

Paulo
Affonso Affonso
you! Paulo

U.T. 105

UNIVERSIDADE DE S. PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

"AS APROXIMAÇÕES DE TYABLIKOV E DE CALLEN EM UM
MODÉLO SOLÚVEL"

MAURÍCIO D. COUTINHO FILHO

Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de
S. Paulo, como parte dos requi-
sitos para a obtenção do títu-
lo de "Mestre em Ciências"

SÃO PAULO

1 9 7 0



SBI-IFUSP



305M810T2990



À M A N I N H A

A G R A D E C I M E N T O S

- Ao Professor José Galvão Ramos, cuja orientação tornou possível este trabalho.
- Aos Professores Affonso A. Guidão Gomes e Mauro Cattani pela colaboração e incentivo.
- Ao Professor Jayme Tiomno e aos membros do Grupo de Partículas Elementares pela contribuição em nossa formação.
- Aos colegas Ivon P. Fittipaldi e Marco Antonio C.G. de Moura pelas discussões e incentivo.
- Aos Srs. Carlos Alvarenga, Perclides de Oliveira e Bruno Monzon pelos serviços de datilografia e impressão.
- Ao colega Fábio Reis pela elaboração dos gráficos.
- Aos colegas que colaboraram na parte de computação.
- Ao Conselho Nacional de Pesquisas, B.N.D.E., Instituto de Física da Universidade de São Paulo e Universidade Federal de Pernambuco por terem criado as condições necessárias à realização deste trabalho.
- A todos aqueles que estão contribuindo para o aparecimento de um novo grupo de Física no Nordeste.

S U M Á R I O

Nêste trabalho, a generalização do método das funções de Green Retardada e Avançada para operadores quaisquer é aplicada a um sistema consistindo de dois spins 1, - os quais são acoplados por "exchange". Assumimos que o acoplamento de "exchange" é descrito pelo Hamiltoniano Heisenberg, e sômente o caso ferromagnético ($J > 0$) é considerado.

A magnetização, as funções de correlação longitudinal, transversal e $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$, a suscetibilidade magnética para campo nulo e o calor específico magnético são calculados nas aproximações de Tyablikov e Callen. Êstes resultados são comparados com os resultados exatos, permitindo um estudo crítico das aproximações.

A B S T R A C T

In this work, the generalization of the Retarded and Advanced Green Functions to any operators is applied to a system consisting of two spins 1, which are coupled by exchange. We assume that the exchange coupling of the spins is described by the Heisenberg Hamiltonian, and only the case ferromagnetic ($J > 0$) is considered.

The magnetization, the longitudinal, transversal and $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ correlation functions, the zero-field magnetic susceptibility and the specific heat are evaluated in the Tyablikov and Callen approximations. These results are compared with the exact ones, permitting a critical study of these approximations.

Í N D I C E

I - Introdução	1
II - Método das Funções de Green Retardada e Avançada e sua Aplicação ao Ferromagnético Heisenberg	7
1) Funções de Correlação Dependente do Tempo	7
2) Funções de Green Retardada e Avançada	8
3) Representação Espectral	10
a) Representação Espectral das Funções de Correlação.....	10
b) Representação Espectral das Funções de Green	11
4) Propriedades Analíticas das Funções de Green	12
5) Cálculo das Funções de Correlação	16
a) Obtenção das Funções de Correlação pelo Salto das Funções de Green no Eixo Real	16
b) Dificuldade no Uso de Operadores Quaisquer na Teoria das Funções de Green ,.....	17
c) Obtenção das Funções de Correlação para Operadores Quaisquer	18
6) Aplicação ao Ferromagnético Heisenberg ,.....	22
III - Aproximação de Tyablikov	25
1) Equação Fundamental para o "Decoupling".....	25
2) Principais Resultados	25
IV - Aproximação de Callen	29
1) Equação Fundamental para o "Decoupling"	29
2) Principais Resultados	33
V - As Aproximações de Tyablikov e de Callen em um modelo Solúvel	37
1) Solução Pela Estatística Quântica	38
2) Solução pelo Método das Funções de Green	43
a) Aproximação de Tyablikov	44
b) Aproximação de Callen	54
c) Métodos de Cálculos	60
VI - Resumo e Discussão dos Resultados	62
1) Comparação dos Méritos das Aproximações	62
2) Comparação das Aproximações com o Resultado Exato.....	63
Referências	65

I - INTRODUÇÃO

Os fenômenos físicos estudados nos sólidos são em geral essencialmente cooperativos. Entre estes fenômenos está o magnetismo forte, que se apresenta em determinadas substâncias como os metais de terras raras, os metais de transição, os compostos isolantes magnéticos e ligas metálicas.

Entre os fenômenos de magnetismo forte destaca-se o ferromagnetismo, que se caracteriza pela existência de uma ordem quando a temperatura for menor que uma temperatura crítica (temperatura de Curie), consequência de interação eletrostática entre os íons associada ao mecanismo de exchange. Quando a temperatura do sólido for maior que a temperatura de Curie, a energia térmica $k_B T$ excede a energia de interação que ordena os momentos magnéticos dos íons, e a ordem ferromagnética é "quebrada".

Heisenberg⁽⁵⁾ propôs o seguinte Hamiltoniano efetivo para explicar o magnetismo forte:

$$H = - \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{h} \cdot \vec{S}_i \quad (I - 1)$$

$$J > 0 \text{ (ferromagnetismo)}$$

$$J < 0 \text{ (antiferromagnetismo)}$$

onde \vec{S}_i é o operador de spin associado ao ponto i do retículo cristalino, e \vec{h} um campo magnético externo. Em complementação ao Hamiltoniano de Heisenberg eq. (I - 1) temos as regras de comutação próprias dos operadores de spin:

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

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

$$\left[S_i^+, S_j^+ \right] = \left[S_i^-, S_j^- \right] = 0 \quad (\text{I} - 2c)$$

onde $S_i^+ = S_i^x + S_i^y$

Temos ainda as seguintes relações para estes operadores:

$$S_i^z = S(S + 1) - (S_i^z)^2 - S_i^- S_i^+ \quad (\text{I} - 3a)$$

$$(S_i^-)^{2S+1} = (S_i^+)^{2S+1} = 0 \quad (\text{I} - 3b)$$

e

$$\prod_{r=-S}^S (S_i^z - r) = 0 \quad (\text{I} - 3c)$$

O modelo supõe então que os eletrons das camadas parcialmente cheias sejam suficientemente localizados, de tal maneira que podemos associar um spin ou um spin efetivo a cada ponto i do retículo cristalino, definindo portanto os portadores de momento magnético. Neste modelo os mecanismos eletrônicos estão contidos na "integral de intercâmbio" (J), que será considerada um parâmetro na teoria. Este modelo descreve bastante bem o ferromagnetismo dos metais das terras raras e compostos isolantes magnéticos.

Para baixas temperaturas ($T \ll T_C$) a dependência na temperatura da magnetização espontânea é verificada experimentalmente na forma⁽²¹⁾:

$$M(T) = M(0) (1 - \alpha T^{3/2}) \quad (\text{I} - 4)$$

Bloch⁽¹⁹⁾ usando o Hamiltoniano Heisenberg estudou as excitações de um ferromagnético, onde o estado fundamental é o estado em que os spins se encontram perfeitamente alinhados. Os desvios da ordem magnética são fenômenos essencialmente cooperativos, e estas excitações são chamadas "ondas de -

spin". Tratando estas excitações como um sistema de bosons livres, Bloch de monstrou a eq. (I - 4) para baixas temperaturas. Este problema foi analisado em detalhe por Dyson⁽¹⁰⁾, usando teoria das perturbações, mostrando que as interações cinemáticas das ondas de spin ($(S_i^-)^{2S+1} = (S_i^+)^{2S+1} = 0$) não contribuem, e as interações dinâmicas (espalhamento das ondas de spin) contribuem com um termo proporcional a T^4 para a magnetização espontânea em baixas temperaturas. A expressão calculada por Dyson para a magnetização espontânea é dada por:

$$M(T) = M(0) (1 - T^{3/2} - bT^{5/2} - cT^{7/2} - dT^4) \quad (I - 5)$$

onde as potências semi-inteiras da temperatura correspondem às ondas de spins livres.

Em altas temperaturas ($T \geq T_C$) os ferromagnéticos podem ser descritos pela teoria do campo molecular, que tem obtido resultados concordantes com a experiência ($T \geq T_C$), em particular a temperatura de Curie⁽¹¹⁾.

Devemos salientar, como ressaltou Wortis⁽²⁰⁾, que a termodinâmica do Hamiltoniano Heisenberg deve satisfazer duas propriedades fundamentais:

- 1) A cinemática local dos spins representada pelas regras de comutação.
- 2) Os estados coletivos de baixas energias tem caráter de quase-partícula (onda de spin).

Devido ao caráter cooperativo dos fenômenos nos sólidos, a estatística, em especial a estatística quântica, é a base teórica em que se fundamentam os estudos neste campo. Na estatística quântica a cada quantidade física f associamos um operador F . Os valores observados desta quantidade são as médias estatísticas dadas por:

$$f = \langle F \rangle = T_N (F\rho) \quad (I - 6)$$

onde ρ é a matriz densidade que exprime o sistema da maneira mais completa. Podemos ir adiante e pensar em F como sendo o produto de dois operadores - $A(t)$ e $B(t')$ (dados na representação Heisenberg), e então teremos o que se define por "função de correlação dependente do tempo":

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t), B(t') \rangle \quad (I - 7)$$

Veremos que $F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t - t')$ e conseqüentemente para $t = t'$ as funções de correlação se confundem com as médias estatísticas usuais. Podemos ter ainda funções de correlação envolvendo mais de dois operadores. Funções de correlação dependentes do tempo são em geral usadas em processos não estacionários e quando $t = t'$ temos as médias estatísticas usuais, usadas em processos estacionários.

O método das funções de Green retardada e avançada se apresenta como uma ferramenta poderosa na obtenção destas funções de correlação e fornece em geral um tratamento efetivo para os fenômenos cooperativos, principalmente porque tenta descrevê-los em todo o intervalo de temperatura, sendo atualmente muito usada na mecânica estatística, em particular no estudo do magnetismo forte (17, 22).

Com o conhecimento das funções de Green apropriadas, determinamos as funções de correlação correspondentes. No entanto, como mostraremos no capítulo II, onde daremos um resumo sobre as funções de Green, estas funções são soluções de uma cadeia infinita de equações de movimento acopladas. Mais exatamente, a equação de movimento de uma função de Green $\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle$ envolverá a função $\langle\langle [A(t), H]_-; B(t') \rangle\rangle$, cuja equação de movimento envolverá a função $\langle\langle [[A(t), H]_-, H]_-; B(t') \rangle\rangle$, e por indução temos a cadeia infinita de equações acopladas. A solução deste sistema, exceto casos particulares, é praticamente impossível, concluindo-se então que para obtermos uma

solução será necessário "quebrar" a cadeia de equações de alguma maneira. Isto será feito exprimindo funções de Green em termos de funções de Green de ordem inferior, de maneira aproximada. Este mecanismo é usualmente denominado "decoupling". Evidentemente, não existe uma maneira única para esta "quebra". Existem vários "decoupling" propostos^(7, 8, 12, 27) e em geral dão melhores ou piores aproximações em problemas e condições particulares.

O objetivo deste trabalho é o estudo de dois destes "decoupling", o R.P.A. ("Random Phase Approximation") proposto por Tyablikov^(7, 8), e a aproximação simétrica proposta por Callen⁽¹²⁾ para o Hamiltoniano Heisenberg, cujos resultados gerais serão apresentados nos capítulos 3 e 4 respectivamente. Os resultados fornecidos pelas aproximações de Tyablikov e Callen são usualmente comparados com os resultados de Dyson⁽¹⁰⁾ para baixas temperaturas e com os da teoria de Campo Molecular⁽¹¹⁾ para altas temperaturas.

Os "decoupling" acima referidos serão testados com um modelo ferromagnético, em que se supõe o sistema formulado por "clusters" independentes, compostos de dois spins 1 localizados, solúvel exatamente por estatística quântica no capítulo V.

Os resultados fornecidos por estas aproximações no modelo ferromagnético considerado poderão ser comparados com os resultados exatos em todo o intervalo de temperatura. Esta comparação dará então uma idéia qualitativa global destas aproximações, pois poderemos comparar várias grandezas termodinâmicas em todo o intervalo de temperatura. Por outro lado, faremos um teste crítico destas aproximações, desde que o modelo ferromagnético considerado é o caso particular mais simples do Hamiltoniano Heisenberg.

Patterson e Southwell⁽¹⁶⁾ estudaram a aproximação R. P. A., usando modelo idêntico com spin 1/2. Neste caso a relação geral (eq. (I - 3a)) fica simplesmente:

$$S_i^z = \frac{1}{2} - S_i^- S_i^+ \quad (\text{I} - 8)$$

o que torna o caso spin 1/2 muito particular, como veremos na apresentação dos "decoupling" nos capítulos II e III⁽²³⁾.

No caso de spin 1 ou maior que 1, temos exatamente a relação geral eq. (I - 3a), Para o caso de spin 1 temos:

$$S_i^z = 2 - (S_i^z)^2 - S_i^- S_i^+ \quad (I - 9)$$

modificando inclusive o mérito das aproximações.

Calcularemos a magnetização, calor específico, suscetibilidade a campo nulo, funções de correlação longitudinal, transversal e $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ nas aproximações de Tyablikov e Callen nos capítulos 6 e 7 e as compararemos com a solução exata utilizando os gráficos nas figuras 3 a 10, permitindo portanto o estudo crítico destas aproximações.

II - FUNÇÕES DE GREEN RETARDADA E AVANÇADA⁽¹⁾ E SUA
APLICAÇÃO AO FERROMAGNÉTICO HEISENBERG

1) Funções de Correlação Dependente do Tempo

Sejam $A(t)$ e $B(t')$ dois operadores de campo na representação de Heisenberg, isto é:

$$A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt} \quad e \quad B(t') = e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'} \quad (\text{II - 1})$$

onde H é o operador Hamiltoniano do sistema.

As médias estatísticas do produto destes operadores são chamadas - funções de correlação dependente do tempo, ou seja:

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle = \frac{T_r e^{-\beta H} A(t) B(t')}{T_r e^{-\beta H}} = \frac{1}{Z} T_r e^{-\beta H} A(t) B(t') \quad (\text{II - 2a})$$

e

$$F_{BA}(t, t') = \langle B(t') A(t) \rangle = \frac{1}{Z} T_r e^{-\beta H} B(t') A(t) \quad (\text{II - 2b})$$

onde $\beta = 1/KT$ e $Z = T_r e^{-\beta H}$ é a função de partição.

Vamos agora mostrar que a dependência temporal das funções de Green é na forma $(t - t')$. Utilizando a eq. (II - 1) em (II - 2a), temos:

$$F_{AB}(t, t') = \frac{1}{Z} T_r e^{-\beta H} e^{iHt} A e^{-iH(t-t')} B e^{-iHt'} \quad (\text{II - 3})$$

onde $A = A(0)$ e $B = B(0)$

Usando a propriedade cíclica do traço, teremos:

$$F_{AB}(t, t') = \frac{1}{Z} T_r e^{-\beta H} e^{iH(t-t')} A e^{-iH(t-t')} B = \langle A(t-t') B \rangle = F_{AB}(t-t')$$

portanto:

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \langle A(t-t') B \rangle \quad (\text{II} - 4a)$$

Da mesma forma,

$$\langle B(t') A(t) \rangle = \langle B A(t-t') \rangle \quad (\text{II} - 4b)$$

Para $t = t'$ temos as médias estatísticas usuais:

$$\langle A(t) B(t) \rangle = \langle A B \rangle \quad (\text{II} - 5a)$$

$$\langle B(t) A(t) \rangle = \langle B A \rangle \quad (\text{II} - 5b)$$

Lembrando a equação de movimento do operador $A(t)$:

$$i \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H] \quad (\text{II} - 6)$$

e diferenciando em relação a t as equações (II - 2), teremos as equações de movimento para as funções de correlação dependente do tempo:

$$i \frac{d}{dt} F_{AB} = \langle [A(t), H] B(t') \rangle \quad (\text{II} - 7a)$$

$$i \frac{d}{dt} F_{BA} = \langle B(t') [A(t), H] \rangle \quad (\text{II} - 7b)$$

As condições de contorno serão introduzidas posteriormente, com utilização da representação espectral.

2) Funções de Green Retardada e Avançada

Definiremos as funções de Green retardada e avançada, pelas seguintes relações:

$$G_{AB}^{(r)}(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r = -i \Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \quad (\text{II} - 8a)$$

$$G_{AB}^{(a)}(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_a = i \Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \quad (\text{II} - 8b)$$

onde $[A, B] = AB - \eta BA$, com $\eta = +1, -1$, para comutador ou anticomutador, respectivamente.

Pelas definições (II - 8a) e (II - 8b), vemos que as funções de Green são dadas em termos das funções de correlação dependentes do tempo. Então, a dependência temporal das funções de Green será na forma $(t-t')$, ou seja:

$$G_{AB}^{(r)}(t, t') = G_r(t-t') \quad (\text{II - 9a})$$

$$G_{AB}^{(a)}(t, t') = G_a(t-t') \quad (\text{II - 9b})$$

As equações de movimento para as funções de Green, são obtidas diferenciando as equações (II - 8) com respeito a t . Usando a equação (II - 6), e lembrando que

$$\frac{d}{dt} \Theta(t) = \delta(t), \text{ teremos respectivamente:}$$

$$i \frac{d}{dt} G_{AB}^{(r)}(t) = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle\langle [A(t), H]_- ; B(t') \rangle\rangle \quad (\text{II - 10a})$$

$$i \frac{d}{dt} G_{AB}^{(a)}(t) = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle\langle [A(t), H]_- ; B(t') \rangle\rangle \quad (\text{II - 10b})$$

As condições de contorno serão introduzidas posteriormente, com utilização da representação espectral.

Vemos então pelas equações (II - 10), que as funções de Green retardada e avançada obedecem a mesma equação de movimento, e salientamos a descontinuidade $\delta(t-t')$ nestas equações, o que não ocorre para as equações de movimento das funções de correlação. Vemos também que o segundo membro contém a função de Green $\langle\langle [A(t), H]_- ; B(t') \rangle\rangle$ e, análogamente, sua equação de movimento conterá a função $\langle\langle [A(t), H]_- ; H]_- ; B(t') \rangle\rangle$. Portanto, as equações de movimento contém funções de Green de ordem superior, e por indução, vemos que o problema geralmente resulta em uma cadeia infinita de equações acopladas, cuja solução exata é praticamente impossível.

Conclui-se assim, que em geral para obtermos uma solução, será necessário "quebrar" a cadeia de equações de alguma maneira. Isto será feito, ex-

primindo funções de Green em termos de funções de Green de ordem inferior, - de maneira aproximada. Este mecanismo é usualmente denominado "decoupling".

Podemos então afirmar, que toda a problemática envolvida no uso - das funções de Green, retardada e avançada, para a descrição dos fenômenos - cooperativos, reside exatamente no fato de que em geral não conseguimos calcular exatamente estas funções para os fenômenos em estudo.

É importante salientar, que a existência da cadeia infinita de e- quações acopladas está intimamente ligada ao problema de muitos corpos. Mais explicitamente, a cadeia infinita existe, devido ao fato de não considerarmos independentes as partículas ou conjunto de partículas do sistema.

3) Representação Espectral

a) Representação Espectral das Funções de Correlação

Vamos supor $|n\rangle$ e E_n , como as auto-funções e auto-valores do Hamiltoniano de um sistema:

$$(H - E_n)|n\rangle = 0 \quad (\text{II} - 11)$$

usando o fato das funções $|n\rangle$ constituírem um conjunto completo de funções, podemos escrever as funções de correlação na forma:

$$F_{BA}(t-t') = \frac{1}{Z} T_{\tau} BA(t-t') e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n|B|m\rangle \langle m|A(t-t') e^{-\beta H} |n\rangle \quad (\text{II} - 12)$$

Lembrando a equação (II - 1) para os operadores $A(t)$ e $B(t')$, teremos para - (II - 12):

$$F_{BA}(t-t') = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_n} e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} \quad (\text{II} - 13a)$$

e análogamente:

$$F_{\overline{AB}}(t-t') = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_m} e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} \quad (\text{II} - 13b)$$

Apresentaremos agora a função fundamental na representação espectral, conhecida por "função espectral" ou "densidade espectral", definida pela seguinte equação:

$$J(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m - \omega) \quad (\text{II} - 14)$$

Podemos então reescrever formalmente as equações (II - 13), e teremos o que se conhece por representação espectral das funções de correlação dependentes do tempo:

$$F_{\overline{BA}}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 15a)$$

$$F_{\overline{AB}}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 15b)$$

b) Representação Espectral das Funções de Green

Subtraindo a eq. (II - 15b) da equação (II - 15a) multiplicada por η , teremos a representação espectral do comutador $\langle [A(t), B(t')] \rangle$:

$$\langle [A(t), B(t')] \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 16)$$

Vamos agora introduzir as transformadas de Fourier temporal das funções de Green:

$$G_{\overline{AB}}^{(j)}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}_{\overline{AB}}^{(j)}(\omega) e^{-iE(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 17a)$$

(j = r, a)

$$G_{\overline{AB}}^{(j)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}_{\overline{AB}}^{(j)}(t) e^{iEt} dt, \quad (t-t') \rightarrow t \quad (\text{II} - 17b)$$

Introduzindo a definição (II - 8a) da função de Green retardada, e a equação (II - 16), em (II - 17b), teremos:

$$G_{AB}^{(r)}(E) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \Theta(t) \quad (\text{II - 18})$$

A função $\Theta(t)$ tem uma representação integral⁽²⁾ dada na forma:

$$\Theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{e^{-i\omega't}}{\omega' + i\epsilon} \quad (\epsilon > 0) \quad (\text{II - 19})$$

Substituindo a eq. (II - 19) na eq. (II - 18), e lembrando:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i(\omega' - E + \omega)t} = \delta(\omega' - E + \omega)$$

teremos a representação espectral da função de Green retardada:

$$G_{AB}^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \frac{(e^{\omega\beta} - \eta)}{E - \omega + i\epsilon} \quad (\text{II - 20a})$$

e análogamente, podemos obter a representação espectral da função de Green a vançada:

$$G_{AB}^{(a)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \frac{(e^{\omega\beta} - \eta)}{E - \omega - i\epsilon} \quad (\text{II - 20b})$$

4) Propriedades Analíticas das Funções de Green

Nas secções anteriores, a energia era considerada uma quantidade real. Vamos agora, aceitar matematicamente valores complexos para a energia, o que possibilitará a utilização da teoria das funções analíticas, e trará resultados físicos importantes.

Como pré-requisito básico para esta generalização, temos que estudar a analiticidade das funções de Green. Para isto, vamos enunciar e demonstrar parte do teorema de Titchmarsh, que garantirá a extensão analítica das funções de Green.

Teorema de Titchmarsh⁽³⁾:

- a) A função $G(\omega_1)$ tem uma transformada de Fourier tal que se anula para $t < 0$ ($t > 0$).
- b) Existe e é única a extensão analítica do plano superior (inferior)
- c) A função complexa $G(\omega_1) = \text{Re } G(\omega_1) + i \text{Im } G(\omega_1)$, obedece a relação de dispersão:

$$\text{Re } G(\omega_1) = \frac{-P}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega_1 - \omega'_1}$$

$$\text{Im } G(\omega_1) = \frac{+P}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega_1 - \omega'_1}$$

a), b) e c) são afirmações idênticas de uma mesma propriedade, no sentido de que uma é condição necessária e suficiente para a outra.

Vamos mostrar que a) \rightarrow b), para o caso em que a transformada de Fourier se anula para $t < 0$. Admitiremos para garantir a convergência das integrais que:

$$G(\omega_1) \rightarrow 0 \\ \omega_1 \rightarrow \infty$$

ou então que $G(\omega_1)$ não cresça mais que um polinômio, ou seja:

$$(\omega_1^\alpha G(\omega_1)) \rightarrow \text{constante} \quad \alpha > 0, \\ \omega_1 \rightarrow \infty$$

o que permitirá fazer um número conveniente de "subtrações", para garantir a convergência.

A condição a) é escrita na forma:

$$G(\omega_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) e^{i\omega_1 t} d\omega_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} G(t) e^{i\omega_1 t} d\omega_1$$

Vamos definir a função complexa:

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) e^{i(\omega_1 + i\omega_2)t} dt = \int_0^{\infty} G(t) e^{i(\omega_1 + i\omega_2)t} dt$$

A função $f(\omega)$ goza das seguintes propriedades:

1) para $\omega_2 \rightarrow 0$, $f(\omega)$ tem a mesma transformada de Fourier de $G(\omega)$. Podemos então afirmar que:

$$f(\omega) \xrightarrow{\omega_2 \rightarrow 0} G(\omega_1)$$

2) $f(\omega)$ é analítica em $\omega_2 > 0$, o que é garantido devido a $G(t) = 0$ para $t < 0$.

3) $f(\omega)$ é única, o que provaremos em seguida:

Vamos aplicar o teorema de Cauchy às funções $f(\omega)$ e $f_1(\omega)$, para o contorno da figura 1. A função $f_1(\omega)$ é suposta ser analítica para $\omega_2 > 0$ e satisfaz também:

$$f_1(\omega) \xrightarrow{\omega_2 \rightarrow 0} G(\omega_1)$$

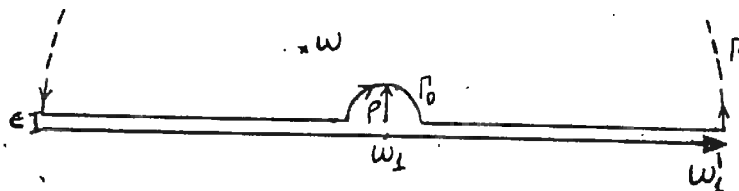


fig. 1

Aplicando então o teorema, teremos:

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$f_1(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f_1(\omega)}{\omega' - \omega} d\omega$$

Desprezando a contribuição do semi-círculo de raio infinito, temos:

$$f(\omega) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \rho \rightarrow 0 \\ \rho > \epsilon}} \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{-\infty + i\epsilon}^{\omega_1 - \rho + i\epsilon} \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega_1 + \rho + i\epsilon}^{\infty + i\epsilon} \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\Gamma_0} \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \right]$$

$$f_1(\omega) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \rho \rightarrow 0 \\ \rho > \epsilon}} \frac{1}{2\pi i} [f \rightarrow f_1]$$

e facilmente obtemos:

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \left[P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega'_1 - \omega_1} - i \tilde{\Pi} G(\omega_1) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega'_1 - \omega_1}$$

$$f_1(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \left[P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega'_1 - \omega_1} - i \tilde{\Pi}(\omega_1) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(\omega'_1) d\omega'_1}{\omega'_1 - \omega_1}$$

o que acarreta $f(\omega) = f_1(\omega) \quad (\omega > 0)$

Portanto, a função $G(\omega_1)$ tem continuação analítica no plano complexo superior, e esta continuação é única.

A própria definição da função de Green retardada na eq.(II-8a), nos afirma que:

$$G_{AB}^{(r)}(t) = 0 \quad t < 0 \quad (\text{II} - 21a)$$

o que garante a continuação analítica para $G_{AB}^{(r)}(E)$, em $I_m E > 0$, desde que satisfaz o teorema de Titchmarsh.

Analogamente, a definição da função de Green avançada na eq.(II-8b) nos afirma que:

$$G_{AB}^{(a)}(t) = 0 \quad t > 0 \quad (\text{II} - 21b)$$

Portanto, existe e é única a continuação analítica para $G_{AB}^{(a)}(E)$ em $I_m E < 0$.

Evidentemente, estas funções satisfazem também as relações de dispersão dadas no item c) do teorema.

As funções de Green retardada e avançada, podem ser reduzidas a uma única função analítica $G(E)$, com um corte no eixo real e possuindo dois ramos:

$$G_{AB}(E) = \begin{cases} G_{AB}^{(r)}(E) & I_m E > 0 \\ G_{AB}^{(a)}(E) & I_m E < 0 \end{cases} \quad (\text{II} - 22)$$

A representação espectral das funções de Green retardada e avançada dadas pelas equações (II-20) se reduzem agora a uma única equação com E complexo:

$$G_{AB}(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(e^{\omega\beta} - \eta)}{(E - \omega)} J(\omega) d\omega \quad (\text{II} - 23)$$

Vamos analisar as singularidades da função G(E) no eixo real. Substituindo a densidade espectral dada pela eq.(II-14) na eq. (II-23), teremos:

$$G_{AB}(E) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n,m} \frac{\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle (e^{\beta(E_n - E_m)} - \eta) e^{-\beta E_n}}{E + E_m - E_n} \quad (\text{II-24})$$

Portanto, as singularidades da função G(E) no eixo real são polos, e correspondem às excitações do sistema⁽⁶⁾.

5) Cálculo das Funções de Correlação

a) Obtenção das Funções de Correlação pelo Salto das Funções de Green no Eixo Real.

Vamos agora mostrar que o salto das funções de Green no eixo real determina completamente as funções de correlação. Usando a eq. (II-23) da continuação analítica das funções de Green para calcular o salto, teremos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' (e^{\omega'\beta} - \eta) J(\omega')$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\epsilon} \right]$$

e lembrando a relação⁽²⁾

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{X \pm i\epsilon} = P \frac{1}{X} \mp i\pi\delta(X) \quad (\text{II} - 25)$$

obtemos facilmente:

$$J(\omega) = \frac{i}{(e^{\omega\beta} - \eta)} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon) \right] \quad (\text{II} - 26)$$

Introduzindo a eq. (II - 25) na representação espectral das funções de Green dada pelas eqs. (II - 15a) e (II - 15b), obtemos:

$$F_{BA}(t-t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 27a)$$

$$F_{AB}(t-t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{\omega\beta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 27b)$$

e para $t = t'$ teremos as médias estatísticas usuais:

$$F_{BA}(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} d\omega \quad (\text{II} - 28a)$$

$$F_{AB}(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{\omega\beta} d\omega \quad (\text{II} - 28b)$$

b) Dificuldade no uso de Operadores Quaisquer na Teoria das Funções de Green

Em geral, os operadores usados na teoria das funções de Green são operadores de campo, e portanto são nulos os seus elementos de matriz diagonais. No entanto, em determinados problemas utilizamos operadores quaisquer, que em geral não tem nulos os seus elementos de matriz diagonais ($E_n = E_m$). Isto acarretará diferença fundamental, no cálculo das funções de correlação utilizando o salto das funções de Green, como veremos em seguida. Em parti-

cular, êste problema existe para o Hamiltoniano Heisenberg, que é dado em função dos operadores de spin.

Usando a eq.(II-1) para os operadores $A(t)$ e $B(t')$, e as auto-funções do Hamiltoniano, os valores médios do comutador e anticomutador destes operadores são dados por:

$$\langle [A(t), B(t')]_- \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) e^{-i(E_n - E_m)(t-t')} \quad (\text{II} - 29a)$$

$$\langle [A(t), B(t')]_+ \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) e^{-i(E_n - E_m)(t-t')}. \quad (\text{II} - 29b)$$

Vemos pela eq. (II-29a), que apesar de cada função de correlação conter todos os elementos da matriz, o valor médio do comutador não contém os elementos de matriz com estados de mesma energia (elementos de matriz diagonais). Portanto, para operadores quaisquer, em geral as funções de Green não conterão todas as informações das funções de correlação, e o cálculo destas funções pelas equações (II-27) com comutador, não estará completo.

c) Obtenção das Funções de Correlação para Operadores Quaisquer⁽⁴⁾

Vamos agora analisar o comportamento das funções de Green com comutador e anticomutador para $E = 0$, e esta análise terá papel fundamental na solução da dificuldade anterior.

Substituindo a eq. (II-14) da densidade espectral, na eq. (II-23) - da extensão analítica das funções de Green, teremos:

$$G_{AB}(E) = \frac{1}{2 \pi Z} \sum_{n,m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \frac{(e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n})}{E + E_m - E_n} \quad (\text{II} - 30)$$

Obtemos então facilmente:

$$\langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{(-)} = \frac{1}{2 \prod Z} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \frac{(e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n})}{E + E_m - E_n} \quad (\text{II-31a})$$

$$\langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{(+)} = \frac{1}{2 \prod Z} \sum_{n,m} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \frac{(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})}{E + E_m - E_n} \quad (\text{II - 31b})$$

Como na eq. (II - 31a) $E_n \neq E_m$, não haverá polo em $E = 0$, ou seja:

$$\lim_{E \rightarrow 0} \left[E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{(-)} \right] = 0 \quad (\text{II - 32})$$

No entanto, para a eq. (II-31b), obtemos:

$$\lim_{E \rightarrow 0} \left[E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{(+)} \right] = \frac{C}{\prod} \quad (\text{II - 33})$$

onde:

$$C = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{n,m \\ E_n = E_m}} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_n} \quad (\text{II - 34})$$

Verificamos portanto, que as funções de Green com comutador não possuem polo em $E = 0$, ao contrário das funções de Green com anticomutador que podem possuir polo, cujo resíduo é $\frac{C}{\prod}$; C em (II-34).

Comparando as equações (II-14) e (II-34), vemos que a densidade espectral pode ser escrita na forma:

$$J(\omega) = J_0(\omega) + J^1(\omega) \quad (\text{II - 35})$$

onde:

$$J_0(\omega) = C \mathcal{D}(\omega) \quad (\text{II - 36})$$

e

$$J'(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m - \omega) \quad (\text{II} - 37)$$

$J'(\omega)$ contém então apenas a parte de excitação do sistema.

Usando a eq. (II - 35) na eq. (II - 23) da extensão analítica das funções de Green, obtemos para comutador e anticomutador, respectivamente:

$$\langle\langle A ; B \rangle\rangle_E^{(-)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\omega\beta} - 1) \frac{J'(\omega)}{E - \omega} d\omega \quad (\text{II} - 38a)$$

$$\langle\langle A ; B \rangle\rangle_E^{(+)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\omega\beta} + 1) \frac{J(\omega)}{E - \omega} d\omega \quad (\text{II} - 38b)$$

Pela eq. (II - 38a), vemos que as funções de Green com comutador contêm apenas as informações das excitações do sistema, ao contrário das funções de Green com anticomutador que contêm a densidade espectral completa. Reciprocamente, $J'(\omega)$ e $J(\omega)$ são obtidas usando-se as eqs. (II - 38a) e (II - 38b), respectivamente:

$$J'(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\langle\langle A ; B \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}^{(-)} - \langle\langle A ; B \rangle\rangle_{\omega-i\epsilon}^{(-)} \right] \quad (\text{II} - 39a)$$

$$J(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\langle\langle A ; B \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}^{(+)} - \langle\langle A ; B \rangle\rangle_{\omega-i\epsilon}^{(+)} \right] \quad (\text{II} - 39b)$$

Utilizando agora a eq. (II - 35) nas eqs. (II - 15) da representação espectral das funções de Green, temos:

$$F_{BA}(t, t') = C + \int_{-\infty}^{+\infty} J'(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 40a)$$

$$F_{AB}(t, t') = C + \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{II} - 40b)$$

Portanto, as funções de correlação contêm a parte devida às excitações do sistema, e outra independente do tempo, que é calculada pelo resíduo da função de Green com anticomutador em $E = 0$.

Desta análise concluímos que:

- Como as funções de correlação são calculadas a partir das funções de Green, e estas são obtidas aproximadamente pelos "decoupling", temos que atender certos requisitos, principalmente quando do uso de operadores quaisquer, no cálculo das funções de correlação.

Requisitos para os "decoupling":

1) Devido à eq. (II-32), a função de Green com comutador não deve ter polo em $E = 0$, ou seja:

$$\lim_{E \rightarrow 0} \left[E \lll A; B \ggg_E^{(-)} \right] = 0$$

2) Devido à eq. (II - 37), $J'(0) = 0$, e portanto devemos ter:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} J'(\omega) = i \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{d\omega} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\lll A; B \ggg_{\omega+i\epsilon}^{(-)} - \lll A; B \ggg_{\omega-i\epsilon}^{(-)} \right]}{\frac{d}{d\omega} (e^{\omega\beta} - 1)} = 0$$

(os requisitos 1) e 2) são satisfeitos ou não, simultaneamente:

3) No cálculo das funções de correlação usando o salto das funções de Green com comutador, a parte independente do tempo é determinada pelo seguinte algoritmo: (4)

- a parte independente do tempo das funções de correlação, são determinadas calculando-se o resíduo das funções de Green nestas aproximações em $E = 0$, ou seja:

$$\lim_{E \rightarrow 0} \left[E \lll A; B \ggg_E^{(+)} \right] = \frac{C}{\beta}$$

Para o cálculo das funções de Green $G_{AB}(E)$, podemos obter sua equa-

ção de movimento, usando as eqs. (II - 9), e a transformada de Fourier:

$$E G_{AB}(E) = \frac{\langle [A, B] \rangle}{2\pi} + \langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_E \quad (II - 41)$$

As condições de contorno estão contidas na própria equação (II - 41), pois a condição de contorno para a função de Green retardada (avançada) é que a função se anule para $t < 0$ ($t > 0$), o que é a mesma coisa que a função ser analítica no plano complexo E superior (inferior). Portanto, na utilização do método das funções de Green retardada e avançada para os fenômenos cooperativos, calculamos as funções de Green necessárias pela eq. (II - 41), com o emprego de um "decoupling" que deve obedecer aos requisitos 1) e 2), e determinamos as funções de correlação com as eqs. (II - 27) ou (II - 28), para $t=t'$, observando o requisito 3) no caso de operadores quaisquer. Desta maneira, o método das funções de Green consegue determinar aproximadamente as grandezas termodinâmicas do sistema, e dar um tratamento efetivo para os fenômenos cooperativos.

6) Aplicação ao Ferromagnético Heisenberg

Heisenberg⁽⁵⁾, propôs um Hamiltoniano efetivo em termos dos operadores de spin, para descrição das propriedades magnéticas fortes. Para que este Hamiltoniano descreva bem estas propriedades magnéticas, é essencial que a cada ponto do retículo seja possível associar um spin S , ou um spin efetivo. O Hamiltoniano é dado por:

$$H = - \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i h_i \cdot \vec{S}_i \quad (II - 42)$$

$J > 0$ paramagnetismo

$J < 0$ antiferromagnetismo

\vec{S}_i = operador de spin associado ao ponto i do retículo.

onde h é um campo magnético externo, e as interações eletrônicas estão contidas na "integral de intercâmbio" J . A integral de intercâmbio será considerada um parâmetro na teoria.

Em complementação ao Hamiltoniano, temos as relações de comutação próprias dos operadores de spin:

$$\left[S_i^+, S_j^- \right]_- = 2 S_i^z \Delta_{ij} \quad (\text{II - 43a})$$

$$\left[S_i^z, S_j^+ \right]_- = S_i^+ \Delta_{ij} \quad ; \quad \left[S_i^z, S_j^- \right]_- = - S_i^- \Delta_{ij} \quad (\text{II - 43b})$$

$$\left[S_i^+, S_j^+ \right]_- = \left[S_i^-, S_j^- \right]_- = 0 \quad (\text{II-43c})$$

onde $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$

temos também as relações complementares:

$$S_i^z = S(S+1) - (S_i^z)^2 - S_i^- S_i^+ \quad (\text{II-44a})$$

$$(S_i^-)^{2S+1} = (S_i^+)^{2S+1} = 0 \quad (\text{II - 44b})$$

$$\prod_{\mu=-S}^S (S_i^z - \mu) = 0 \quad (\text{II - 44c})$$

Vamos agora, obter a equação de movimento geral para as funções de Green, para a obtenção das quantidades termodinâmicas através das funções de correlação, no problema do ferromagnético Heisenberg.

Fazendo:

$$A = S_g^+ \quad B = B_l \quad H = H \text{ Heisenberg}$$

na equação de movimento das funções de Green (II - 41), teremos:

$$E \left\langle\left\langle S_g^+ ; B_l \right\rangle\right\rangle_E = \frac{1}{2} \left\langle \left[S_g^+, B_l \right] \right\rangle + \left\langle\left\langle \left[S_g^+, H \right]_- ; B_l \right\rangle\right\rangle_E \quad (\text{II - 45})$$

Usando a eq. (II - 42) e as relações de comutação (II - 43), teremos:

$$\left[S_g^+, H \right]_- = \mu h S_g^+ - 2 \sum_{j, j \neq g} (S_g^z S_j^+ - S_j^z S_g^+) \quad (\text{II} - 46)$$

A eq. (II - 45) fica então:

$$(E - \mu h) \left\langle\left\langle S_g^+ ; B_f \right\rangle\right\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \left\langle \left[S_g^+, B_f \right] \right\rangle - 2 \sum_{j, j \neq g} J_{gj} \left\langle\left\langle S_g^z S_j^+ - S_j^z S_g^+ ; B_f \right\rangle\right\rangle_E \quad (\text{II} - 47)$$

O operador B_f será escolhido de acordo com a função de correlação desejada.

Salientamos que a dinâmica do sistema fica encerrada no operador S_g^+ , devido ao seu comutador com H . O segundo membro da eq. (II - 47), contém funções de Green de ordem superior, e para o cálculo da função de Green, teremos que usar algum "decoupling".

III - APROXIMAÇÃO DE TYABLIKOV

1) Equação Fundamental para o "Decoupling"

O método das funções de Green foi pela primeira vez aplicado ao ferromagnético Heisenberg por Bogolyubov⁽⁷⁾ e Tyablikov⁽⁸⁾, onde era suposto haver um spin 1/2 em cada ponto do retículo cristalino.

Para desacoplar a cadeia de equações no cálculo das funções de Green, Bogolyubov e Tyablikov propuseram o seguinte "decoupling":

- desprezar as flutuações do valor médio do operador S^z (aproximação R.P.A.) nas funções de Green de ordem superior da eq. (II - 47). Assim sendo:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_E &= \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_E + \langle\langle (S_g^z - \langle S^z \rangle) S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_E \\ \hat{=} \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_E & \qquad \qquad \qquad \text{(III - 1)} \end{aligned}$$

onde $\langle S^z \rangle = \langle S_g^z \rangle$, devido à invariância translacional do sólido, pois estamos considerando o caso do Ferromagnetismo ($J > 0$).

A equação (III - 1) é a equação fundamental para o "decoupling" R.P.A..

2) Principais Resultados

Bogolyubov⁽⁷⁾ e Tyablikov⁽⁸⁾, calcularam a magnetização e a temperatura de Curie para os três retículos cúbicos (SC, bCC, FCC) em R.P.A. para $S = 1/2$.

Tahir-Kheli e ter Haar⁽⁹⁾ calcularam a magnetização e a temperatura de Curie, para os três retículos cúbicos (SC, bCC, FCC) em R.P.A. para $S \geq 1$ e $S = 1/2$, e neste último caso os resultados coincidem com os de Bogolyubov⁽⁷⁾ e Tyablikov⁽⁸⁾.

As expressões da magnetização em potências da temperatura, válida para baixas temperaturas, serão comparadas com a expressão da magnetização calculada por Dyson⁽¹⁰⁾, usando método de perturbação.

Os valores das temperaturas de Curie para os três retículos cúbicos, serão comparados com os valores encontrados por Brown e Luttinger⁽¹¹⁾ que usaram a teoria do campo moléculas.

A magnetização calculada por Dyson para baixas temperaturas é dada por:

$$\langle S^z \rangle = S - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} - \frac{2}{S} a_0 a_1 Q \Theta^4 + o(\Theta^{9/2})$$

(III - 2)

onde

$$a_0 = \zeta(3/2) = 2.612$$

$$a_1 = \zeta(5/2) C_1 = 3.15, 3.97, 3.77 \text{ para S.C., f.C.C., b.C.C.}$$

$$a_2 = \zeta(7/2) C_2 = 11.5, 16.4, 15.4 \text{ para S.C., f.C.C., b.C.C.}$$

$$Q = 1.68, 1.35, 1.45 \text{ (S = 1/2) para S.C., f.C.C., b.C.C.}$$

$$Q = 1.32, 1.17, 1.22 \text{ (S = 1) para S.C., f.C.C., b.C.C.}$$

e $\zeta(X)$ é a função Zeta de Rieman.

Para $S = 1/2$, a magnetização calculada por Bogolyubov e Tyablikov, e depois por Tahir-Kheli e ter Haar, para baixas temperaturas, é dada por:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} - a_0^2 \Theta^3 - 4a_0 a_1 \Theta^4 + o(\Theta^2)$$

(III - 3)

Para $S \geq 1$, a magnetização calculada por Tahir Kheli e ter Haar, para baixas temperaturas é dada por:

$$\langle S^z \rangle = S - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} - \frac{3}{2S} a_0^2 \Theta^3 - \frac{4}{S} a_0 a_1 \Theta^4 + o(\Theta^2)$$

(III - 4)

Comparando as eqs. (III-2), (III-3) e (III-4), vemos que diferem - nos seguintes pontos:

- 1) A aproximação R.P.A. introduz um termo espúrio, $(-a_0^2 \Theta^3)$ para $S = 1/2$, e $(-\frac{3}{2S} a_0^2 \Theta^3)$ para $S \geq 1$.
- 2) No termo proporcional a Θ^4 , que na expansão de Dyson aparece devido ao espalhamento dos quase partículas, a aproximação R.P.A. trata o Q, que depende de S e do retículo cristalino como uma constante;

$$Q = 1 \text{ para } S = 1/2 \text{ e } Q = 2 \text{ para } S \geq 1$$

Nesta aproximação, a energia renormalizada das excitações do sistema para qualquer spin, é dada pela seguinte expressão:

$$E(\mathbf{k}) = \mu h + 2 \langle S^z \rangle (J_0 - J_{\mathbf{k}}) \quad (\text{III} - 5)$$

onde

$$J_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}-\mathbf{l}} J_{\mathbf{q}\mathbf{l}} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{l}) \cdot \mathbf{k}} \quad (\text{III} - 6)$$

A energia de uma onda de spin de vetor de onda k tem a forma:

$$E(\mathbf{k}) = \mu h + 2S(J_0 - J_{\mathbf{k}}) \quad (\text{III} - 7)$$

Portanto, a aproximação R.P.A. trata bem a energia das excitações do sistema para $T \rightarrow 0$, e também para altas temperaturas, onde neste limite tende para o valor esperado pela teoria do campo molecular.

Para concluir, daremos uma tabela dos valores para a temperatura - de Curie, calculados nos trabalhos anunciados:

TABELA I

S	retículo	R.P.A.	Brown e Luttinger ⁽¹¹⁾
1/2	SC	1.978	1.93
1/2	bcc	2.871	2.39
1/2	fcc	4.46	4.24
1	SC	5.276	5.36
3/2	SC	9.892	10.63

S	retículo	R.P.A.	Brown e Luttinger ⁽¹¹⁾
2	SC	15.830	17.46
5/2	SC	23.080	25.81
3	SC	31.610	35.74

Pela Tabela I vemos que a aproximação R.P.A. consegue bons valores para a temperatura de Curie.

IV - APROXIMAÇÃO DE CALLEN

1) Equação Fundamental para o "Decoupling"

Callen⁽¹²⁾ propôs um método para "quebrar" a cadeia de equações, - tentando obter uma energia renormalizada melhor que a aproximação de Tyablikov⁽¹⁸⁾

Vamos deduzir a equação fundamental para o caso $S = 1/2$, pois neste caso o método é bastante intuitivo.

Neste caso temos as relações:

$$S_g^z = S - S_g^- S_g^+ \quad , \quad (S = 1/2) \quad (IV - 1)$$

$$S_g^z = \frac{1}{2} (S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+) \quad (IV - 2)$$

Multiplicando a eq. (IV - 1) por um parâmetro α , e tomando com a eq. (IV-2) multiplicada por $(1-\alpha)$, teremos:

$$S_g^z = \alpha S + \frac{1}{2} (1-\alpha) S_g^+ S_g^- - \frac{1}{2} (1+\alpha) S_g^- S_g^+ \quad (S = 1/2) \quad (IV - 3)$$

O objetivo do "decoupling" é exprimir as funções de Green do 2º membro da eq. (II-47) que envolvem três operadores, em funções de Green de ordem inferior.

Substituindo a eq. (IV-3) para S_g^z em uma dessas funções, teremos:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq j} \alpha S \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle + \frac{1}{2} (1-\alpha) \langle\langle S_g^+ S_g^- S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \frac{1}{2} (1+\alpha) \langle\langle S_g^- S_g^+ S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (IV - 4)$$

As funções do 2º membro da eq. (IV-4) que envolvem quatro operadores, foram aproximadas por Callen de maneira simétrica:

$$\langle\langle S_g^+ S_g^- S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq j} \langle S_g^+ S_g^- \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle + \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (IV - 5)$$

$$\langle\langle S_g^- S_g^+ S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq j} \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle + \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (IV - 6)$$

Substituindo as eqs. (IV-5) e (IV-6) na eq. (IV-4) e usando as eqs. (IV-1) e (IV-2), teremos:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_{g \neq j} \rightarrow \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \alpha \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (IV - 7)$$

Vamos agora obter por argumentos físicos o valor de α . Para $\alpha = 1$, a equação para S_g^z é a eq. (IV-1), e o operador $S_g^- S_g^+$ representa desvios de S_g^z do valor S . Como $\langle S_g^- S_g^+ \rangle$ será calculada aproximadamente pelo "decoupling", teremos melhores resultados usando a eq. (IV-1), quando $\langle S_g^- S_g^+ \rangle$ for pequena; ou seja, quando $\langle S^z \rangle \approx S$ e portanto baixas temperaturas. Para $\alpha = 0$, teremos a eq. (IV-2) e o operador $\frac{1}{2} (S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+)$ representa desvios de S_g^z do valor 0. Neste caso é melhor quando $\langle S_g^+ S_g^- \rangle \approx \langle S_g^- S_g^+ \rangle$, ou seja $\langle S^z \rangle \approx 0$ e portanto altas temperaturas.

Estas considerações podem ser satisfeitas com a escolha de

$$\alpha = \frac{\langle S^z \rangle}{S} \quad (IV - 8)$$

Esta escolha do α introduz uma relação entre o grau de ordem associado ao sistema, e o valor das funções de correlação transversais.

Substituindo a eq. (IV-8) na eq. (IV-3), teremos:

$$S_g^z = \langle S^z \rangle + \left[\left(\frac{S - \langle S^z \rangle}{2S} \right) S_g^+ S_g^- - \left(\frac{S + \langle S^z \rangle}{2S} \right) S_g^- S_g^+ \right], \quad (S = 1/2) \quad (IV - 9)$$

Esta equação expressa S_g^z de acordo com as considerações feitas, em qualquer temperatura.

Substituindo (IV-8) em (IV-7), teremos a equação fundamental para o "decoupling" no caso $S = 1/2$:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_{g \neq j} \rightarrow \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \frac{\langle S^z \rangle}{S} \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (S = 1/2) \quad (IV - 10)$$

No limite de altas temperaturas:

$$\langle S_g^- S_j^+ \rangle \rightarrow 0 \quad e \quad \langle S^z \rangle \rightarrow 0$$

e então o segundo termo do 2º membro de (IV-10) tende a zero mais rapidamente que o primeiro. Portanto, a aproximação simétrica tende para a aproximação R.P.A., em altas temperaturas.

Vamos agora generalizar estas idéias para qualquer valor do spin.

Para qualquer spin, temos a relação geral:

$$S_g^z = S(S+1) - (S_g^z)^2 - S_g^- S_g^+ \quad (\text{IV-11})$$

e a eq. (IV-2) permanece válida. Desenvolvendo como no caso $S = 1/2$, teremos:

$$S_g^z = \alpha S(S+1) - \alpha (S_g^z)^2 + \frac{1}{2}(1-\alpha) S_g^+ S_g^- - \frac{1}{2}(1+\alpha) S_g^- S_g^+ \quad (\text{IV-12})$$

e

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq l} \alpha S(S+1) \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \alpha \langle\langle (S_g^z)^2 S_j^+ ; B_l \rangle\rangle + \frac{1}{2}(1-\alpha) \\ \langle\langle S_g^+ S_g^- S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \frac{1}{2}(1+\alpha) \langle\langle S_g^- S_g^+ S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV-13})$$

Desprezando flutuações em $(S_g^z)^2$, e utilizando o "decoupling" simétrico, teremos:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq l} \alpha S(S+1) \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \alpha \langle (S_g^z)^2 \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \\ - \alpha \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle + \frac{1}{2} \left[(1-\alpha) \langle S_g^+ S_g^- \rangle - (1+\alpha) \langle S_g^- S_g^+ \rangle \right] \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV-14})$$

e utilizando a eq. (IV-12), obtemos finalmente:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq l} \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \alpha \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (\text{IV-15})$$

Neste caso, a escolha do α não é imediata, pois devido à equação (IV-11), o operador $S_g^- S_g^+$ não pode ser interpretado como o desvio de S_g^z do valor S . Callen estabeleceu os seguintes critérios para estabelecer o valor de α :

- 1) Para $S = 1/2$, $\alpha = \frac{\langle S^z \rangle}{S}$
- 2) Para $\langle S^z \rangle \simeq 0$, altas temperaturas, $\alpha = 0$, desde que a eq. (IV-2) é válida para qualquer spin.
- 3) Para $\langle S^z \rangle \simeq S$, baixas temperaturas, S^z deve poder ser representado aproximadamente por $S^z \simeq S - \mathcal{M}$, onde \mathcal{M} é o operador de desvio da ordem magnética e $\mathcal{M} \simeq 1$.

O ítem 3) é tão razoável quanto maior for o spin S .

Vamos escrever α na forma⁽¹⁷⁾:

$$\alpha = \frac{\gamma(S)}{S} \langle S^z \rangle \quad (\text{IV - 16})$$

onde:

$$\gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 1 \quad (\text{IV - 17})$$

A eq. (IV - 15) no limite de baixas temperaturas fica na forma:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+; B_l \rangle\rangle_{q \neq 0} \xrightarrow{S} \langle\langle S_j^+; B_l \rangle\rangle - \alpha \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+; B_l \rangle\rangle \quad (\text{IV - 18})$$

Usando a condição 3), $S_g^z = S - \mathcal{M}$ na eq. (IV - 18), teremos:

$$\langle\langle \mathcal{M} S_j^+; B_l \rangle\rangle_{q \neq 0} \xrightarrow{S} \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+; B_l \rangle\rangle \alpha$$

Podemos então, com a eq. (II - 26a) obter:

$$\langle B_l \mathcal{M} S_j^+ \rangle = \alpha \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle B_l S_g^+ \rangle \quad (\text{IV - 19})$$

Vamos agora utilizar a representação dos operadores S_j^+ e S_j^- em termos de operadores de criação e destruição de bosons⁽¹³⁾, dada por:

$$S_j^+ = \sqrt{2S} a_j \quad (\text{IV - 20a})$$

$$S_j^- = \sqrt{2S} a_j^+ \quad (\text{IV - 20b})$$

$$a_j^+ a_j = \mathcal{M} \quad (\text{IV - 21})$$

Devido à condição 3), teremos então:

$$\langle S_j^- S_j^+ \rangle \simeq 2S \quad (\text{IV - 22})$$

Podemos também neste limite de baixas temperaturas, aceitar que $\langle B_l S_g^+ \rangle \simeq \langle B_l S_j^+ \rangle$, desde que estando os spins dos íons fortemente correlacionados, a propagação de um desvio independe em certa aproximação do íon propagador. Desta forma, devido à condição 3), teremos:

$$\langle B_l M S_j^+ \rangle \simeq \langle B_l S_g^+ \rangle \quad (\text{IV - 23})$$

Finalmente, podemos escrever a eq. (IV - 16) para baixas temperaturas na forma:

$$\alpha \simeq \gamma(s) \quad (\text{IV - 24})$$

Substituindo as eqs. (IV - 22), (IV - 23) e (IV - 24), obtidas no limite de baixas temperaturas na eq. (IV - 19), obtemos facilmente:

$$\gamma(s) = \frac{1}{2s} \quad (\text{IV - 25})$$

Portanto, o parâmetro α para S qualquer, é dado por:

$$\alpha = \frac{1}{2s} \frac{\langle S^z \rangle}{s} \quad (\text{IV - 26})$$

Substituindo a eq. (IV-26) na eq. (IV-15), obtemos finalmente a eq. fundamental para o "decoupling" simétrico para qualquer spin:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_l \rangle\rangle_{q \neq j} \xrightarrow{\gamma} \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_l \rangle\rangle - \frac{1}{2s} \frac{\langle S^z \rangle}{s} \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_l \rangle\rangle \quad (\text{IV-27})$$

2) Principais Resultados

Callen⁽¹²⁾ calculou a magnetização e temperatura de Curie, para os três retículos cúbicos (S.C., b.C.C., f.C.C.) para qualquer spin.

Para baixas temperaturas, a expressão da magnetização em potências da temperatura é dada por:

$$\langle S^z \rangle = s - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} - \frac{2}{s} a_0 a_1 \Theta^4 + \dots (2S+1) a_0^{2S+1} \Theta^{3S+3/2} +$$

$$+ (2S+1)^2 \frac{3}{4} \pi V \psi_7^{2S}(3/2) \psi_7(5/2) \Theta^{3S+5/2} \quad (\text{IV} - 28)$$

onde:

$$\frac{3}{4} \pi V = 2.35, 2.96, 2.81 \text{ para S.C., f.C., b.C.C.}$$

$$a_1 = \frac{3}{4} \pi V \psi_7(5/2)$$

e os coeficientes são dados no ítem b da parte III.

Para $S = 1/2$, teremos:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} + 2 a_0^2 \Theta^3 + o(9/2) \quad (\text{IV-29})$$

Vemos que esta equação contém o termo espúrio em Θ^3 , e desapareceu o termo em Θ^4 por cancelamento.

Para $S \geq 1$,

$$\langle S^z \rangle = S - a_0 \Theta^{3/2} - a_1 \Theta^{5/2} - a_2 \Theta^{7/2} - \frac{2}{S} a_0 a_1 \Theta^4 + o(9/2) \quad (\text{IV-30})$$

não aparecendo portanto o termo espúrio em Θ^3 .

Comparando as equações (IV-29) e (IV-30), com a magnetização calculada por Dyson⁽¹⁰⁾, concluímos que:

1) A aproximação de Callen introduz um termo espúrio em $(2a_0^2 \Theta^3)$ para $S = 1/2$, e cancela o termo em Θ^4 , o que na expansão de Dyson é devido ao espalhamento das quase-partículas do sistema. Estes resultados são devidos ao mau tratamento das interações cinemáticas⁽¹⁸⁾.

2) Para $S \geq 1$, esta aproximação introduz termos espúrios, cuja menor potência é $9/2$, e trata o Q que aparece na potência Θ^4 e depende de S e do retículo cristalino, como uma constante de valor 1.

Nesta aproximação, a energia renormalizada das excitações do sistema para qualquer spin, é dada pela seguinte expressão:

$$E(k) = \mu h + 2 \langle S^z \rangle \left[(J_0 - J_k) + \frac{\langle S^z \rangle}{N S^2} \sum_{K'} (J_{K'} - J_{K-K'}) \Phi(K') \right] \quad (\text{IV} - 31)$$

onde:

$$\Phi(K) = \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \quad (\text{IV} - 32)$$

e J_K é dado pela eq. (III-6).

Portanto, a aproximação de Callen além de conter os dois primeiros termos, que correspondem a R.P.A., traz um terceiro termo que mostra a existência de outras quase-partículas com vetores de onda K' , tratando melhor as excitações para baixas temperaturas. Para altas temperaturas, a equ. (IV-31) se reduz à expressão para R.P.A., eq. (III-5), desde que o terceiro termo tende para zero mais rapidamente que o segundo.

Daremos agora, uma tabela dos valores para a temperatura de Curie, comparando as aproximações R.P.A. e Callen para o retículo S.C., com os resultados obtidos pelo campo molecular⁽¹¹⁾.

TABELA II

S	Callen	R.P.A.	Brown Luttinger ⁽¹¹⁾
1/2	2.7	1.978	1.93
1	6.5	5.276	5.36
3/2	11.7	9.892	10.63
2	18.5	15.83	17.46
5/2	26.8	23.08	25.81
3	36.4	31.65	35.74

Pela Tabela II, vemos que os valores de R.P.A. são melhores que os de Callen para spin 1/2 e 1, e os valores de Callen vão melhorando com o aumento do spin.

Para finalizar, vamos fazer um resumo de como as aproximações de Tyablikov e Callen satisfazem as propriedades fundamentais ressaltadas por Wortis⁽²⁰⁾ (vide I - Introdução) da termodinâmica do Hamiltoniano Heisenberg, com base no trabalho de J. G. Ramos e A. A. Gomes⁽¹⁸⁾:

1) Aproximação de Tyablikov

- a) Trata bem as interações cinemáticas
- b) Trata mal as energias renormalizadas dos quase-partículas

2) Aproximação de Callen

$$\underline{S = 1/2}$$

- a) Trata mal as interações cinemáticas
- b) trata bem as energias renormalizadas dos quase partículas

$$\underline{S \geq 1}$$

- a) Trata bem as interações cinemáticas em baixas temperaturas
- b) trata bem as energias renormalizadas dos quase partículas

Os termos espúrios Θ^3 presentes nas aproximações de Tyablikov e de Callen ($S = 1/2$), são devidos à não satisfação das propriedades fundamentais da termodinâmica do Hamiltoniano Heisenberg. Devemos salientar que a presença dos termos espúrios de ordem maior que $\Theta^{9/2}$ na aproximação de Callen ($S \geq 1$) são devidas ao mal tratamento das interações cinemáticas em temperaturas intermediárias.

Em altas temperaturas, a aproximação de Tyablikov consegue resultar dos mais próximos da teoria do campo molecular para valores baixos do spin e na medida que o spin cresce, a aproximação de Callen torna-se melhor (Tabela II).

V - AS APROXIMAÇÕES DE TYABLIKOV E DE CALLEN EM UM MODELO SOLÚVEL

Vamos agora considerar um sistema formado por "clusters" independentes, compostos de dois spins 1 localizados e com uma "interação de intercâmbio" entre eles ($J > 0$). Este simples sistema ferromagnético pode ser resolvido exatamente pela estatística quântica e os resultados podem ser comparados com as soluções das aproximações de Tyablikov e de Callen, razão pela qual estamos utilizando este modelo. As grandezas termodinâmicas serão calculadas usando-se o Hamiltoniano de um "cluster" e efetuando-se a estatística, e a comparação dos resultados poderá ser feita em todas as regiões de temperatura. Teremos então uma visão qualitativa global destas aproximações em várias grandezas termodinâmicas, desde que no problema do Hamiltoniano de Heisenberg geral, estas aproximações são comparadas com outros resultados nas regiões de baixa e alta temperatura. Ao mesmo tempo faremos um teste crítico destas aproximações, pois o modelo ferromagnético considerado é o caso particular mais simples do Hamiltoniano Heisenberg.

Para este modelo, o Hamiltoniano é dado por:

$$H = -2J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) - \mu h(S_1^z + S_2^z), \quad (J > 0) \quad (V - 1)$$

onde o campo magnético \vec{h} tem a direção do eixo z. Em complementação teremos as relações de comutação (II-43) e as relações (II - 44) que neste caso ficam na forma:

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

$$(S_i^-)^3 = (S_i^+)^3 = 0 \quad (V - 2b)$$

e

$$\prod_{\mu=-1}^1 (S_i^z - \mu) = 0 \quad (V - 2c)$$

Outra relação complementar é a expansão do operador S_i^z em termos dos operadores S_i^- e S_i^+ (14). Para $S = 1$, esta expansão é dada por:

$$S_i^z = 1 - \frac{1}{2} S_i^- S_i^+ - \frac{1}{4} (S_i^-)^2 (S_i^+)^2 \quad (V - 3)$$

Nos próximos itens calcularemos a magnetização, suscetibilidade a campo nulo, função de correlação transversal, função de correlação longitudinal, função de correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ e calor específico magnético para o modelo, pela estatística quântica, aproximação de Tyablikov e aproximação de Callen. Os resultados serão comparados graficamente nas figuras 3 a 10.

1) Solução pela Estatística Quântica

Considerando apenas um "cluster", teremos um sistema de dois spins 1, com o spin total dado por:

$$\vec{S}_T = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (V - 4)$$

Teremos então:

$$2(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) = \vec{S}_T^2 - (\vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2) = S(S+1) - 4 \quad (V - 5)$$

Os auto-valores de S_T^2 são:

$$S_T^2 = 0, 2, 6 \quad \text{para } S = 0, 1, 2 \quad (V - 6)$$

Teremos então os seguintes auto-valores para $2(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$:

$$2(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) = \begin{cases} -4, & S = 0 \\ -2, & S = 1 \\ 2, & S = 2 \end{cases} \quad (V - 7)$$

As auto-funções do Hamiltoniano serão representadas por $|S, m_T\rangle$, e utilizando as fórmulas (15):

$$J^- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (V - 8a)$$

e

$$J^+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad (v - 8b)$$

onde \vec{J} é o operador momento angular, podemos representá-los em termos das auto-funções dos operadores S_1^z, S_2^z ($i = 1, 2$).

Utilizando a eq. (v - 1), teremos os auto-valores do Hamiltoniano:

TABELA 3

S	m_T	E_m
0	0	$4J$
1	1	$2J - \mu h$
	0	$2J$
	-1	$2J + \mu h$
2	2	$-2J - 2\mu h$
	1	$-2J - \mu h$
	0	$-2J$
	-1	$-2J + \mu h$
	-2	$-2J + 2\mu h$

O esquema de níveis da energia é dado na fig. 2.

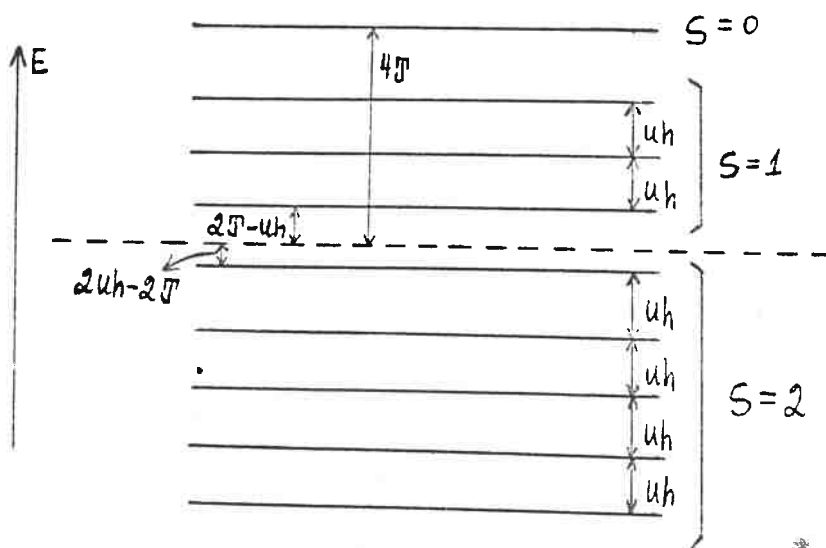


fig. 2

a) Cálculo da Magnetização Média por Spin

Vamos definir a magnetização como a média estatística do operador S^z para qualquer spin, ou seja:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{\text{Tr} e^{-\beta H} S_T^z}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (V - 9)$$

Usando as auto-funções do Hamiltoniano, teremos:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{\sum_{m,n} \langle m | e^{-\beta H} | n \rangle \langle n | S_T^z | m \rangle}{\sum_m \langle m | e^{-\beta H} | m \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\sum_m e^{-\beta E_m} m_T}{\sum_m e^{-\beta E_m}}$$

onde $|m\rangle = |S, m_T\rangle$. Lembrando a Tabela 3, obtemos facilmente:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2Z} \left[\text{EXP}(-2J + \mu h)\beta - \text{EXP}(-2J - \mu h)\beta + 2\text{EXP}(2J + 2\mu h)\beta + \text{EXP}(2J + \mu h)\beta - \text{EXP}(2J - \mu h)\beta - 2\text{EXP}(2J - 2\mu h)\beta \right] \quad (\text{Fig. 3}) \quad (V - 10)$$

onde

$$Z = \text{EXP}(-4J\beta) + \text{EXP}(-2J + \mu h)\beta + \text{EXP}(-2J\beta) + \text{EXP}(-2J - \mu h)\beta + \text{EXP}(2J + 2\mu h)\beta + \text{EXP}(2J + \mu h)\beta + \text{EXP}(2J\beta) + \text{EXP}(2J - \mu h)\beta + \text{EXP}(2J - 2\mu h)\beta \quad (V - 11)$$

é a função de partição. Pela eq. (V-10), vemos que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \langle S^z \rangle = 0 \quad (V - 12)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle S^z \rangle = 1 \quad (V - 13)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \langle S^z \rangle = 0 \quad (V - 14)$$

A eq. (V-12) mostra a necessidade do campo magnético \vec{h} para dar a direção privilegiada (direção de magnetização) ao sistema, a eq. (V-13) - o "congelamento" do sistema, e a eq. (V-14) mostra que a energia térmica - quando $T \rightarrow \infty$ vence completamente a energia de ordenação dos spins.

b) Cálculo da Suscetibilidade a Campo Nulo

A suscetibilidade a campo nulo será definida por:

$$\chi = \left(\frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial h} \right)_{h=0} \quad (V - 15)$$

Usando a eq. (V-10), teremos:

$$\left(\frac{J \chi}{\mu} \right) = \frac{J}{2KT} \left[\frac{2\text{EXP}(-2J\beta) + 10\text{EXP}(2J\beta)}{\text{EXP}(-4J\beta) + 3\text{EXP}(-2J\beta) + 5\text{EXP}(2J\beta)} \right] \quad (\text{Fig. 4}) \quad (V - 16)$$

c) Cálculo da Função de Correlação Transversal

$$\langle S_2^- S_1^+ \rangle = \frac{\text{Tr} (e^{-\beta H} S_2^- S_1^+)}{\text{Tr} e^{-\beta H}} = \frac{\sum_m e^{-\beta E_m} \langle m | S_2^- S_1^+ | m \rangle}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (V - 17)$$

Usando as equações (V - 8) e a Tabela 3, obtemos:

$$\langle S_2^- S_1^+ \rangle = \frac{1}{Z} \left[\text{EXP}(2J + \mu h)\beta + 4/3\text{EXP}(2J\beta) + \text{EXP}(2J - \mu h)\beta - \right. \\ \left. - \text{EXP}(-2J + \mu h)\beta - \text{EXP}(-2J - \mu h)\beta - 4/3\text{EXP}(-4J\beta) \right] \quad (\text{Fig. 5}) \quad (V - 18)$$

onde Z é dado pela equação (V-11).

Com a equação (V-18) podemos obter os seguintes limites:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle S_2^- S_1^+ \rangle = 0 \quad (V-19)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \langle S_2^- S_1^+ \rangle = 0 \quad (V-20)$$

As interpretações das equações (V-19) e (v-20) serão dadas no ítem d).

d) Cálculo da Função de Correlação Longitudinal

$$\langle S_1^z S_2^z \rangle = \frac{\text{Tr} (e^{-\beta H} S_1^z S_2^z)}{\text{Tr} e^{-\beta H}} = \frac{1}{Z} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m | S_1^z S_2^z | m \rangle \quad (v-21)$$

Obtendo os elementos de matriz do operador $S_1^z S_2^z$ e usando a Tabela 3, teremos:

$$\langle S_1^z S_2^z \rangle = \frac{1}{2} \left[\text{EXP}((2J+2\mu h)\beta) - \frac{1}{3} \text{EXP}(2J\beta) + \text{EXP}((2J-2\mu h)\beta) - \text{EXP}(-2J\beta) - \frac{2}{3} \text{EXP}(-4J\beta) \right] \quad (\text{Fig. 6}) \quad (\text{V - 22})$$

Com a eq. (V - 21), podemos obter os limites:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle S_1^z S_2^z \rangle = 1 \quad (\text{V - 23})$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \langle S_1^z S_2^z \rangle = 0 \quad (\text{V - 24})$$

As equações (V-19) e (V-23) refletem o fato de quando o sistema está no zero absoluto, somente o estado fundamental $|2, 2\rangle$ conta para as médias estatísticas, e neste estado os elementos de matriz dos operadores $S_1^- S_2^+$ e $S_1^z S_2^z$ são 0 e 1, respectivamente. As equações (V-20) e (V-24) mostram que a agitação térmica quando $T \rightarrow \infty$ destrói o acoplamento dos spins.

e) Cálculo da Função de Correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$

O produto escalar $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ pode ser expresso na forma:

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} (S_2^- S_1^+ + S_1^- S_2^+) + S_1^z S_2^z \quad (\text{V - 25})$$

Podemos então por simetria escrever a função de correlação na forma:

$$\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = \langle S_2^- S_1^+ \rangle + \langle S_1^z S_2^z \rangle \quad (\text{V - 26})$$

A função de correlação pode também ser calculada independentemente pela relação:

$$\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} (e^{-\beta H} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \quad (\text{V - 27})$$

Usando as equações (V-18) e (V-22) no caso da eq. (V-26) ou a eq. (V-7) no caso da eq. (V-27), obtemos:

$$\langle \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \rangle = \frac{1}{Z} \left[-2\text{EXP}(-4J\beta) - \text{EXP}((-2J+\mu h)\beta) + \text{EXP}(-2J\beta) + \text{EXP}((-2J-\mu h)\beta) \right. \\ \left. + \text{EXP}((2J+2\mu h)\beta) + \text{EXP}((2J+\mu h)\beta) + \text{EXP}(2J\beta) + \text{EXP}((2J-\mu h)\beta) + \right. \\ \left. + \text{EXP}((2J-2\mu h)\beta) \right] \quad \text{onde } Z \text{ é dado pela eq. (V-11). (Fig. 7) (V - 28)}$$

f) Cálculo do Calor Específico Magnético

Definiremos o calor específico magnético por:

$$C_{\text{MAG}} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\langle \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \rangle_{h=0} \right) \quad (\text{V - 29})$$

Podemos então obter facilmente:

$$\left[\frac{J C_{\text{MAG}}}{K} \right] = 6 \left(\frac{J}{K T} \right)^2 \left[\frac{\text{EXP}(-6J\beta) + 15\text{EXP}(-2J\beta) + 20}{(\text{EXP}(-4J\beta) + 3\text{EXP}(-2J\beta) + 5\text{EXP}(2J\beta))^2} \right] \quad (\text{V - 30}) \\ (\text{Fig. 8})$$

2) Solução pelo Método das Funções de Green

Para o cálculo das grandezas termodinâmicas utilizando o método - das funções de Green retardada e avançada, teremos como base o desenvolvimento feito em II. Vamos então armar a equação de movimento básica para as funções de Green com comutador, necessárias ao nosso problema, fazendo:

$$H = -2J \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 - h(S_1^z + S_2^z) = -J(S_2^- S_1^+ + S_1^- S_2^+ + 2S_1^z S_2^z) - h(S_1^z + S_2^z) \quad (\text{V - 31})$$

e

$$A = S_g^+ \quad (\text{V - 32})$$

na equação (II - 41), $B = B_g$

Usando as regras de comutação (eq(II-43)), obtemos:

$$\left[S_g^+, H \right] = hS_g^+ (\mathcal{J} g_1 + \mathcal{J} g_2) + 2J(S_1^+ S_2^z - S_2^+ S_1^z) (\mathcal{J} g_1 - \mathcal{J} g_2) \quad (\text{V - 33})$$

Teremos então a eq. de movimento básica na forma:

$$\begin{aligned} \left[E - \mu h (\delta g_1 + \delta g_2) \right] \left\langle\left\langle S_g^+ ; B_\lambda \right\rangle\right\rangle_E &= \frac{1}{2\pi} \left\langle \left[S_g^+ , B_\lambda \right] \right\rangle + 2J (\delta g_1 - \delta g_2) \\ \left\langle\left\langle S_1^+ S_2^z ; B_\lambda \right\rangle\right\rangle_E - 2J (\delta g_1 - \delta g_2) \left\langle\left\langle S_2^+ S_1^z ; B_\lambda \right\rangle\right\rangle_E &\quad (V - 34) \end{aligned}$$

onde g será 1 ou 2, e B será escolhido de acôrdo com a função de Green a ser calculada.

a) Aproximação de Tyablikov

O problema se baseará fundamentalmente na determinação das funções de correlação $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$ e $\langle S_1^z S_2^z \rangle$, o que durante o desenvolvimento permitirá a determinação da magnetização, e com estas grandezas calculadas poderemos determinar a função de correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$, suscetibilidade a campo nulo e calor específico magnético.

Para determinarmos $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$ usaremos a eq. (V - 34) para:

$$g = 1 \quad \text{e} \quad B_\lambda = S_2^-$$

Usando as equações (II-43), teremos a seguinte equação:

$$(E - \mu h) \left\langle\left\langle S_1^+ ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E = 2J \left\langle\left\langle S_1^+ S_2^z ; S_2^- \right\rangle\right\rangle - 2J \left\langle\left\langle S_2^+ S_1^z ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E \quad (V - 35)$$

Aplicando a aproximação de Tyablikov (eq.(III-1)) para as funções do 2º membro da eq. (V-35), obtemos:

$$(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \left\langle\left\langle S_1^+ ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E = -2J \langle S^z \rangle \left\langle\left\langle S_2^+ ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E \quad (V - 36)$$

Teremos então que armar a eq. de movimento para a função de Green $\left\langle\left\langle S_2^+ ; S_2^- \right\rangle\right\rangle$

Usando a eq. (V-34) para $g = 2$ e $B_\lambda = S_2^-$ e as equações (II-43), teremos:

$$(E - \mu h) \left\langle\left\langle S_2^+ ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E = \frac{\langle S^z \rangle}{\hbar} - 2J \left\langle\left\langle S_1^+ S_2^z ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E + 2J \left\langle\left\langle S_2^+ S_1^z ; S_2^- \right\rangle\right\rangle_E \quad (V - 37)$$

Aplicando a aproximação de Tyablikov, obtemos:

$$(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = \frac{S^z}{\hbar} - 2J \langle S^z \rangle \langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E \quad (V - 38)$$

Resolvendo o sistema das equações (V-36) e (V-38), obtemos respectivamente:

$$\langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = \frac{-2J \langle S^z \rangle^2}{\hbar(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle)} \quad (V - 39)$$

e

$$\langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = \frac{S^z}{\hbar} \frac{(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle)}{(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle)} \quad (V - 40)$$

As equações (V-39) e (V-40) mostram que as funções de Green com comutador não possuem polo em $E = 0$ se $h \neq 0$, satisfazendo os requisitos 1) e 2) para o "de coupling" (II), e portanto, só terá sentido aplicar a aproximação de Tyablikov para este modelo se $h \neq 0$. Devemos também ressaltar que estas funções de Green com anticomutador não possuem polo em $E = 0$ ⁽¹⁷⁾, satisfazendo o requisito 3), o que é esperado, desde que os operadores S_2^- e S_1^+ se comportam como operadores de campo. Vemos também pelas equações (V-39) e (V-40) que os polos das funções de Green descrevem melhor as excitações do sistema (fig.2), para $T \ll 0$ e $T \rightarrow \infty$.

Usando a eq. (II-39a), decompondo os denominadores das funções de Green em frações parciais, e usando a equação (II-25), obtemos as densidades espectrais para as funções de correlação $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$ e $\langle S_2^- S_2^+ \rangle$, respectivamente:

$$J_{12}(E) = \frac{\langle S^z \rangle}{(e^{\beta E} - 1)} \left[\delta(\omega - \mu h) - \delta(\omega - \mu h - 4J \langle S^z \rangle) \right] \quad (V - 41)$$

e

$$J_{22}(E) = \frac{\langle S^z \rangle}{(e^{\beta E} - 1)} \left[\delta(\omega - \mu h) + \delta(\omega - \mu h - 4J \langle S^z \rangle) \right] \quad (V - 42)$$

Utilizando as equações (V-41) e (V-42) na equação (II-40a), obtemos respectivamente:

(t = t')

$$\langle s_2^- s_1^+ \rangle = \langle s^z \rangle \left[\frac{1}{(e^{\mu h \beta} - 1)} - \frac{1}{(e^{(\mu h + 4J \langle s^z \rangle) \beta} - 1)} \right] \quad (V - 43)$$

e

$$\langle s_2^- s_2^+ \rangle = \langle s^z \rangle \left[\frac{1}{(e^{\mu h \beta} - 1)} + \frac{1}{(e^{(\mu h + 4J \langle s^z \rangle) \beta} - 1)} \right] \quad (V - 44)$$

Para o caso de $S = 1/2$, a relação particular (eq. (I-8) e a eq. (V-44) determinam a magnetização auto-consistentemente. Para $S = 1$, vale a relação geral (I-3a), ou a eq. (V-3) que nos dão:

$$\langle s^z \rangle = 2 - \langle (s^z)^2 \rangle - \langle s_2^- s_2^+ \rangle \quad (V - 45)$$

$$\langle s^z \rangle = 1 - \frac{1}{2} \langle s_2^- s_2^+ \rangle - \frac{1}{4} \langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle \quad (V - 46)$$

e portanto a determinação da magnetização é dependente da determinação da função de correlação $\langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle$, ou $\langle (s^z)^2 \rangle$. Este problema é comum a todos os casos em que $S \geq 1$ ⁽⁹⁾, e é o principal fator que os distingue do caso $S = 1/2$. Neste trabalho resolveremos o problema determinando a função de correlação $\langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle$ em função da função de correlação $\langle s_2^- s_2^+ \rangle$, da magnetização, e da temperatura, na aproximação de Tyablikov. Utilizaremos a eq. (V-34) para $g = 2$ e $B_{\lambda} = (s_2^-)^2 s_2^+$. Usando as equações (II-43), teremos

$$(E - \mu h) \langle\langle s_2^+ ; (s_2^-)^2 s_2^+ \rangle\rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle s_2^- s_2^+ \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle - 2J \langle\langle s_2^z s_1^+ ; (s_2^-)^2 s_2^+ \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle s_1^z s_2^+ ; (s_2^-)^2 s_2^+ \rangle\rangle_E \quad (V - 47)$$

Na aproximação de Tyablikov a eq. (V-47) fica na forma:

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle\langle s_2^+ ; (s_2^-)^2 s_2^+ \rangle\rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle s_2^- s_2^+ \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle - 2J \langle s^z \rangle \langle\langle s_1^+ ; (s_2^-)^2 s_2^+ \rangle\rangle_E \quad (V - 48)$$

Teremos então que armar a eq. de movimento para a função de Green $\langle\langle S_1^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E$. Fazendo $g = 1$ e $B_\lambda = (S_2^-)^2 S_2^+$ na eq.(V-34), teremos:

$$(E - \mu h) \langle\langle S_1^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E = -2J \langle\langle S_1^z S_2^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle S_1^+ S_2^z ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E \quad (V - 49)$$

Na aproximação de Tyablikov, a eq. (V - 49) fica na forma:

$$(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \langle\langle S_1^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E = -2J \langle S^z \rangle \langle\langle S_2^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E \quad (V - 50)$$

É conveniente notar que para determinarmos a função de Green $\langle\langle S_1^+ ; B_\lambda \rangle\rangle_E$ na aproximação de Tyablikov sempre precisamos montar a equação de movimento para $\langle\langle S_2^+ ; B_\lambda \rangle\rangle_E$ e resolver o sistema.

Resolvendo o sistema das equações (V-49) e (V-50) para $\langle\langle S_2^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E$, obtemos:

$$\langle\langle S_2^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E = \frac{E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle}{\mu(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle)} \left[\langle S_2^- S_2^+ \rangle - \langle (S_2^-)^2 (S_2^+)^2 \rangle \right] \quad (V - 51)$$

Os polos das funções de Green $\langle\langle S_2^+ ; (S_2^-)^2 S_2^+ \rangle\rangle_E$ são os mesmos - que os da função $\langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E$ eq. (V-40), desde que a dinâmica do sistema está contida no operador S_2^+ . É válida portanto a análise para o "decoupling" feita anteriormente. Calculando o salto da função de Green pela eq. (II-28a) teremos:

$$\begin{aligned} \langle\langle (S_2^-)^2 (S_2^+)^2 \rangle\rangle_E &= \left[\langle S_2^- S_2^+ \rangle - \langle (S_2^-)^2 (S_2^+)^2 \rangle \right] \left[\frac{1}{e^{\mu h \beta} - 1} \right. \\ &\left. + \frac{1}{e^{(\mu h + 4J \langle S^z \rangle) \beta} - 1} \right] \end{aligned} \quad (V - 52)$$

ou

$$\langle (S_2^-)^2 (S_2^+)^2 \rangle = \langle S_2^- S_1^+ \rangle \frac{X}{(1+X)} \quad (V-53)$$

onde:

$$X = \frac{1}{e^{\mu h \beta} - 1} + \frac{1}{e^{(\mu h + 4J \langle S^z \rangle) \beta} - 1} \quad (V-54)$$

Substituindo a eq. (V-53) na eq. (V-46) obtemos:

$$\langle S^z \rangle = 1 - \frac{\langle S_2^- S_1^+ \rangle}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{X}{(1+X)} \right] \quad (V-55)$$

Resolvendo o sistema de equações (V-44) e (V-55) para $\langle S^z \rangle$ - obtemos finalmente uma expressão autoconsistente para a magnetização em função da temperatura (fig. 3), ou seja:

$$\langle S^z \rangle = \frac{4(1+X)}{(4+6X+3X^2)} \quad (V-56)$$

onde X é dado pela eq.(V-54)

Podemos então com a equação (V-43) e a eq.(V-56) obter a função de correlação $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$ como função da temperatura (fig. 5).

Vamos agora determinar a função de correlação longitudinal $\langle S_1^z S_2^z \rangle$. Usando as funções de Green $\langle\langle S_1^z ; S_2^z \rangle\rangle_E$ e $\langle\langle S_2^z ; S_2^z \rangle\rangle_E$ teremos, fazendo $S_g^+ = S_1^z, S_2^z$ $B_g = S_2^z$, na equação (V-34), as respectivas equações de movimento:

$$E \langle\langle S_1^z ; S_2^z \rangle\rangle_E = J \langle\langle S_1^- S_2^+ ; S_2^z \rangle\rangle_E - J \langle\langle S_1^+ S_2^- ; S_2^z \rangle\rangle_E \quad (V-57)$$

e

$$E \langle\langle S_2^z ; S_2^z \rangle\rangle_E = J \langle\langle S_1^+ S_2^- ; S_2^z \rangle\rangle_E - J \langle\langle S_1^- S_2^+ ; S_2^z \rangle\rangle_E \quad (V-58)$$

No entanto, nesta ordem não podemos aplicar a aproximação de Tyablikov às funções de Green do segundo membro das equações (V-57) e (V-58). Utilizaremos então um método indireto, usando as funções de Green $\langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E$ e $\langle\langle S_2^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E$. Usando a eq. (V-34) para $g = 1, 2$ $B_g =$

= $S_2^z S_1^-$, obtemos as seguintes equações de movimento:

$$(E - \mu h) \langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle S_1^z S_2^z \rangle + 2J \langle\langle S_2^z S_1^+ ; S_2^z S_2^- \rangle\rangle_E - 2J \langle\langle S_1^z S_2^+ ; S_2^z S_2^- \rangle\rangle_E \quad (V - 59)$$

e

$$(E - \mu h) \langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E = \frac{\langle S_1^- S_2^+ \rangle}{2 \hbar} - 2J \langle\langle S_2^z S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle S_2^z S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E \quad (V - 60)$$

Na aproximação de Tyablikov, as equações (V-59) e (V-60) ficam na

forma:

$$(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E = \frac{\langle S_1^z S_2^z \rangle}{\hbar} - 2J \langle S^z \rangle \langle\langle S_2^+ ; S_2^z S_2^- \rangle\rangle_E \quad (V - 61)$$

e

$$(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \langle\langle S_2^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E = - \frac{\langle S_1^- S_2^+ \rangle}{2 \hbar} - 2J \langle S^z \rangle \langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E \quad (V - 62)$$

Resolvendo as equações (V-61) e (V-62) para $\langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E$, ob-

temos:

$$\langle\langle S_1^+ ; S_2^z S_1^- \rangle\rangle_E = \frac{(E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle) \langle S_1^z S_2^z \rangle}{\hbar (E - \mu h) (E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle)} + \frac{J \langle S^z \rangle \langle S_2^- S_1^+ \rangle}{(E - \mu h) (E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle)} \quad (V - 63)$$

Calculando o salto da função de Green usando a eq. (II-28a), tere-

mos:

$$\langle S_2^z S_1^- S_1^+ \rangle = \langle S_1^z S_2^z \rangle X - \frac{\langle S_2^- S_2^+ \rangle}{2} Y \quad (V - 64)$$

onde:

$$\frac{X}{Y} = \frac{1}{e^{\mu h \beta} - 1} + \frac{1}{e^{(\mu h + 4J \langle S^z \rangle) \beta} - 1} \quad (V - 65)$$

Por outro lado, usando a eq. (V-3) para $i = 1$, podemos obter:

$$\langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle = 2 \langle s^z \rangle - 2 \langle s_1^z s_2^z \rangle - \frac{1}{2} \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle \quad (V-66)$$

Portanto, a determinação de $\langle s_1^z s_2^z \rangle$ fica dependendo da determinação da função de correlação $\langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle$. Vamos então expressar

$\langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle$ em termos de quantidades conhecidas, usando a aproximação de Tyablikov. Fazendo $g = 1, 2$ e $B_1 = s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+$ na equação (V-34), teremos as equações de movimento:

$$(E - \mu h) \langle\langle s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle - 2J \langle\langle s_1^z s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle s_1^+ s_2^z ; (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E \quad (V-67)$$

e

$$(E - \mu h) \langle\langle s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E = - \langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle - 2J \langle\langle s_2^z s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle s_1^z s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E \quad (V-68)$$

Na aproximação de Tyablikov, as equações (V-67) e (V-68) ficam

na forma:

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle\langle s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E = \frac{1}{\hbar} \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle - 2J \langle s^z \rangle \langle\langle s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E \quad (V-69)$$

e

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle\langle s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E = \frac{\langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle}{2\hbar} - 2J \langle s^z \rangle \langle\langle s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle\rangle_E \quad (V-70)$$

Antes de resolvermos o sistema das equações (V-69) e (V-70), vamos expressar a função de correlação $\langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle$ em termos de quantidades conhecidas, usando a aproximação de Tyablikov. Fazendo $g = 1, 2$ e $B_1 = s_2^+ (s_1^-)^2$

na equação (V-34), teremos as equações de movimento:

$$(E - \mu h) \langle\langle s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E = \frac{1}{N} \langle s_2^- s_1^+ \rangle - \frac{1}{N} \langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle -$$

$$- 2J \langle\langle s_1^z s_2^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E + 2J \langle\langle s_1^+ s_2^z ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E \quad (V - 71)$$

e

$$(E - \mu h) \langle\langle s_2^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E = -2J \langle s_2^z s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle + 2J \langle\langle s_2^+ s_1^z ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E$$

(V - 72)

Na aproximação de Tyablikov, as equações (V-71) e (V-72) ficam na forma:

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle\langle s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E = \frac{1}{N} \langle s_2^- s_1^+ \rangle - \frac{1}{N} \langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle$$

$$- 2J \langle s^z \rangle \langle\langle s_2^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E \quad (V - 73)$$

e

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle\langle s_2^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E = -2J \langle s^z \rangle \langle\langle s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E \quad (V - 74)$$

Resolvendo o sistema das equações (V-73) e (V-74) para $\langle\langle s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E$, obtemos:

$$\langle\langle s_1^+ ; s_2^+ (s_1^-)^2 \rangle\rangle_E = \left(\langle s_2^+ s_1^- \rangle - \langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle \right) \frac{(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle)}{(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle s^z \rangle)}$$

(V - 75)

Calculando o salto da função de Green usando a eq. (II-28a), obtemos:

$$\langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle = \left(\langle s_2^+ s_1^- \rangle - \langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle \right) \times \quad (V - 76)$$

ou

$$\langle s_2^+ (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle = \langle s_2^+ s_1^- \rangle \frac{X}{(1+X)} \quad (V - 77)$$

onde X é dado pela equação (V-65).

Substituindo a eq. (V-77) na eq. (V-70), teremos:

$$(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle) \langle \langle s_2^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle \rangle_E = - \frac{\langle s_2^- s_1^+ \rangle X}{2\hbar(1+X)} - 2J \langle s^z \rangle \langle \langle s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle \rangle_E \quad (V - 78)$$

Resolvendo o sistema das equações (V-69) e (V-78) para $\langle \langle s_1^+ ; s_2^z \rangle \rangle_E$

$\langle \langle s_1^- \rangle \rangle_E$, obtemos:

$$\langle \langle s_1^+ ; s_2^z (s_1^-)^2 s_1^+ \rangle \rangle_E = \left[\frac{1}{\hbar} (\langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle - \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle) \right] \\ \frac{(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle)}{(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle s^z \rangle)} + \frac{J}{\hbar} \langle s^z \rangle \langle s_2^- s_1^+ \rangle \frac{X}{(1+X)} \frac{1}{(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle s^z \rangle)} \quad (V - 79)$$

Calculando o salto da função de Green, usando a eq. (II-28a), teremos:

mos:

$$\langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle = (\langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle - \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle) X - \frac{\langle s_2^- s_1^+ \rangle}{2}$$

$$\frac{X Y}{(1+X)} \quad (V - 80)$$

ou

$$\langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle = \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle \frac{X}{(1+X)} - \frac{\langle s_2^- s_1^+ \rangle}{2} \frac{X Y}{(1+X)^2}$$

$$(V - 81)$$

onde X e Y são dados pela eq. (V-65). Substituindo a eq. (V-81) na eq. (V-66) e resolvendo para $\langle S_2^z S_1^- S_1^+ \rangle$, obtemos facilmente:

$$\langle S_2^z S_1^- S_1^+ \rangle = \left[2 \langle S^z \rangle - 2 \langle S_1^z S_2^z \rangle + \frac{\langle S_2^+ S_1^- \rangle}{4} \frac{X Y}{(1+X)^2} \right] \frac{2(1+X)}{(2+3X)} \quad (V-82)$$

Substituindo a eq. (V-82) na eq. (V-64), usando a eq. (V-43) e resolvendo para $\langle S_1^z S_2^z \rangle$, obtemos finalmente uma expressão para a função de correlação longitudinal em função da magnetização e da temperatura, ou seja:

$$\langle S_1^z S_2^z \rangle = \langle S^z \rangle \left[\frac{8(1+X)^2 + Y^2(2+6X+3X^2)}{2(1+X)(4+6X+3X^2)} \right] \quad (V-83)$$

Com a equação (V-59) para magnetização, podemos determinar a função de correlação $\langle S_1^z S_2^z \rangle$ como função da temperatura (Fig. 6).

Com as equações (V-43), (V-83) e (V-56), podemos determinar a função de correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ como função da temperatura (Fig. 7).

Vamos agora determinar a suscetibilidade a campo nulo, que foi definida pela eq. (V-15) como:

$$= \left(\frac{\partial}{\partial h} \langle S^z \rangle \right)_{h=0}$$

Usando a eq. (V-55) para a magnetização e efetuando os limites para campo nulo, podemos obter a seguinte equação do 3º grau:

$$Z^3 + (1 - \frac{4}{3} x^{-1}) Z^2 + (\frac{1}{4} - x^{-1}) Z - \frac{1}{6} x^{-1} = 0 \quad (V-84)$$

$$\text{onde } Z = \frac{J\chi}{\mu} \quad \text{e} \quad x = \frac{K T}{J} \quad (V-85)$$

A solução de (V-84) é:

$$Z = \frac{1}{4} \left\{ \left[1 + \left(\frac{8}{3}\right)^2 x^{-2} \right]^{1/2} - (1 - 8/3 x^{-1}) \right\} \quad (V - 86)$$

Obtivemos portanto a suscetibilidade a campo nulo como função da temperatura (Fig. 4).

Como último cálculo, teremos o calor específico magnético, que foi definido pela eq. (V-36) como:

$$C_{MAG} = - \frac{\partial}{\partial T} \left(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right)_{h=0}$$

Usando as equações (V-43) e (V-83) e efetuando os limites para campo nulo, obtemos a seguinte expressão para o calor específico como função da suscetibilidade a campo nulo e temperatura:

$$\left(\frac{J C_{MAG}}{K} \right) = - \left[\frac{4 Z^2}{Z_1} + \frac{8 x Z Z' (1 + 2Z)}{(1 + 4Z)^2} + \frac{(8Z^3 + 24 x Z' Z^2)(1 + 4Z)(2+4Z)}{(1 + 4Z)^2} \right. \\ \left. \frac{-32x Z^3 (3 + 8Z)}{(2 + 4Z)^2} \right] \quad (V - 87)$$

onde:

$$Z' = \frac{\partial Z}{\partial T} = - \frac{1}{4} \left[\left(\frac{8}{3}\right)^2 x^{-3} \left[1 + \left(\frac{8}{3}\right)^2 x^{-2} \right]^{-1/2} + \frac{8}{3} x^{-2} \right] \quad (V - 88)$$

Com a eq. (V - 86) para a suscetibilidade a campo nulo, podemos determinar o calor específico magnético em função da temperatura (Fig. 8).

b) - Aproximação de Callen

O desenvolvimento teórico para o cálculo das grandezas termodinâmicas será o mesmo feito para a aproximação de Tyablikov, sendo que no caso atual a cadeia de equações de movimento será "quebrada" pelo "decoupling" pro

pôsto por Callen (eq.(IV-27) para $S = 1$, ou seja:

$$\langle\langle S_g^z S_j^+ ; B_\lambda \rangle\rangle_E \rightarrow \langle S^z \rangle \langle\langle S_j^+ ; B_\lambda \rangle\rangle_E - \frac{1}{2} \langle S^z \rangle \langle S_g^- S_j^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B_\lambda \rangle\rangle_E \quad (V - 89)$$

Daremos como exemplo o cálculo das funções de correlação $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$ e $\langle S_2^- S_1^+ \rangle$; depois nos restringiremos a apresentar os resultados para as funções de correlação utilizadas nos cálculos e as expressões das grandezas termodinâmicas, ressaltando as diferenças fundamentais entre estes resultados e os calculados na aproximação de Tyablikov.

Aplicando a aproximação de Callen (eq.(V-89)) para as equações (V-35) e (V-37) das funções de Green $\langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E$ e $\langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E$, respectivamente, obtemos as seguintes equações:

$$\left[E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right) \right] \langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = -2J \langle S^z \rangle \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right) \langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E \quad (V - 90)$$

e

$$\left[E - \mu h - 2J \langle S^z \rangle \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right) \right] \langle\langle S_2^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = \frac{\langle S^z \rangle}{\hbar} - 2J \langle S^z \rangle \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right) \langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E \quad (V - 91)$$

Resolvendo o sistema das equações (V-90) e (V-91), obtemos respectivamente:

$$\langle\langle S_1^+ ; S_2^- \rangle\rangle_E = \frac{-2J \langle S^z \rangle^2}{\hbar} \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right) \frac{1}{(E - \mu h)(E - \mu h - 4J \langle S^z \rangle \left(1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle \right))} \quad (V - 92)$$

$$e \quad \langle\langle s_2^+; s_2^- \rangle\rangle_E = \frac{\langle s^z \rangle}{\tilde{n}} \frac{(E - \mu h - 2J \langle s^z \rangle (1 + \frac{1}{2} \langle s_2^- s_1^+ \rangle))}{(E - \mu h) (E - \mu h - 4J \langle s^z \rangle (1 + \frac{1}{2} \langle s_2^- s_1^+ \rangle))} \quad (V - 93)$$

As equações (V-92) e (V-93) mostram que a aproximação de Callen introz um fator característico $(1 + \frac{1}{2} \langle s_2^- s_1^+ \rangle)$ que modifica um dos polos das funções de Green. Esta é a diferença fundamental entre as aproximações de Callen e Tyablikov, e para altas temperaturas, as equações (V-92) e (V-93) tendem para as equações (V-39) e (V-40) (Tyablikov), pois $\langle s^z \rangle \langle s_2^- s_1^+ \rangle$ tende a zero mais rapidamente que $\langle s^z \rangle$ quando $T \rightarrow \infty$. Devemos lembrar que esta diferença corresponde, no caso do Hamiltoniano Heisenberg geral, a uma melhora no tratamento da energia renormalizada das ondas de spin.

Pelos polos das equações (V-92) e (V-93), verificamos também que a aplicação da aproximação de Callen neste modelo só tem sentido para $h \neq 0$. Calculando o salto das funções de Green pela eq. (II-28a), teremos:

$$\langle s_2^- s_1^+ \rangle = \langle s^z \rangle Y_1 \quad (V - 94)$$

e

$$\langle s_2^- s_2^+ \rangle = \langle s^z \rangle X_1 \quad (V - 95)$$

onde:

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ Y_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{e^{\mu h \beta} - 1} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix} \frac{1}{(e^{\mu h + 4J \langle s^z \rangle (1 + \frac{1}{2} \langle s_2^- s_1^+ \rangle)} - 1)^\beta} \quad (V - 96)$$

O desenvolvimento que se segue é o mesmo que na aproximação de Tyablikov, e então apresentaremos apenas os resultados, frisando as equações correspondentes na aproximação de Tyablikov.

$$(V-46) \longrightarrow \langle s^z \rangle = 1 - \frac{1}{2} \langle s_2^- s_1^+ \rangle - \frac{1}{4} \langle (s_2^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle \quad (V - 97)$$

$$(V-53) \longrightarrow \langle (s_2^-)^2 (s_2^+)^2 \rangle = \langle s_2^- s_2^+ \rangle \frac{X_1}{(1 + X_1)} \quad (V - 98)$$

$$(V-56) \longrightarrow \langle s^z \rangle = \frac{4(1 + X_1)}{4 + 6X_1 + 3X_1^2} \quad (V - 99)$$

$$(V-64) \longrightarrow \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle = \langle s_1^z s_2^z \rangle X_1 - \frac{\langle s_1^- s_2^+ \rangle Y_1}{2} \quad (V - 100)$$

$$(V-66) \longrightarrow \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle = 2 \langle s^z \rangle - 2 \langle s_1^z s_2^z \rangle - \frac{1}{2} \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle \quad (V - 101)$$

$$(V-76) \longrightarrow \langle s_2^+ (s_2^-)^2 s_1^+ \rangle = \langle s_2^+ s_1^- \rangle \frac{X_1}{1 + X_1} \quad (V - 102)$$

$$(V-81) \longrightarrow \langle s_2^z (s_1^-)^2 (s_1^+)^2 \rangle = \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle \frac{X_1}{1 + X_1} - \frac{\langle s_2^- s_1 \rangle}{2} \frac{X_1 Y_1}{(1+X_1)^2} \quad (V - 103)$$

$$(V-82) \longrightarrow \langle s_2^z s_1^- s_1^+ \rangle = \left[2 \langle s^z \rangle - 2 \langle s_1^z s_2^z \rangle + \frac{\langle s_2^+ s_1^- \rangle}{4} \frac{X_1 Y_1}{(1 + X_1)^2} \right] \frac{2(1 + X_1)}{(2 + 3X_1)} \quad (V - 104)$$

$$(V-83) \longrightarrow \langle s_1^z s_2^z \rangle = \langle s^z \rangle \left[\frac{8(1 + X_1)^2 + Y_1^2(2 + 6X_1 + 3X_1^2)^2}{2(1 + X_1)(4 + 6X_1 + 3X_1^2)} \right] \quad (V - 105)$$

onde X_1 e Y_1 são dados pela eq. (V-96). As equações (V-94) e (V-99), determinam a magnetização e a função de correlação transversal autoconsistentemente como funções da temperatura (Fig. 3 e 5). Com estes resultados e a eq. (V-104) (fig. 6) determinamos a função de correlação longitudinal em função da temperatura, e

consequentemente a função de correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ como função da temperatura. (Fig. 7)

Vamos agora determinar a suscetibilidade magnética a campo nulo, de finida pela eq. (V-18). Usando a eq. (V-99) e efetuando os limites para campo nulo, obtemos a seguinte equação:

$$M^2 z^3 + M(1 - \frac{4}{3} M x^{-1}) z^2 + \left[\frac{1}{4} - x^{-1}(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} M) \right] z - \frac{x^{-1}}{6} = 0 \quad (V - 106)$$

onde:

$$M = (1 + \frac{1}{2} \langle S_2^- S_1^+ \rangle_{h=0}) \quad (V - 107)$$

Calculando o limite para campo nulo da equação (V-94) e resolvendo para $\langle S_2^- S_1^+ \rangle_{h=0}$, obtemos:

$$\langle S_2^- S_1^+ \rangle_{h=0} = \frac{1}{2} xz - \left(\frac{4z+1}{4z} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{(xz)^2 + x(4z-1) + 4\left(\frac{4z+1}{4z}\right)^2} \quad (V - 108)$$

As equações (V-106 - 107-108) determinam a suscetibilidade a campo nulo como função da temperatura. (Fig. 4)

Para finalizar, calcularemos o calor específico magnético, que foi definido pela eq. (V-36). Usando as equações (V-94, 105, 106) efetuando os limites para campo nulo, obtemos:

$$\frac{J C}{K} \frac{MAG}{K} = -(C_1 + C_2) \quad (V-109)$$

onde

$$C_1 = \frac{(C_3 - C_4)}{(1 + 4z)(2 + 4z)}, \quad C_2 = \frac{C_5 C_6 - C_7 C_8}{C_7 C_9 - C_5 C_{10}} \quad (V - 110)$$

$$c_3 = \left[8Z^2 M^2 (Z + 3YZ') + 8xZ^3 M c_2 \right] (1 + 4Z)(2 + 4Z) \quad (V - 111)$$

$$c_4 = 8xZ^3 M^2 (3 + 8Z)(4MZ' + 2Z c_2) \quad (V - 112)$$

$$c_5 = 2 \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0} (2 + \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0}) - 4xZ(2 + \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0}) \quad (V - 113)$$

$$c_6 = 48MZ^2(MZ + 1) + 12Z \quad (V - 114)$$

$$c_7 = ZM^2(144xZ - 128) + 96xMZ + 12x - 32M - 16 \quad (V - 115)$$

$$c_8 = -2Z^2(2 + \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0}) \quad (V - 116)$$

$$c_9 = 4Z(1 + \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0}) - 4xZ(2 + \left\langle s_2^- s_1^+ \right\rangle_{h=0}) \quad (V - 117)$$

$$c_{10} = MZ^2(48xZ - 64) + 24xZ^2 - 16Z \quad (V - 118)$$

$$Z' = \frac{\partial Z}{\partial T} = \frac{c_{10} c_8 - c_6 c_9}{c_7 c_9 - c_5 c_{10}} \quad (V - 119)$$

As equações (V-109) e (V-119) determinam o calor específico magnético como função da temperatura. (Fig. 8)

Para finalizar, devemos ressaltar que investigamos a solução exata pelo método das funções de Green para o modelo considerado, verificando que a cadeia de equações não fecha em segunda ordem como no caso $S = 1/2$ (24)

mas ao contrário, se mostra bem mais complicada e no nosso caso não havia necessidade da conclusão dos cálculos, desde que o objetivo do trabalho é o estudo das aproximações de Tyablikov e Callen.

c) Métodos de Cálculos

Os cálculos para a obtenção dos gráficos nas figuras 3 a 8 das di-
versas grandezas termodinâmicas foram realizados por um computador (S.E.M.A.
- São Paulo). Usamos a parametrização:

$$\frac{\mu h}{J} = .1 \quad X = \frac{K T}{J} \quad (\text{abscissa})$$

Na obtenção da curva da magnetização como função de $(X = \frac{K T}{J})$, na
aproximação de Tyablikov, foi usado o método de Newton Raphson⁽²⁶⁾ para re-
solver a equação transcendental (eq. (V-56)), com erro relativo de 10^{-6} .

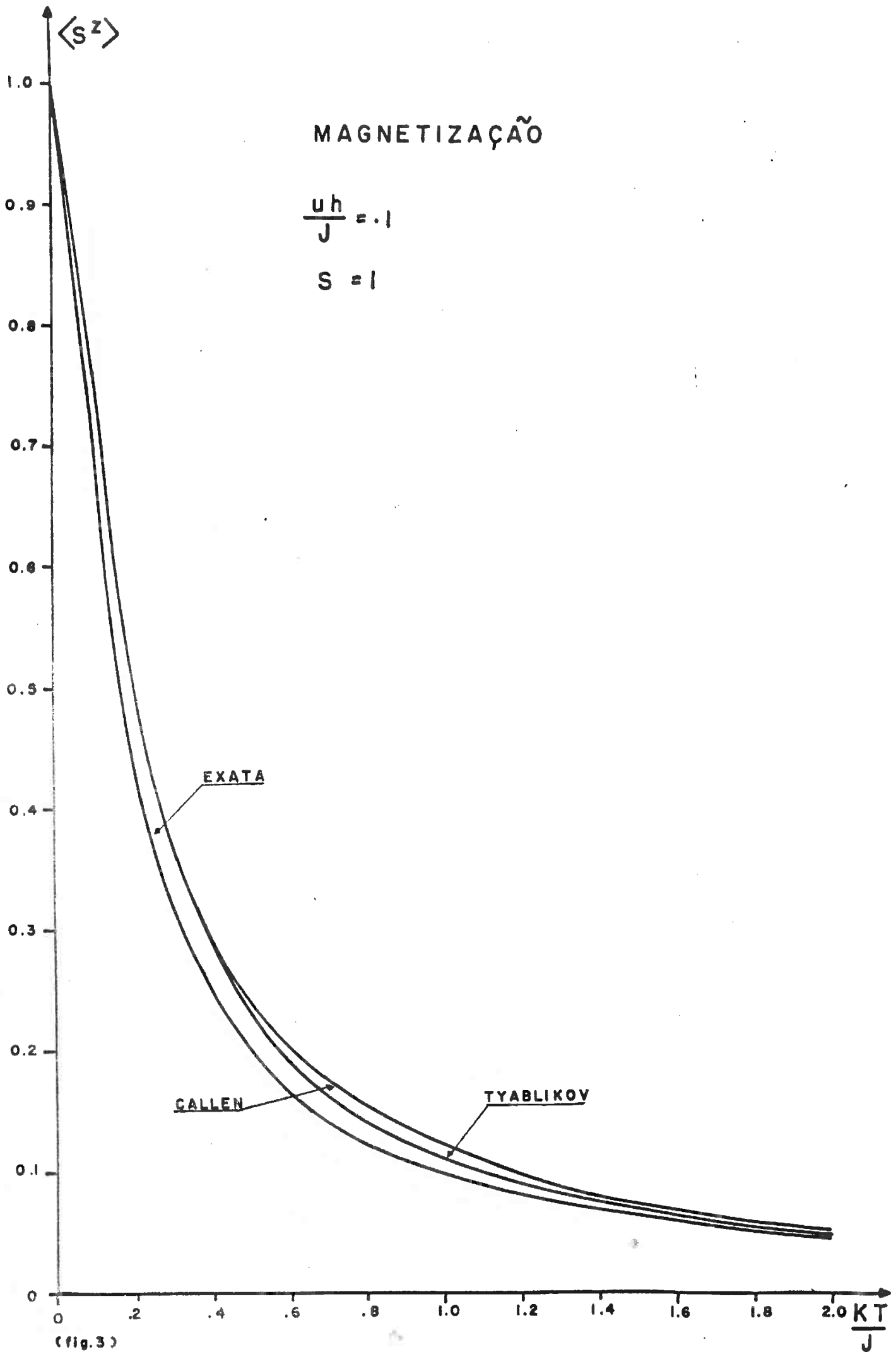
Na obtenção das curvas da magnetização e da função de correlação -
transversal como funções de X, na aproximação de Callen, usamos o método do
Gradiente e o método do "Non Linear Parameter Estimation and Programing"
(25), para resolver o sistema das equações (V-99) e (V-94), com erro médio
absoluto de 10^{-4} .

Na obtenção da curva da suscetibilidade a campo nulo como função -
de X, na aproximação de Callen, foi usado o método de Newton Raphson⁽²⁶⁾ pa-
ra resolver a eq. (V-106), com erro relativo de 10^{-6} , e os resultados foram
comparados com o método Dicotômico.

Finalmente, daremos um esboço da distribuição dos gráficos com as
correspondentes equações:

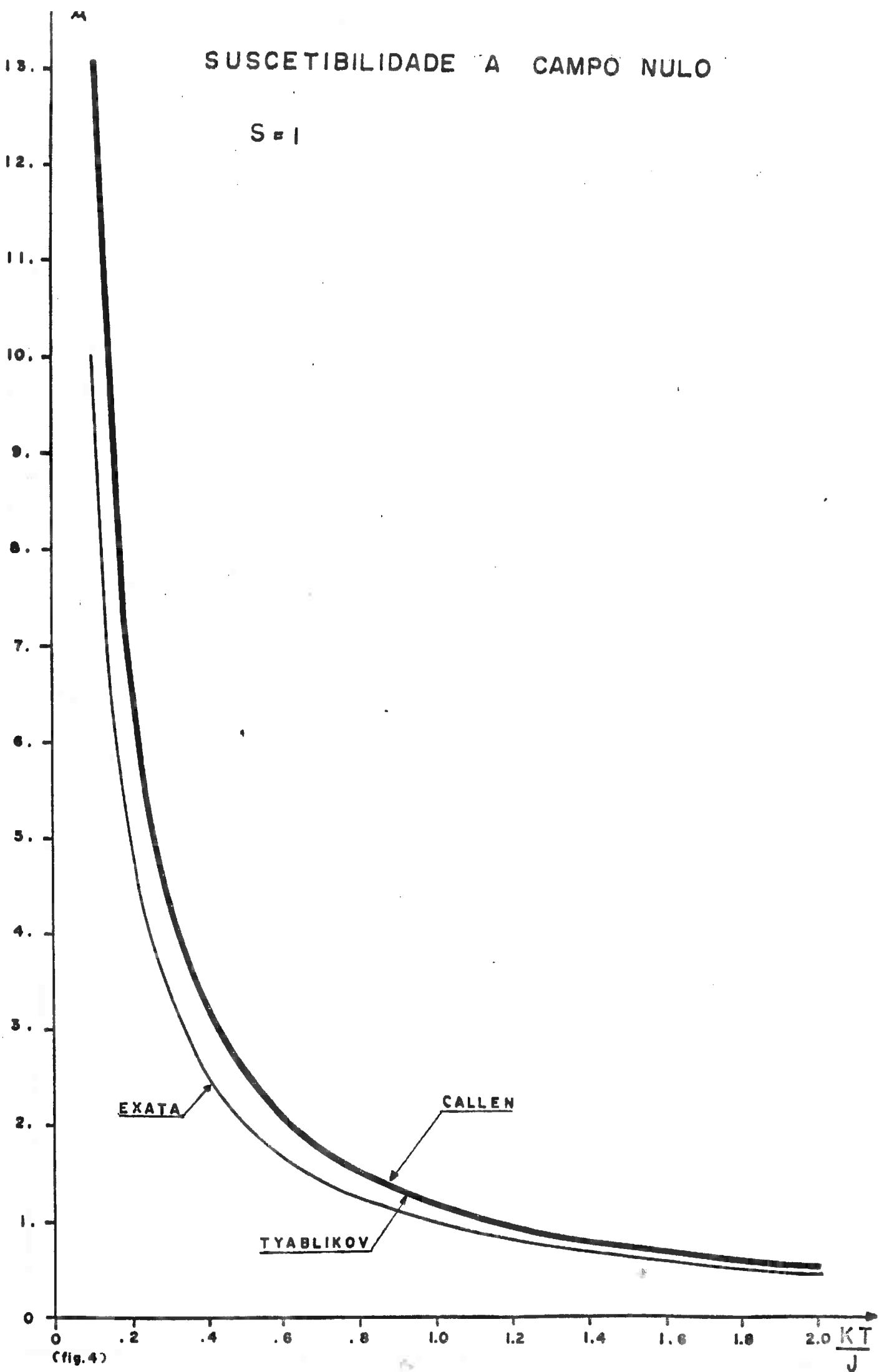
Fig. 3	Magnetização	Exata	eq. (V-10)
		Tyablikov	eq. (V-56)
		Callen	eq. (V-99)

Fig. 4	Suscetibilidade a campo nulo	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 264 1018 293">Exata</td> <td data-bbox="1166 264 1329 293">eq. (V-16)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 331 1086 360">Tyablikov</td> <td data-bbox="1166 331 1329 360">eq. (V-86)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 398 1034 427">Callen</td> <td data-bbox="1166 398 1345 427">eq. (V-106)</td> </tr> </table>	Exata	eq. (V-16)	Tyablikov	eq. (V-86)	Callen	eq. (V-106)
Exata	eq. (V-16)							
Tyablikov	eq. (V-86)							
Callen	eq. (V-106)							
Fig. 5	Função de Correlação Transversal	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 506 1018 535">Exata</td> <td data-bbox="1166 506 1329 535">eq. (V-18)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 573 1086 602">Tyablikov</td> <td data-bbox="1166 573 1329 602">eq. (V-43)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 658 1034 687">Callen</td> <td data-bbox="1166 658 1329 687">eq. (V-94)</td> </tr> </table>	Exata	eq. (V-18)	Tyablikov	eq. (V-43)	Callen	eq. (V-94)
Exata	eq. (V-18)							
Tyablikov	eq. (V-43)							
Callen	eq. (V-94)							
Fig. 6	Função de Correlação Longitudinal	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 763 1018 792">Exata</td> <td data-bbox="1166 763 1329 792">eq. (V-22)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 831 1086 860">Tyablikov</td> <td data-bbox="1166 831 1329 860">eq. (V-83)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 898 1034 927">Callen</td> <td data-bbox="1166 898 1345 927">eq. (V-105)</td> </tr> </table>	Exata	eq. (V-22)	Tyablikov	eq. (V-83)	Callen	eq. (V-105)
Exata	eq. (V-22)							
Tyablikov	eq. (V-83)							
Callen	eq. (V-105)							
Fig. 7	Função de Correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 999 1018 1028">Exata</td> <td data-bbox="1166 999 1329 1028">eq. (V-28)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1066 1086 1095">Tyablikov</td> <td data-bbox="1166 1066 1361 1167">eqs. (V-43) e (V-83)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1178 1034 1207">Callen</td> <td data-bbox="1166 1178 1361 1281">eqs. (V-94) e (V-105)</td> </tr> </table>	Exata	eq. (V-28)	Tyablikov	eqs. (V-43) e (V-83)	Callen	eqs. (V-94) e (V-105)
Exata	eq. (V-28)							
Tyablikov	eqs. (V-43) e (V-83)							
Callen	eqs. (V-94) e (V-105)							
Fig. 8	Calor Específico Magnético	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 1379 1018 1408">Exata</td> <td data-bbox="1166 1379 1329 1408">eq. (V-30)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1447 1086 1476">Tyablikov</td> <td data-bbox="1166 1447 1329 1476">eq. (V-87)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1514 1034 1543">Callen</td> <td data-bbox="1166 1514 1345 1543">eq. (V-109)</td> </tr> </table>	Exata	eq. (V-30)	Tyablikov	eq. (V-87)	Callen	eq. (V-109)
Exata	eq. (V-30)							
Tyablikov	eq. (V-87)							
Callen	eq. (V-109)							
Fig. 9	Desvios da Magnetização	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 1648 1241 1700">(Tyablikov - Exata)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1738 1193 1783">(Callen - Exata)</td> </tr> </table>	(Tyablikov - Exata)	(Callen - Exata)				
(Tyablikov - Exata)								
(Callen - Exata)								
Fig. 10	Desvios da Suscetibilidade a Campo Nulo	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="927 1861 1241 1912">(Tyablikov - Exata)</td> </tr> <tr> <td data-bbox="927 1957 1193 1995">(Callen - Exata)</td> </tr> </table>	(Tyablikov - Exata)	(Callen - Exata)				
(Tyablikov - Exata)								
(Callen - Exata)								



SUSCETIBILIDADE A CAMPO NULO

$S = 1$



(fig. 4)

$\langle S_2^- S_1^+ \rangle$

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO TRANSVERSAL

$$\frac{\mu h}{J} = .1$$
$$S = 1$$

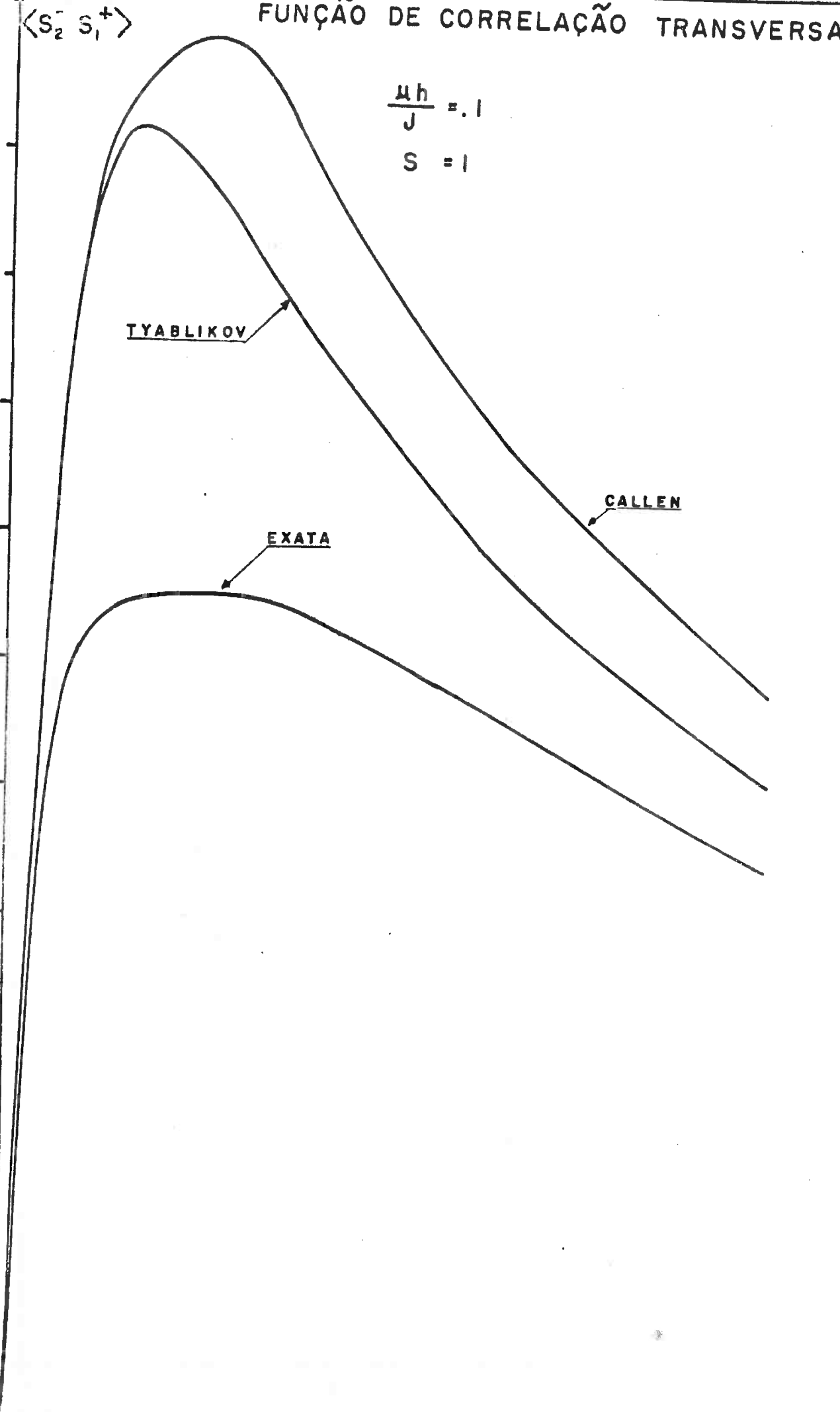
1.0
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0

TYABLIKOV

EXATA

CALLEN

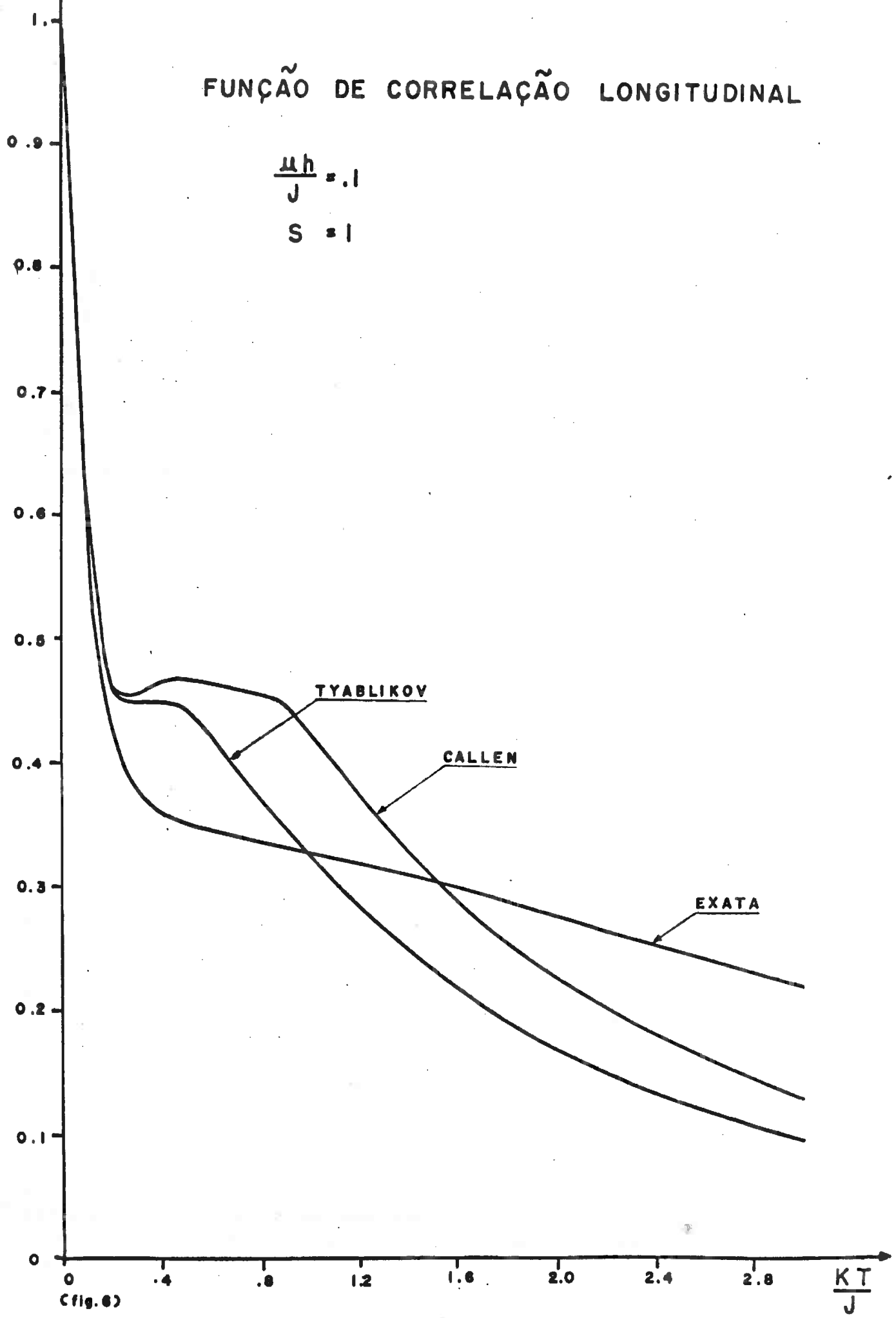
0 .4 .8 1.2 1.6 2.0 2.4 2.8 KT



$$\langle S_1^z S_2^z \rangle$$

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL

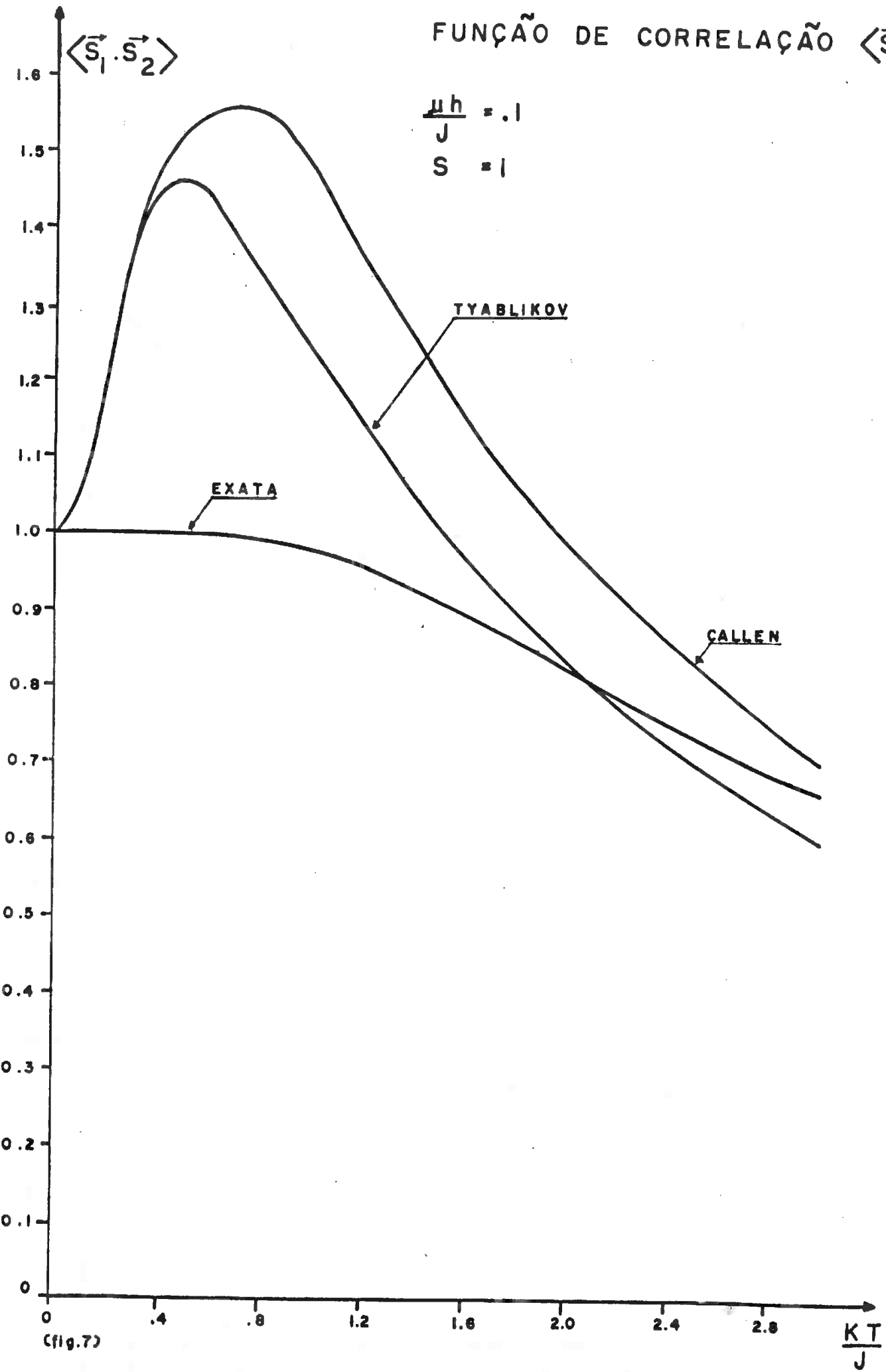
$$\frac{\mu h}{J} = .1$$
$$S = 1$$



(fig. 6)

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$

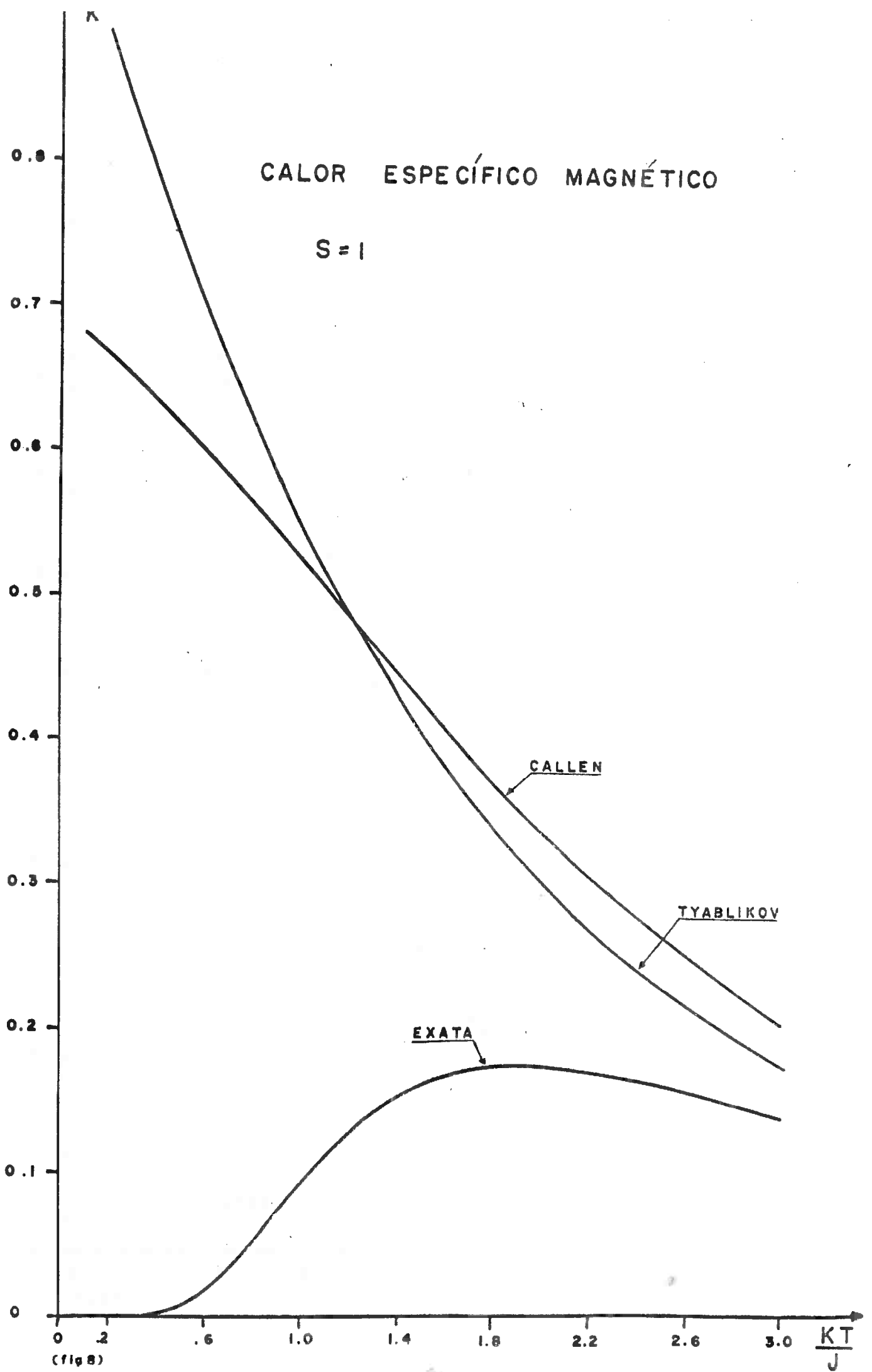
$$\frac{\mu h}{J} = .1$$
$$S = 1$$



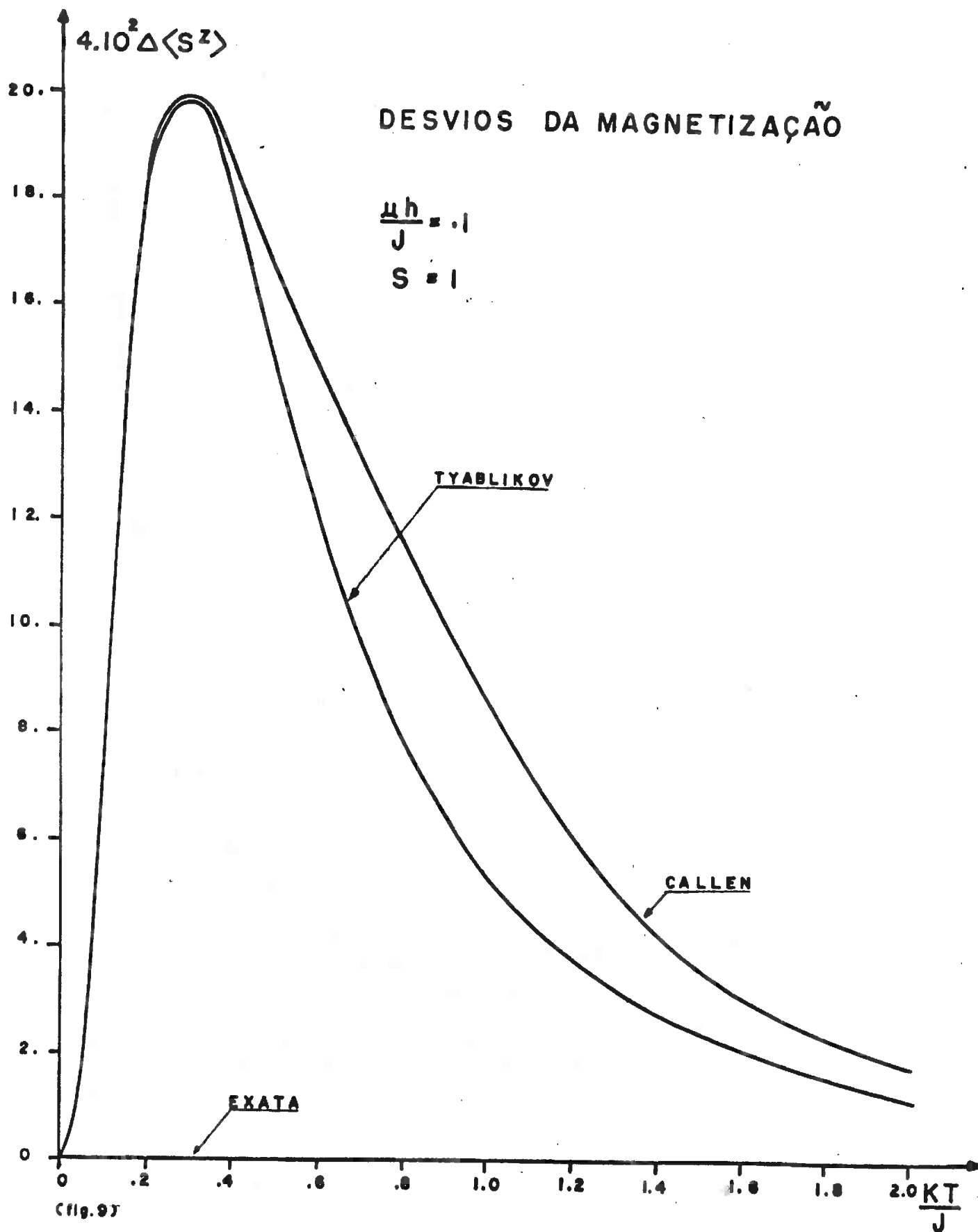
(fig. 7)

CALOR ESPECÍFICO MAGNÉTICO

S = 1



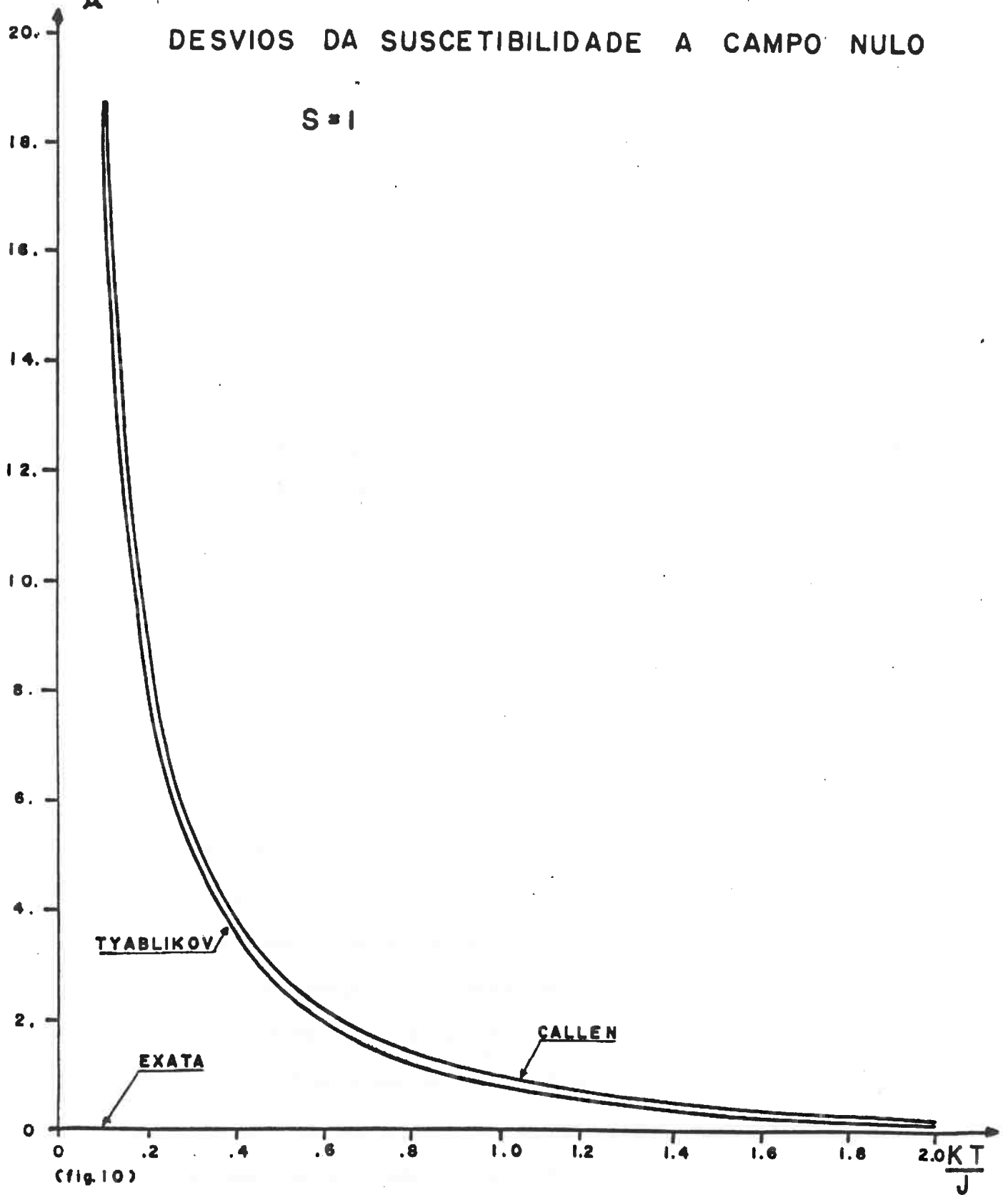
(fig 8)



$$6 \frac{\Delta J \chi}{\mu}$$

DESVIOS DA SUSCETIBILIDADE A CAMPO NULO

$$S = 1$$



VI - RESUMO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados apresentados serão discutidos com argumentos gerais, baseados em III e IV.

1) Comparação dos Méritos das Aproximações

Resultados

Pelas figuras 3 a 10 vemos que excluindo o calor específico magnético, em tôdas as grandezas termodinâmicas as aproximações de Tyablikov e Callen coincidem (pelos valores numéricos encontrados) em baixas temperaturas. Para o calor específico magnético a aproximação de Callen consegue melhor resultado.

Em altas temperaturas, excluindo as funções de correlação longitudinal (Fig. 6) e $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ (Fig. 7), a aproximação de Tyablikov consegue melhores resultados. Para as funções de correlação longitudinal e $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ os resultados não são bem definidos.

Discussão

Pelo resumo feito em (IV-2) a aproximação de Callen trata melhor as energias renormalizadas das quase-partículas. No modelo considerado, apesar de haver diferença no tratamento dos níveis de energia do sistema pelas aproximações de Tyablikov e Callen (vide equações (V-39) e (V-92), o problema de quase-partículas não se coloca desde que o sistema é formado por "clusters" com 2 "spins 1" localizados, esperando-se portanto pouca diferença nos resultados das aproximações em baixas temperaturas. Os resultados numé-

ricos contidos nos gráficos confirmam esta análise.

Como estas aproximações foram idealizadas para o cálculo da magnetização, não é estranho que para o calor específico magnético e suscetibilidade a campo nulo tenhamos resultados não justificados completamente por argumentos com base em III e IV. A suscetibilidade é calculada pela derivada da magnetização com respeito ao campo, portanto mais sensível às aproximações. O calor específico magnético além de ser calculado pela derivada da energia com respeito à temperatura, envolve o problema do cálculo das funções de correlação. Neste caso o calor específico (fig. 8) foi mais sensível à diferença de tratamento dos níveis de energia do sistema pelas aproximações.

Em altas temperaturas os resultados encontrados concordam com os resultados gerais em III e IV, desde que a aproximação de Tyablikov consegue melhores resultados para valores baixos do spin (vide Tabela II). Para a função de correlação longitudinal, os piores e não bem definidos resultados são devidos ao fato de que as aproximações de Tyablikov e Callen foram feitas para calcular funções de correlação transversais, e o método de cálculo indireto usado para a função $\langle S_1^Z S_2^Z \rangle$ não deu bons resultados (Fig. 6), o que acarreta um resultado não bem definido para a função de correlação $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ (Fig. 7).

2) Comparação das Aproximações com o Resultado Exato

Pelas figuras 3 a 10, vemos que excluindo a suscetibilidade a campo nulo (Fig. 4) e calor específico magnético (Fig. 8), as aproximações conseguem resultados razoáveis em baixas temperaturas.

Em temperaturas intermediárias, excluindo a suscetibilidade a campo nulo e o calor específico magnético, as aproximações apresentam os piores resultados.

Em altas temperaturas, excluindo as funções de correlação longitudinal (Fig. 6) e $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ (Fig. 7), as aproximações tendem ao resultado exato. Para a função de correlação longitudinal, os resultados são péssimos nesta região, o que acarreta um resultado não bem definido para $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$.

Discussão

Em baixas temperaturas, os resultados para a magnetização (Fig. 3) e funções de correlação (Figs. 5, 6 e 7) concordam com os resultados gerais em III e IV.

Em temperaturas intermediárias, os resultados apresentam um exemplo bem ilustrativo do comportamento destas aproximações nesta região de temperatura.

Os resultados em altas temperaturas também concordam com os resultados gerais em III e IV, onde ambas as aproximações tendem para a teoria do campo molecular.

As diferenças nos resultados para a suscetibilidade (Fig. 4) a campo nulo e calor específico magnético (Fig. 8) podem ser explicadas pelos mesmos argumentos da discussão em 1).

Concluimos então que apesar do modelo considerado ser o caso mais simples do Hamiltoniano Heisenberg, os resultados das aproximações apresentam as mesmas características que no caso geral em III e IV.

R E F E R Ê N C I A S

- 1) - D. N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk 71, 71(1960) (English Transl.: Soviet Phys. - Usp. 3, 320 (1960))
 - S. V. Tyablikov, Methods in the Quantum Theory of Magnetism (Plenum Press, Inc., New York, 1967).
 - V. L. Bonch - Bruevich and S. V. Tyablikov, The Green Function Method in Statistical Mechanics (North Holland Publ., Co., Amsterdam, 1962).
- 2) - P. Dennery and A. Krzywicki, Mathematics for Physicists (- Harper & Row, 1967).
- 3) - E. C. Titchmarsh, Introduction to the Fourier Integrals (- Clarendon Press, Oxford, England (1937)).
 - E. Predazzi, Notas do Curso "Phenomenology and Models in - Strong Interaction - High Energy Physics" (I.F. da U.S.P., 1970).
- 4) - J.G. Ramos e A.A. Gomes (submetido para publicação ao Nuovo Cimento) - preprint em notas de Física (C.B.P.F.), XV, 245(1969). J. G. Ramos, Tese de Doutorado (I.F. da U.S.P., 1970).
- 5) - W. Heisenberg, Z. Physik 49, 619 (1928).- J.G. Ramos, Notas de Seminário (I.F. da U.S.P., 1970).
- 6) - E. R. Pike, Proc. Phys. Soc. (London), 84, 85(1964)
- 7) - N.N. Bogoluibov and S.V. Tyablikov, Soviet Physics-Doklody 4, 604(1959)
- 8) - S.V. Tyablikov, Ukr. Mat. Zh. 11, 287(1959)
- 9) - R.A. Tahir-Kheli and D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 88(1962)
- 10) - F. J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217, 1230(1956)
- 11) - H.A. Brown and J.M. Luttinger, Phys. Rev. 100, 685(1955)
- 12) - H.Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963)
- 13) - T.Holstein and M.Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098(1940)
- 14) - T.Morita and T. Tanaka, Phys. Rev. 138, A1 395 (1965)
- 15) - A.S. Davidov, Quantum Mechanics (Addison Wesley, 1965)
- 16) - J.D. Patterson and W.H.Southwell, Am. J. Phys. 36, 343 - (1968)

- 17)- J.G.Ramos, Tese de Doutorado (I.F. da U.S.P., 1970)
 - 18)- J.G. Ramos and A.A. Gomes (aceito para publicação no Can. J. Phys.) - preprint em notas de Física (C.B.P.F.), XVI (1970)
 - 19)- F.Bloch, Z. Physik 61, 206 (1930)
 - 20)- M.Wortis, Phys. Rev. 138, A 1126 (1965)
 - 21)- B.E.Argyle, S.H. Charap and E.W. Pugh, Phys. Rev. 132, 2051 (1963)
 - 22)- A.A. Gomes, II Simpósio Brasileiro de Física Teórica (1969) (Fascículo IV).
 - 23)- I. P. Fitipaldi, Tese de Mestrado (I.F. da U.S.P., 1970)
 - 24)- G.L. Lucas, Am. J. Physics 36, 942 (1968)
 - 25)- Yomathan Bard, Contributed Program Lybrary - 360D 13.6.003 (I.B.M.)
 - 26)- J.F. Traub, Mathematical Methods of Digital Computer V-2
 - 27)- S.T. Dembinsky, Can. J. Phys. 46, 1021 (1968).
-