, $t' = 0.5t$, observamos que o parâmetro de amortecimento é menor que no caso $t' = t$, ou seja, os efeitos de amortecimento do substrato no filme são menores.

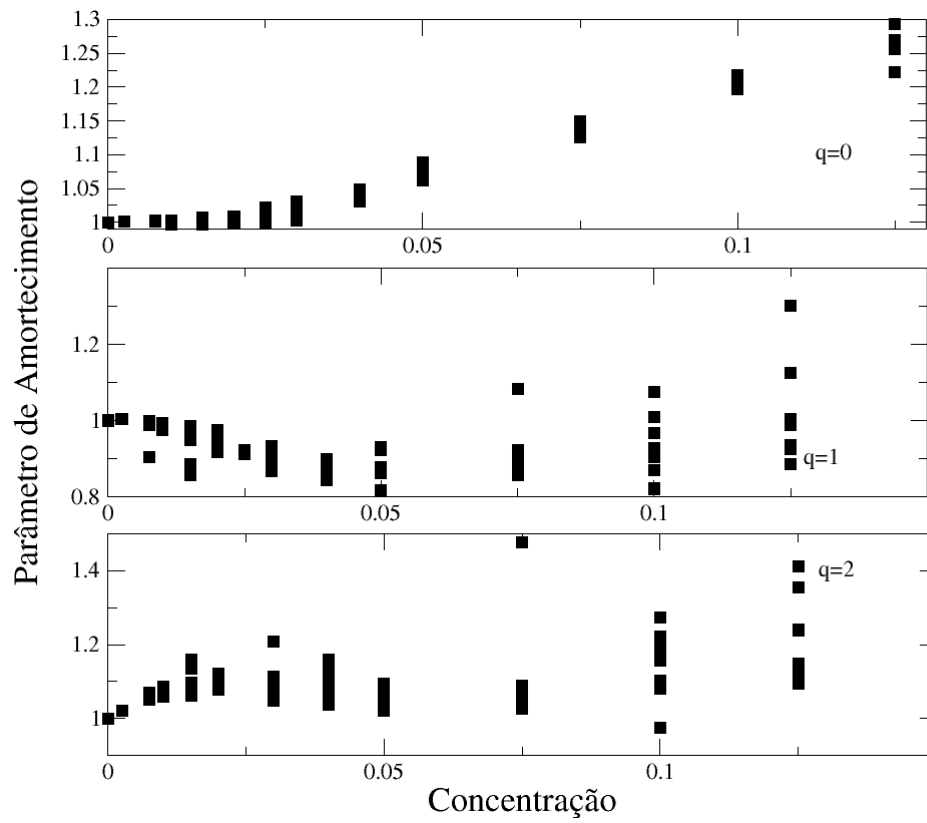


Figura 28: Parâmetro de amortecimento para $t' = 0.5t$. Tamanho 20x20.

Se compararmos as figuras 26 e 28, percebemos que os efeitos de desordem são muito mais intensos quando o sistema é menos amortecimento ($t' = 0.5t$).

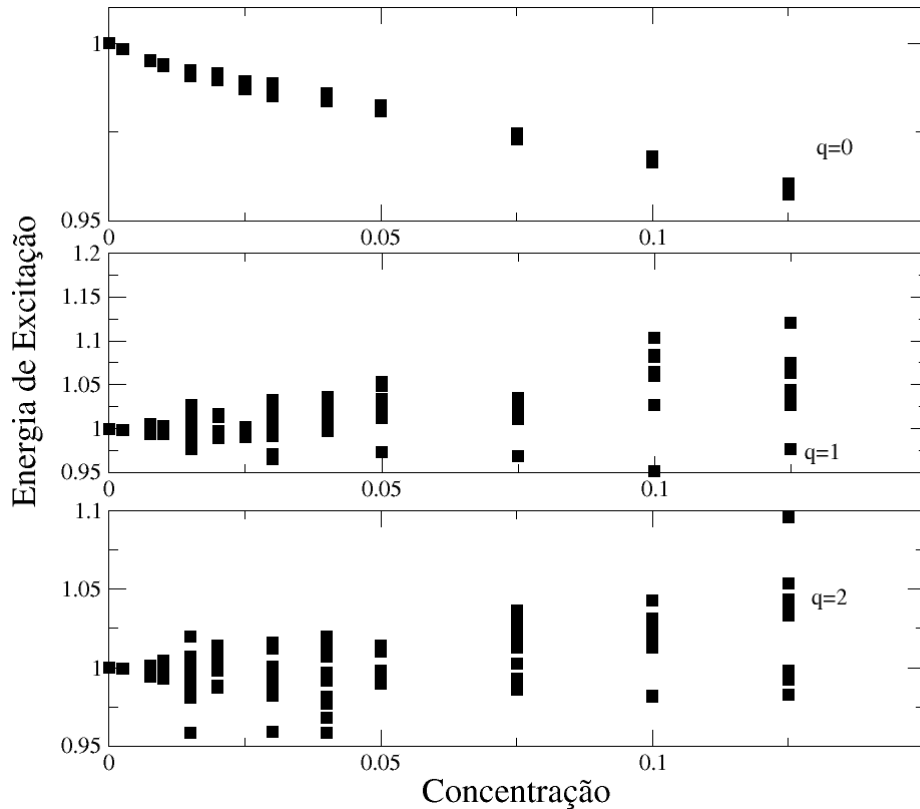


Figura 29: Energias de excitação para $t' = 0.5t$. Tamanho 20×20 .

Um caso muito relevante é o modo uniforme ($\vec{q} = 0$), que é o modo excitado em experiências de ressonância ferromagnética. Uma vez que o campo de excitação é uniforme no espaço, este modo tem custo energético zero para amostras cristalinas. Pequenas diferenças na magnetização local deveriam ter pouco efeito sobre a energia, uma vez que as excitações longitudinais e transversais estão desacopladas no regime linear, na ausência de acoplamento spin-órbita. Assim, espera-se que a energia do modo uniforme não será tão sensível na presença de uma quantidade limitada de desordem no filme ferromagnético. Além disso, o tempo de vida não deve ser fortemente afetado, uma vez que este modo é protegido pela simetria de rotação do hamiltoniano.

Como o amortecimento pelos modos de stoner é muito grande, vemos que as concentrações mais baixas na figura 29, os efeitos de desordem tem variação pequena e são mais evidentes no parâmetro de amortecimento.

4.2.3 Resultado para filmes Retangulares

Neste tipo de cálculo, feito no espaço real, temos um problema numérico que consiste no tamanho das matrizes que são utilizadas. Essas matrizes tem dimensões $N \times N \times p$, em

que N é a dimensão do plano magnético e p é a quantidade de pontos calculados no eixo de energia. Além do limite de tamanho do vetor, que depende do sistema operacional e do compilador utilizados, também enfrentamos a dificuldade do tempo, que quanto maiores forem as dimensões dos planos, exponencialmente será o gasto de tempo.

Para que pudéssemos calcular tamanhos maiores, ou efeitos em tamanhos maiores, utilizamos tamanhos retangulares, que variaram de 5×20 até 5×60 . Assim foi possível produzir espectros de ondas de spin para vetores de onda maiores sem um custo computacional extremo.

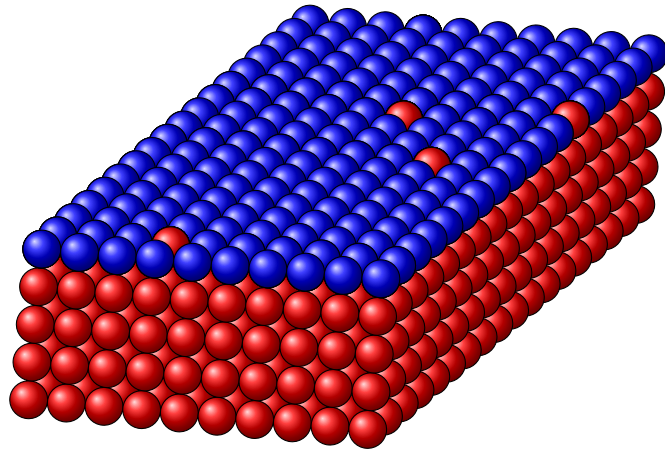


Figura 30: Plano Magnético retangular colocado sobre um substrato metálico não-magnético, semi-infinito no sentido $-z$, em visão perspectiva.

O comportamento de cada espectro de onda de spin seguiu o mesmo encontrado nos tamanhos quadrados, observando pequenas concentrações como, por exemplo, apresentado nas figuras 31,32, 33, 34 e 35.

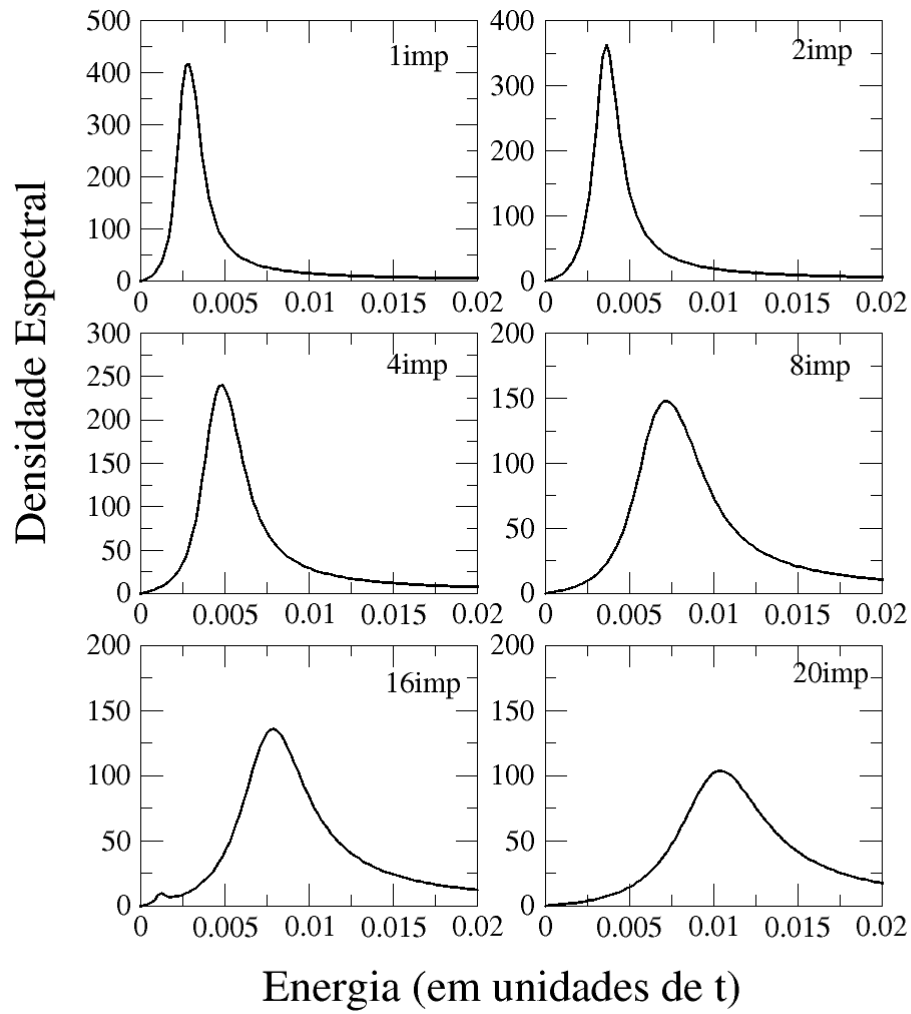


Figura 31: Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5×20 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$

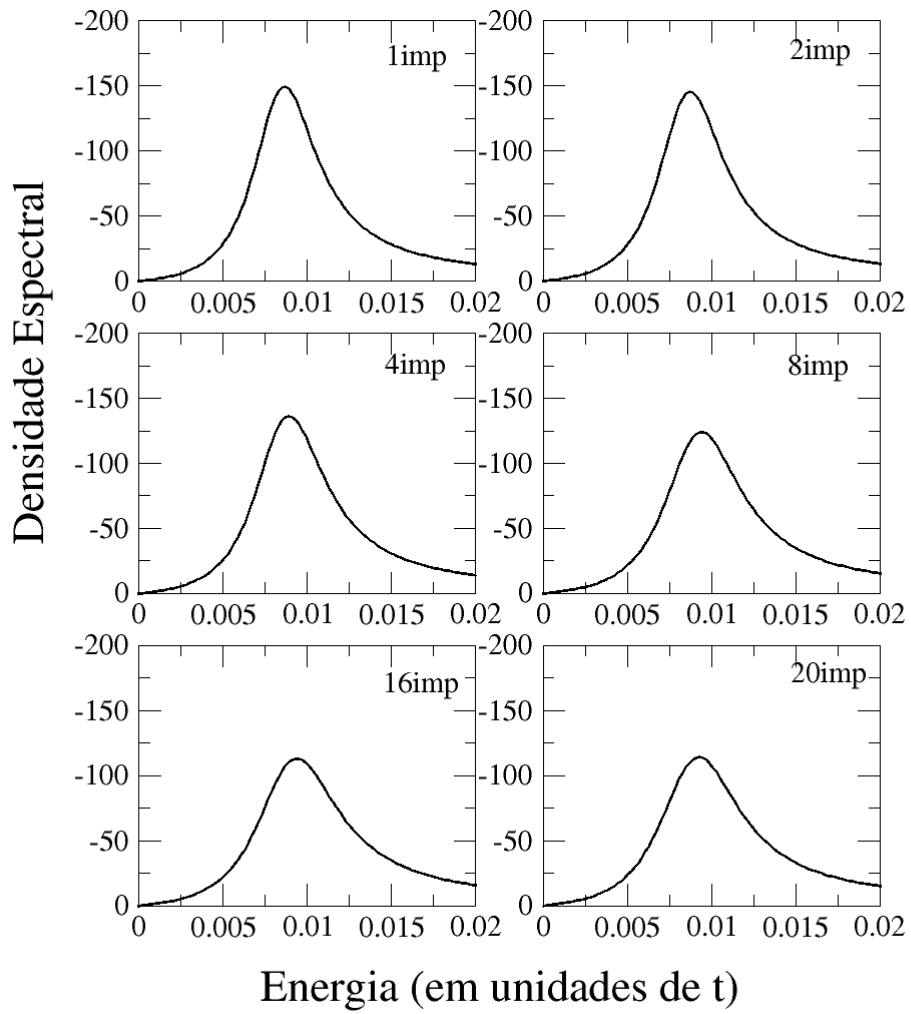


Figura 32: Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5×22 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$

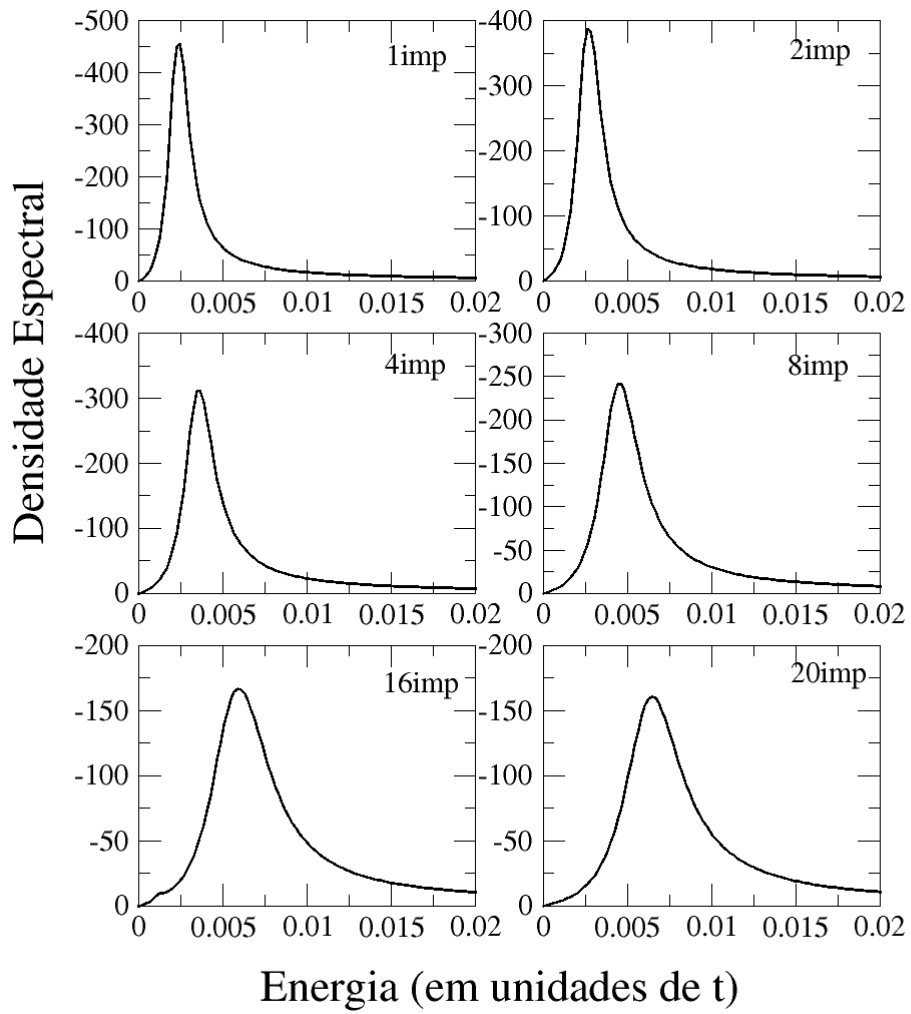


Figura 33: Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5×24 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$

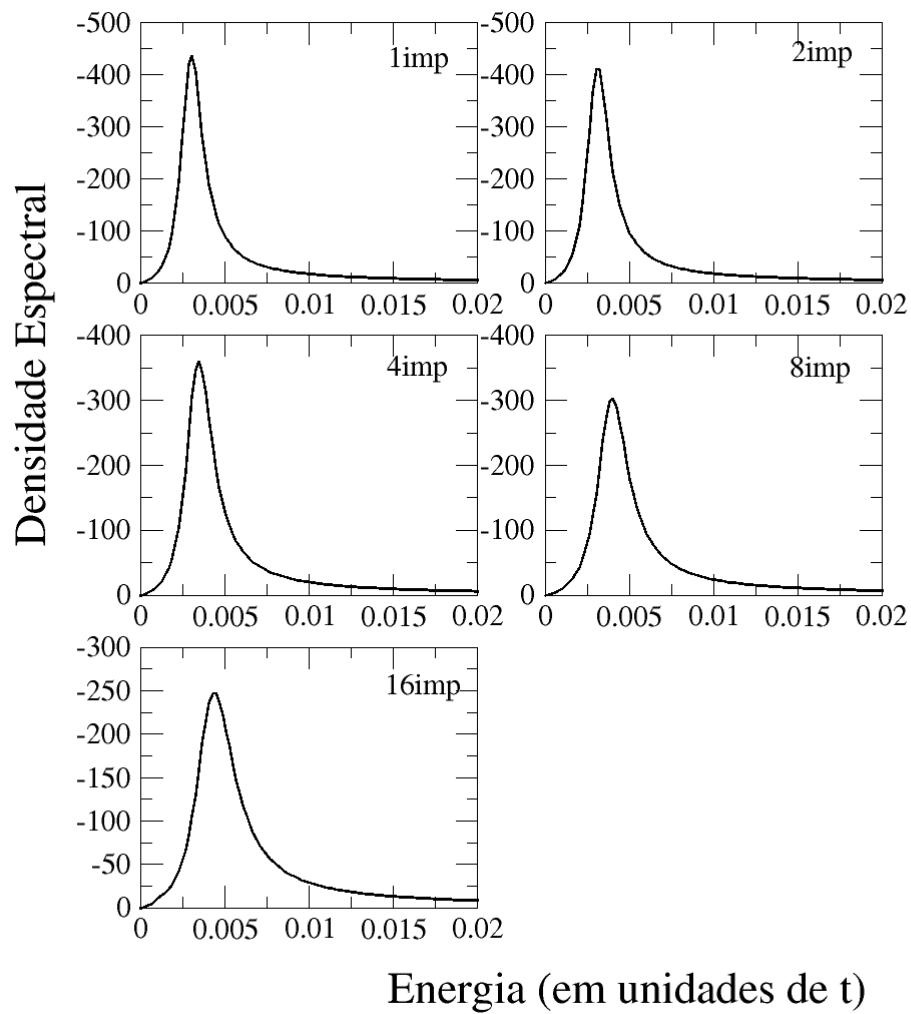


Figura 34: Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5×30 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$

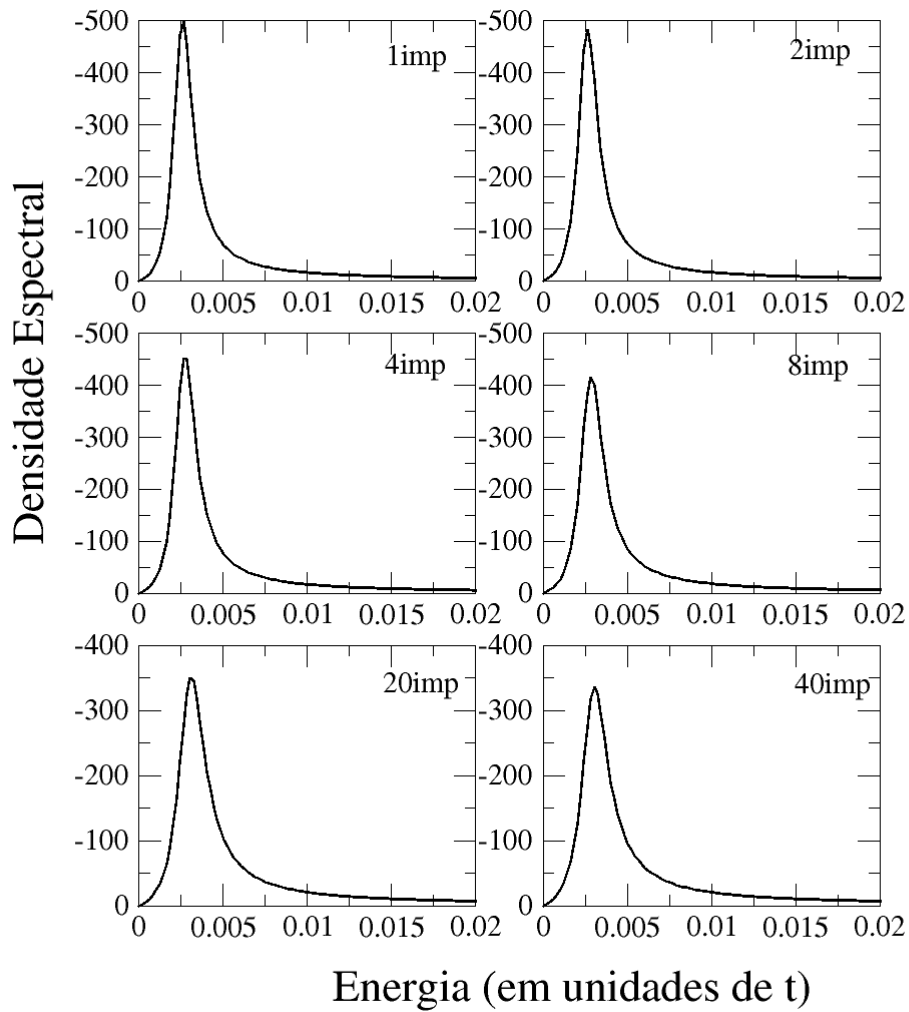


Figura 35: Densidade espectral para um plano com dimensão retangular 5×40 , com campo magnético externo $\hbar\omega = 5 \cdot 10^{-4}$, com $q = \frac{1}{N_y}$

Ao calcular as energias de excitação para cada tamanho, foi possível notar que para tamanhos maiores, a partir do 5×40 , o comportamento tem uma característica monotônica mais precisa, como apresentado na figura 36.

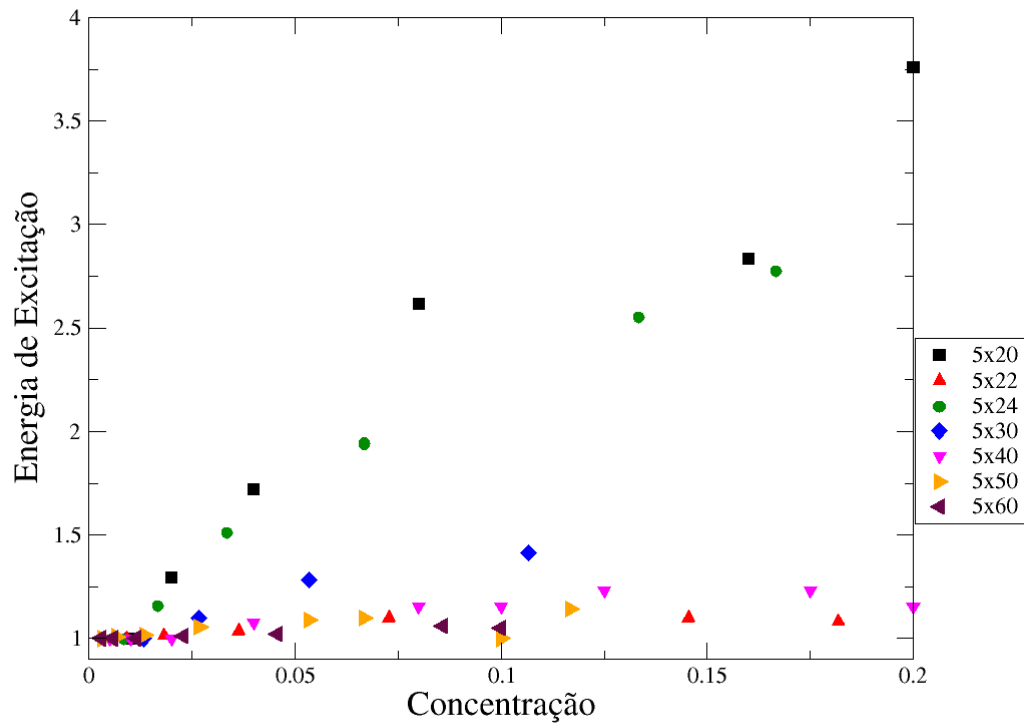


Figura 36: Energia de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos retangulares, com $q = \frac{1}{N_y}$

Na figura 37, o comportamento das larguras de linha obedece o ocorrido na seção 4.2.2, ou seja, é o mesmo comportamento qualitativo do encontrado para as energias de excitação. Para cada ponto, tanto nas larguras de linha quanto os pontos das energias de excitação foram feitos para uma configuração só.

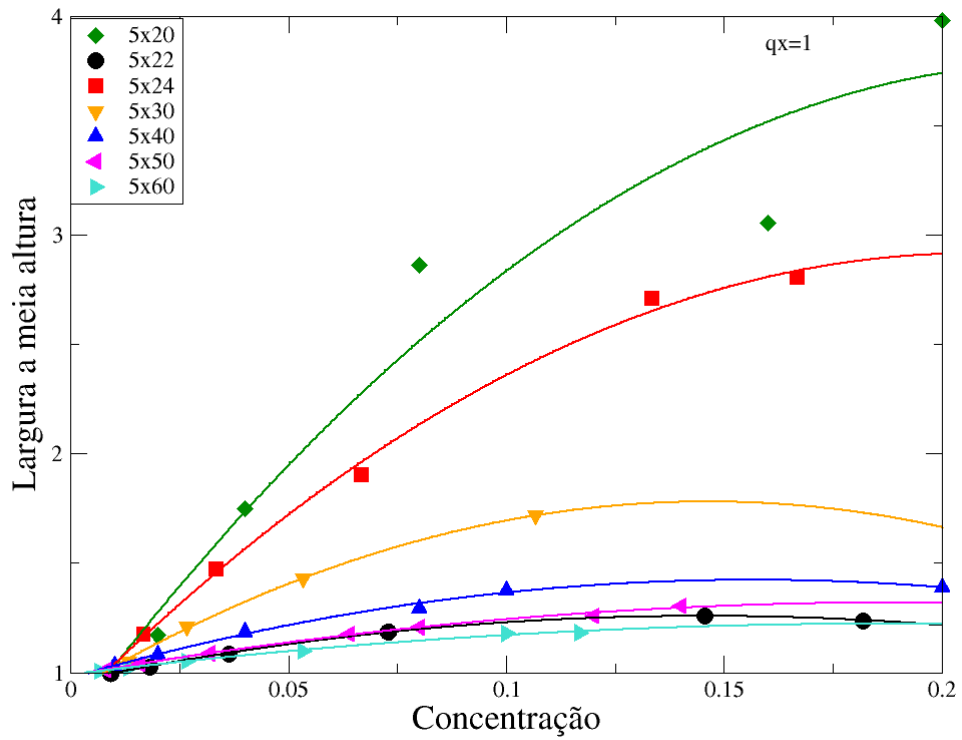


Figura 37: largura de linha para os espectros de excitação de ondas de spin para planos magnéticos com diferentes tamanhos retangulares, com $q = \frac{1}{N_y}$

Com tamanhos relativamente grandes, que é o caso do 5x40, podemos obter espectros de excitação de ondas de spin com vetores de onda maiores que $q = \frac{1}{N_y}$ e com isso obter a relação de dispersão para o $\chi^{+-}(q)$.

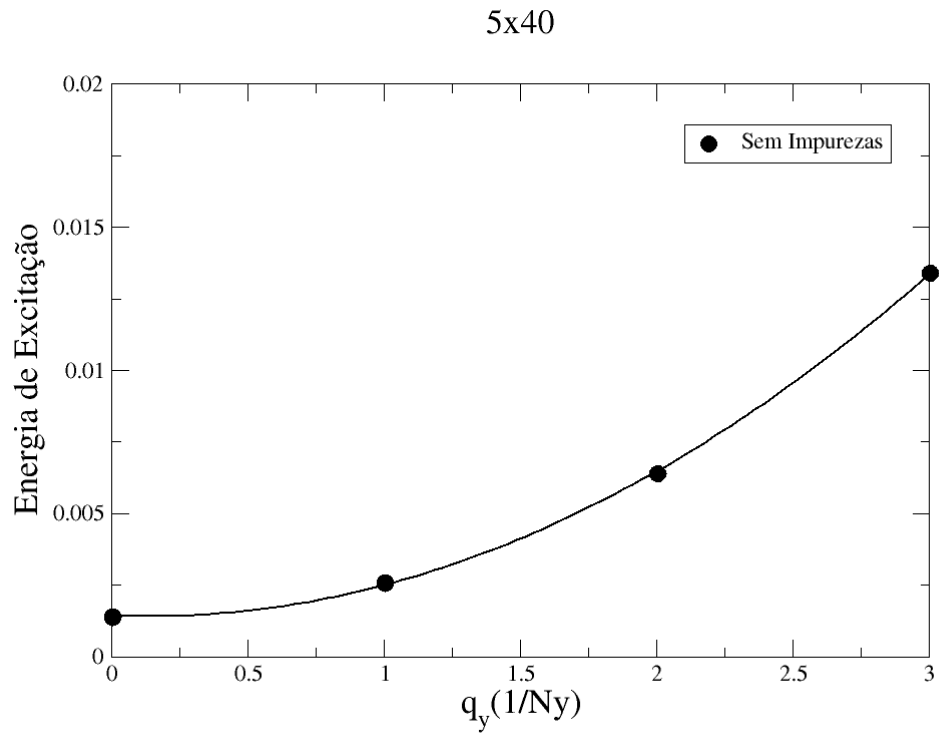


Figura 38: Relação de dispersão para a densidade espectral como função de q_y , para um plano magnético com dimensões 5x40

Na figura 38, encontramos que a relação de dispersão, para o cálculo feito no espaço real obedece a relação $\hbar\omega = Dq^2$, que já é conhecido [17] quando calculado no espaço recíproco para o cristal puro.

5 *Conclusões e perspectivas*

Nesse trabalho, estudamos o efeito de desordem nos espectros de excitação de spin filmes finos. O principal interesse foi compreender e calcular as variações sofridas na energia de excitação e no tempo vida das ondas de spin. Como vimos, essas propriedades das ondas de spin foram calculadas a partir da susceptibilidade magnética em RPA e este resultado é muito bem conhecido para os cristais puros. Mostramos que inserir desordem utilizando métodos de meio efetivo e aproximar a média dos produtos das funções de Green por produto das médias não é suficiente. Uma vez que as flutuações desprezadas tem alta relevância já que a susceptibilidade RPA é escrita em termos do inverso da susceptibilidade HF e esta, em termos do produto das funções de Green. Os resultados que obtivemos não foram adequados porque a variação nos espectros foram muito grandes, atingindo diferenças de 70% para concentrações de impureza de 0.5% e 1000% para concentrações de 10%. No modo uniforme encontramos que a desordem calculada em CPA afeta de forma especialmente contra-intuitiva, pois o campo de excitação é uniforme no espaço, este modo tem custo energético zero para amostras cristalinas.

Alternativamente, calculamos o produto de funções de Green de forma exata no caso de uma impureza substitucional. Esse difere do cálculo de meio efetivo no termo que tem convolução de quatro funções de Green. Isso ocorre porque há uma diferença entre calcular o produto da média de funções de Green ou a média do produto de funções de Green. O cálculo exato tende a ser menor que os cálculos de meio efetivo, já que o termo que é desprezado tem sinal contrário ao termo que é igual nas duas abordagens.

Diante das limitações e dificuldades no cálculo analítico, efetuamos o cálculo da susceptibilidade no espaço real. No espaço real o modo uniforme não é muito afetado pela desordem e os modos $q = 1$ e $q = 2$, são afetados pela desordem, mas dentro do esperado de que os efeitos de desordem estejam na mesma ordem da perturbação imposta. O efeito das impurezas é muito diferente se $t' = t$ ou se $t' = 0,5t$; ou seja, quando a densidade de modos de Stoner já é grande no sistema puro, as impurezas tem efeito menor. No caso $t' = 0,5t$ as dependências da energia e do parâmetro de amortecimento com a concen-

tração parecem ser bastante não monotônicas, inclusive para concentrações baixas. Esse comportamento dificilmente seria capturado por algum cálculo de meio efetivo, já que elas tendem a prever um comportamento linear dos desvios das grandezas físicas com a concentração.

Como perspectivas futuras, nossa ideia é calcular outras propriedades como o acoplamento de troca entre sítios. Também queremos complementar esse cálculo inserindo o acoplamento spin-órbita no hamiltoniano. Nossa ideia, com esse modelo, é que possamos modelar todo conjunto substrato-filme inserindo algumas camadas adicionais nos próximos cálculos.

APÊNDICE A - Cálculo do Estado Fundamental

Adotando o hamiltoniano de Hubbard, indicado na equação 1.1, podemos, além da densidade, de estados calcular também a magnetização, o número médio de elétrons por sítios e o centro da banda (estamos supondo um orbital por sítio).

Obtivemos no primeiro capítulo a definição da densidade de estados. Em termos dessa densidade de estados, poderemos calcular o número de elétrons em cada direção de spin, para podermos calcular m e n , como definido em 1.3 e 1.4. Sendo σ uma direção de spin arbitrária, podemos inferir que o número médio de elétrons com essa direção de spin será

$$\langle n_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^{E_f} \rho_\sigma(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (\text{A.1})$$

em que E_f é a energia de Fermi, ou seja, o nível de energia máximo de um estado acessível para o elétron nesse cristal e $f(\omega)$ é a distribuição estatística de Fermi-Dirac,

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{-\beta(\omega-\mu)} + 1}. \quad (\text{A.2})$$

De fato, o que temos que fazer é resolver a integral A.1, mas não é completamente trivial, em virtude dos pólos da função de Green existentes sobre o eixo real. Com isso, é conveniente utilizar a propriedade de que a integral complexa ao longo de um caminho fechado é zero, se não houver pólos.

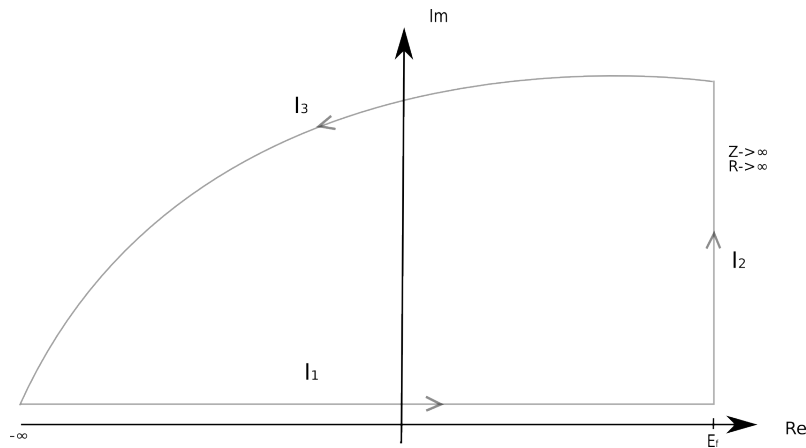


Figura 39: Representação gráfica da integral A.1, representada por I_1 , no plano complexo.

Para resolvermos a integral, deslocamos levemente do eixo real, de um fator η , que já foi definido anteriormente, e fechamos a curva de modo de podemos aplicar o Teorema de Cauchy [32], que garante que uma integral, ao longo de uma curva fechada, e que não possua pólos, será zero. Logo podemos escrever a nossa integral I_1 como

$$I_1 = -(I_2 + I_3). \quad (\text{A.3})$$

Ao aplicar as propriedades do plano complexo, temos que I_1 é completamente escrita em termos da parte imaginária de $g(\omega)$, I_2 em termos da parte real, e I_3 , é um contorno circular que possui as duas componentes.

$$I_1 = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_f} \text{Im}[g(\omega)] d\omega \quad (\text{A.4})$$

$$I_2 = -\frac{1}{\pi} \int_{\eta}^{\infty} \text{Re}[g(\omega)] d\omega \quad (\text{A.5})$$

$$I_3 = -\frac{1}{\pi} \int_{\pi/2}^{\pi} \int_0^{\infty} g(\omega) R dR d\theta \quad (\text{A.6})$$

Para determinar o valor de I_3 , consideramos que $\lim_{z \rightarrow 0} G(z) = \frac{1}{z}$, e então temos que I_3 obtem a forma

$$I_3 = -\frac{1}{\pi} \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{1}{R} R d\theta \quad (\text{A.7})$$

$$I_3 = -\frac{1}{2}. \quad (\text{A.8})$$

Portanto, somando a I_2 e substituindo na equação A.3 obtemos que a integral que corresponde a $\langle n_\sigma \rangle$ é

$$\langle n_\sigma \rangle = \langle n \rangle \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_{\eta}^{\infty} \text{Re}[g(E_f + i\xi)] d\xi \quad (\text{A.9})$$

Essa é a expressão que representa o número médio de elétrons por sítio no cristal, porém, do ponto de vista do cálculo numérico é complicado obter o valor de uma integral que tem limites infinitos. Nesse caso específico, a solução mais prática é efetuar uma transformação de variáveis, com a finalidade de obter novos limites, dessa vez, finitos. A transformação escolhida é

$$\xi = \frac{y + \eta}{1 - y} \quad (\text{A.10})$$

$$d\xi = \frac{1 + \eta}{(1 - y)^2} dy. \quad (\text{A.11})$$

logo, se aplicarmos na integral A.9, obtemos

$$\langle n \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^1 \text{Re}[g(E_f + iy)] \frac{1 + \eta}{(1 - y)^2} dy \quad (\text{A.12})$$

que é calculada, agora, entre 0 e 1. Esses limites são muito adequados, pois podemos utilizar métodos numéricos de quadratura, em que, com poucos pontos, é possível obter o valor da integral com muita precisão.

As condições iniciais para essa integral pode ser arbitrárias uma vez que podemos utilizar um cálculo autoconsistente para obter os valores de $\langle n_\uparrow \rangle$ e $\langle n_\downarrow \rangle$. Sendo que o vínculo obrigatório é a necessidade de conhecer o valor total de elétrons por sítio, a equação recorrente é

$$f(E_0) = \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle - n_0 \quad (\text{A.13})$$

em que n_0 é o número total de elétrons por sítio. De modo simples, podemos atribuir um valor inicial para o centro de banda E_0 , e uma magnetização inicial $m = \langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle$ que aqui é o nosso primeiro ponto de convergência. Nessa equação a solução é E_0 e então podemos obter $\langle n_\sigma \rangle$, para ambas as direções de spin, atualizado. Finalmente calculando novos m e $\langle n \rangle$, esse calculo termina quando é obtido convergência em m .

Para que o estado fundamental também seja encontrado, é necessário que se obedeça o critério de Stoner [33]

$$U\rho(E_F) > 1. \quad (\text{A.14})$$

Em nossos cálculos para que possamos representar os valores bem definidos do Cobalto e aproximação das 10 bandas em duas bandas efetivas, fazemos $E_F = 0.15$, $U = 12$ e $n = 1.68$.

APÊNDICE B - Susceptibilidade na presença de uma única impureza

B.1 Expressão Analítica para uma impureza

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{HF}(\vec{q}_{||}, \omega) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') [G_{ji}^{\uparrow}(\omega') G_{ij}^{\downarrow}(\omega + \omega') - G_{ji}^{*\downarrow}(\omega') G_{ij}^{*\uparrow}(\omega' - \omega) + \\ + G_{ij}^{\downarrow}(\omega') G_{ij}^{*\uparrow}(\omega' - \omega) - G_{ij}^{*\uparrow}(\omega') G_{ij}^{\downarrow}(\omega' + \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Fazendo a transformada de Fourier inversa da Função de Green.

$$G_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} G^0(\vec{k}, \omega) + \frac{1}{N^2} \sum_{k, k'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} G^0(\vec{k}, \omega) A(\omega) G^0(\vec{k}', \omega) \quad (\text{B.2})$$

em que $A(\omega) = W(1 - G_{00}^0 W)^{-1}$ é o termo que representa a autoenergia devido à desordem.

A Transformada de Fourier inversa de χ_{ij}^{HF} ,

$$\chi_{ij}^{HF}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{q, q'} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} e^{-i\vec{q}' \cdot \vec{R}_j} \chi^{HF}(q, q', \omega) \quad (\text{B.3})$$

é usada para identificar as parcelas do cálculo de $\chi_{ij}^{HF}(\omega)$ que representam $\chi^{HF}(q, q', \omega)$.

Obteremos uma expressão para χ^{HF} , tal que possamos escrever

$$\chi^{HF} = \chi^{0HF} + \delta\chi^{0HF}. \quad (\text{B.4})$$

em que χ^{0HF} é a representação para o cristal puro que já vimos no capítulo 3, e $\delta\chi^{0HF}$

é uma correção que representa cada configuração de impureza. Como já conhecemos χ^{0HF} vamos obter $\delta\chi^{0HF}$, para que possamos ter χ^{HF} em sua forma completa.

Vamos calcular a primeira parcela de 3.4.

$$\begin{aligned}
G_{ji}^\uparrow(\omega')G_{ij}^\downarrow(\omega' + \omega) &= \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_i)} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_i-\vec{R}_0)} e^{i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_0-\vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}', \omega' + \omega) A^\downarrow(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0-\vec{R}_i)} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_0)} e^{i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i-\vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^4} \sum_{k,k',k'',k'''} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0-\vec{R}_i)} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_0)} e^{i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i-\vec{R}_0)} e^{i\vec{k}'''\cdot(\vec{R}_0-\vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) A^\downarrow(\omega' + \omega) \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}''', \omega' + \omega) \tag{B.5}
\end{aligned}$$

Podemos identificar na equação acima, qual será o termo correspondente a $\delta\chi^{0HF}(q, q', \omega)$, ao comparar com a equação 3.6.

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^\downarrow(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) \times \\
&\times A^\downarrow(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega' + \omega) \tag{B.6}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{ji}^{\downarrow*}(\omega')G_{ij}^{\uparrow*}(\omega' - \omega) &= \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}'', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}'', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^4} \sum_{k,k',k'',k'''} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}'''\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}'', \omega' - \omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}''', \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.7}$$

Podemos identificar na equação acima, qual será o termo correspondente a $\delta\chi^{0HF}(q, q', \omega)$, ao comparar com a equação 3.6.

$$\begin{aligned}
II &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q})\cdot\vec{R}_0} G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.8}$$

$$\begin{aligned}
G_{ij}^{\downarrow}(\omega')G_{ij}^{\uparrow*}(\omega' - \omega) &= \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}'', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k,k',k''} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') A^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}'', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^4} \sum_{k,k',k'',k'''} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}''\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{-i\vec{k}'''\cdot(\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') A^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}'', \omega' - \omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}''', \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.9}$$

Podemos identificar na equação acima, qual será o termo correspondente a $\delta\chi^{0HF}(q, q', \omega)$, ao comparar com a equação 3.6.

$$\begin{aligned}
III &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
G_{ij}^{\uparrow*}(\omega') G_{ij}^{\downarrow}(\omega' + \omega) &= \frac{1}{N^3} \sum_{k, k', k''} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}', \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k, k', k''} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^4} \sum_{k, k', k'', k'''} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_0 - \vec{R}_i)} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_0)} e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_0)} e^{i\vec{k}''' \cdot (\vec{R}_0 - \vec{R}_j)} \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}'', \omega' + \omega) \times \\
&\times A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}''', \omega' + \omega)
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Podemos identificar na equação acima, qual será o termo correspondente a $\delta\chi^{0HF}(q, q', \omega)$, ao comparar com a equação 3.6.

$$\begin{aligned}
IV &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega' + \omega)
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Logo, temos:

$$\delta\chi^{HF}(q, q', \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') [I + II + III + IV] \quad (\text{B.13})$$

A integral acima resulta na soma das seis integrais abaixo.

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) \times \\ &\times A^\downarrow(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) + \\ &+ G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Fazendo a mudança de variáveis $\omega' = \omega_f + iy$.

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega_f + iy) \times \\ &\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy + \omega) A^\downarrow(\omega_f + iy + \omega) \times \\ &\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy + \omega) + \\ &+ G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}, \omega_f + iy) A^\uparrow(\omega_f + iy) \times \\ &\times G^{0\uparrow}(\vec{k} - \vec{q}', \omega_f + iy) G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega_f + iy + \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') \times \\ &\times A^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^\downarrow(\omega' + \omega) \times \\ &\times G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega' + \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Fazendo a mudança de variáveis $\omega' = \omega_f + iy$.

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega_f + iy) \times \\ &\times A^\uparrow(\omega_f + iy) G^{0\uparrow}(\vec{k}', \omega_f + iy) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy + \omega) \times \\ &\times A^\downarrow(\omega_f + iy + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega_f + iy + \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

$$\begin{aligned}
I_3 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega' - \omega) + \\
&+ G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega)] \quad (\text{B.18})
\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis $\omega' = \omega_f + iy$.

$$\begin{aligned}
I_3 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega_f + iy) \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega_f + iy - \omega) A^{\uparrow*}(\omega_f + iy - \omega) \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega_f + iy - \omega) + G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy) \times \\
&\times A^{\downarrow*}(\omega_f + iy) G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}', \omega_f + iy) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega_f + iy - \omega)] \quad (\text{B.19})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_4 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') \times \\
&\times A^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega' - \omega)] \quad (\text{B.20})
\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis $\omega' = \omega_f + iy$.

$$\begin{aligned}
I_4 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \frac{1}{N^3} \sum_{k, k'} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_f + iy) A^{\downarrow*}(\omega_f + iy) \times \\
&\times G^{0\downarrow*}(\vec{k}' + \vec{q}', \omega_f + iy) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega_f + iy - \omega) \times \\
&\times A^{\uparrow*}(\omega_f + iy - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega_f + iy - \omega)] \quad (\text{B.21})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) A^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega' - \omega) + \\
&+ G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') A^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) - \\
&- G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) + \\
&- G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega)] \quad (\text{B.22})
\end{aligned}$$

Fazendo $\omega' \rightarrow \omega' + \omega$ na primeira e na segunda parcela,

$$\begin{aligned}
I_5 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [\times \\
&\times f(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') + \\
&+ f(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') - \\
&- f(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) + \\
&- f(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega)] \quad (\text{B.23})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [\times \\
&\times [f(\omega' + \omega) - f(\omega')] G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') + \\
&+ [f(\omega' + \omega) - f(\omega')] G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') + \\
&- [f(\omega' + \omega) - f(\omega')] G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') + \\
&- [f(\omega' + \omega) - f(\omega')] G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega)] \quad (\text{B.24})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_f - \omega}^{\omega_f} d\omega' \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') + \\
&+ G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') + \\
&- G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) A^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}', \omega' + \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') + \\
&- G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega)] \quad (\text{B.25})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_6 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega') A^\downarrow(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega'-\omega) A^{\uparrow*}(\omega'-\omega) \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega'-\omega) - G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) \times \\
&\times A^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega'+\omega)] \tag{B.26}
\end{aligned}$$

Fazendo $\omega' \rightarrow \omega' + \omega$ na segunda parcela

$$\begin{aligned}
I_6 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [\times \\
&\times f(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) A^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega'+\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') - f(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) \times \\
&\times A^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega'+\omega)] \tag{B.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_6 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_f-\omega}^{\omega_f} d\omega' \frac{1}{N^3} \sum_{k,k'} e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{R}_0} [\times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) A^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}'+\vec{q}', \omega'+\omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') A^{\uparrow*}(\omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}', \omega')] \tag{B.28}
\end{aligned}$$

B.2 Comparação entre CPA e Resultado Exato

Uma expressão análoga também é calculada para a aproximação CPA, nesse o obtido é:

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) t^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{k}, \omega'+\omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow}(\vec{k}-\vec{q}, \omega') t^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}-\vec{q}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega'+\omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') t^\uparrow(\omega') G^{0\uparrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) \times \\
&\times t^\downarrow(\omega'+\omega) G^{0\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}, \omega'+\omega) \tag{B.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
II &= \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) t^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') t^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') t^{\downarrow*}(\omega') G^{0\downarrow*}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) t^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.30}$$

$$\begin{aligned}
III &= \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) t^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') t^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') t^{\downarrow}(\omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega') \times \\
&\times G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega) t^{\uparrow*}(\omega' - \omega) G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega' - \omega)
\end{aligned} \tag{B.31}$$

$$\begin{aligned}
IV &= \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) t^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') t^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k} - \vec{q}, \omega') G^{0\downarrow}(\vec{k}, \omega' + \omega) + \\
&+ \frac{1}{N^2} \sum_k G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') t^{\uparrow*}(\omega') G^{0\uparrow*}(\vec{k}, \omega') \times \\
&\times G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega) t^{\downarrow}(\omega' + \omega) G^{0\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}, \omega' + \omega)
\end{aligned} \tag{B.32}$$

em que t é a matriz obtida em 2.64.

Referências

- [1] Desemaranhando computadores quânticos, Scientific American Brasil. Disponível em http://www2.uol.com.br/sciam/noticias/desemaranhando_computadores_quanticos.html (Acesso em outubro de 2015).
- [2] Binasch, Grünberg, et al. "Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange." *Physical review B* 39.7 (1989): 4828.
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas., Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices, *Physical Review Letters*, 61(21):2472, 1988.
- [4] Lederer P. e Mills D. L., Electrical Resistivity of Dilute PdNi Alloys; Local Exchange Enhancement Effects, *Physical Review* 165,3, p837, 1968
- [5] Frota-Pessôa S., Muniz R. B. e Kudrnovsky J., Exchange coupling in transition-metal ferromagnets, *Physical Review B* 62, 9, p5293, 2000
- [6] Costa Jr A. T., Muniz R. B. e Mills D. L., Theory of spin waves in ultrathin ferromagnetic films: The case of Co on Cu (100), *Physical Review* 69, 064413 2004
- [7] Katine, J. A., Albert, F. J., Buhrman, R. A., Myers, E. B., Ralph, D. C. (2000). Current-driven magnetization reversal and spin-wave excitations in Co/Cu/Co pillars. *Physical Review Letters*, 84(14), 3149.
- [8] Peters, C. J., Birgeneau, R. J., Kastner, M. A., Yoshizawa, H., Endoh, Y., Tranquada, J., ... Murakami, T. (1988). Two-dimensional zone-center spin-wave excitations in La₂CuO₄. *Physical Review B*, 37(16), 9761.
- [9] Ji, Y., Chien, C. L., Stiles, M. D. (2003). Current-induced spin-wave excitations in a single ferromagnetic layer. *Physical review letters*, 90(10), 106601.
- [10] Hasegawa H and Kanamori J 1971 *J . Phys. Soc. Japan* 31 382.
- [11] Hasegawa H and Kanamori J 1972 *J . Phys. Soc. Japan* 33 1599
- [12] Hasegawa H and Kanamori J 1972 *J . Phys. Soc. Japan* 33 1607
- [13] Fukuyama H 1973 *Proc. Conf. on Magnetism and Magnetic Materials. Denver 1972 AIP. Conf Proc. No 10. P 1127.*
- [14] Hill D J and Edwards D M 1973 *J . Phys. F: Metal Phys.* 3 L162
- [15] Riedinger R and Nauciel-Bloch M 1975 *J . Phys. F: .Metal Phys.* 5 732

- [16] Hennion M. Hennion B. Nauciel-Bloch M and Riedinger R 1976 J . Phys. F: Metal Phys. 8, 287.
- [17] Barbosa L. H. M. , Muniz R. B. ,Costa A. T. e Mathon J., Spin waves in ultrathin ferromagnetic overlayers, Phys. Rev. B, 63:174401, 2001.
- [18] D. L. Mills, Thermodynamic Properties of Ultrathin Ferromagnetic Films, Ultrathin Magnetic Structures I, Springer, 2005.
- [19] H. Tang, M. Plihal, e D. L. Mills, Theory of the spin dynamics of bulk Fe and ultrathin Fe (100) films, J. Magn. Magn. Mater. 187,23 1998
- [20] FETTER, A. L. e WALECKA, J. D., Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill Book Company, 1971.
- [21] Sakurai J. J., Modern Quantum Mechanics 2ed, Pearson, 2010
- [22] Zubarev D. N., Double-time Green functions in statistical physics, Physics-Uspekhi,3(3):320-345, 1960.
- [23] N. N. Bogoliubov, Jr. and B. I. Sadovnikov, Sov. Phys. JETP 16,82 (1963).
- [24] D. Bohm and D. Pines: A Collective Description of Electron Interactions. I. Magnetic Interactions, Phys. Rev. 82, 625-634 (1951)
- [25] R. B. Muniz and D. L. Mills, Theory of spin excitations in Fe (110) monolayers, Physical Review B 66, 174417 2002
- [26] M. Tovar Costa, J. d'Albuquerque e Castro, and R. B. Muniz, J. Phys.: Condens. Matter 7, 3453, 1995
- [27] D M Edwards and D J Hill 1976 J. Phys. F: Met. Phys. 6 607
- [28] Ehrenreich H. e Schartzwz M. L., Solid State Physics, Electronic Structure of Alloys, Vol 31, 1976
- [29] E. N. Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Springer, 2006.
- [30] J. Mathon, Spin-wave impurity states in metallic ferromagnets, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 45, 1984,p135.
- [31] T. L. Gilbert, A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials, IEEE Transactions on magnetics, Vol,. 40, No. 6, November 2004
- [32] CHURCHILL, R. V. Variáveis Complexas e Aplicações, Editora McGraw-Hill, 1975, São Paulo
- [33] Lourenço D., Excitações de Spin em Multicamadas Metálicas, 2013, Tese de Doutorado IF-UFF
- [34] D M Edwards and W-Y P Fung, J. Phys. F: Metal Phys.. Vol. 8. No. 10. 1978.
- [35] F. Block, Bemerkung zur Elektronentheorie des Ferromagnetismus und der elektrischen Leitfähigkeit, Z. Phys 57, 545 (1929)

- [36] Wigner, Eugene. "On the interaction of electrons in metals." *Physical Review* 46.11 (1934): 1002.
- [37] Slater, John C. "The ferromagnetism of nickel. II. Temperature effects." *Physical Review* 49.12 (1936): 931.
- [38] E.C. Stoner: *Proc. R. Soc.* A165, 372 (1938)
- [39] Slater J. C. and Koster G. F. , Simplified LCAO method for the periodic potential problem, *Phys. Rev.*, 94:1498-1524, Jun 1954.
- [40] Ashcroft N. W. e Mermin N. D., *Solid State Physics* (Holt), 1976.
- [41] Guimarães F., *Corrente de spins em nanoestruturas metálicas*, 2008, Dissertação de Mestrado IF-UFF
- [42] Hubbard J., Electron correlations in narrow energy bands, *Proc. R. Soc. Lond. A* 1963 276, 238-257
- [43] M. S. Phan, J. Mathon, D. M. Edwards, and R. B. Muniz, Theory of spin waves in magnetic overlayers and sandwiches, *J. Magn. Magn. Mater.* 104-107, 1876

