

2H-FC
AG-F
956

FERROMAGNETO DE HEISENBERG CON INTERACCION
BICUADRATICA Y ANISOTROPIA UNIAXIAL

NORMAN CRUZ MARIN

Profesor Patrocinante: Dr. Rodrigo Ferrer P.

Santiago, Junio

1986



02814

Facultad de Ciencias
Universidad de Chile

INFORME DE APROBACION
TESIS DE MAGISTER

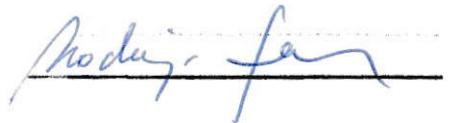
Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la tesis de Magister presentada por el candidato

NORMAN CRUZ MARIN

Ha sido aprobada por la Comision Informante de tesis como requisito de Tesis para optar al grado de Magieter en Ciencias Físicas

Patrocinante de Tesis

Dr. Rodrigo Ferrer

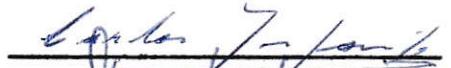


Comisión Informante de Tesis

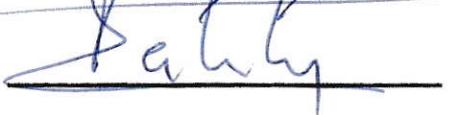
Dr. Roberto Hojman

 P.P.

Dr. Carlos Infante



Dr. Romualdo Tabensky



AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi tutor, Dr. Rodrigo Ferrer, el apoyo que brindara tanto a mi labor profesional como a la realización de esta tesis.

Tampoco puedo dejar de mencionar mi reconocimiento a mi colega y compañero de estudios, Ricardo Pintanel, por su amable cooperación en muchos aspectos de esta investigación.

A CLAUDIA Y ANDRES, MIS
COMPAÑEROS EN EL SENDERO

AL SEÑOR HUMBERTO FIGUEROA, MI
MAESTRO, EL HOMBRE DEL MEDIODIA

" HA LLEGADO EL MOMENTO DE DARSE CUENTA DE QUE TODA INTERPRETACION, INCLUSO POSITIVISTA, DEL UNIVERSO DEBE, PARA SER SATISFACTORIA, ABARCAR TANTO EL INTERIOR COMO EL EXTERIOR DE LAS COSAS - LO MISMO EL ESPIRITU QUE LA MATERIA -. LA VERDADERA FISICA SERA AQUELLA QUE LLEGUE ALGUN DIA A INTEGRAR AL HOMBRE TOTAL DENTRO DE UNA REPRESENTACION COHERENTE DEL MUNDO."

PIERRE TEILHARD DE CHARDIN

El Fenómeno Humano

I N D I C E

	Pág.
INTRODUCCION	1
I.- HAMILTONIANO DE HEISENBERG	5
1.1 TERMINO BILINEAL	
1.2 TERMINO BICUADRATICO	
1.3 TERMINO DE ANISOTROPIA	
II.- FUNCIONES DE GREEN	18
2.1 DEFINICION DE LA FUNCION DE GREEN	
2.2 ECUACION DE MOVIMIENTO DE LA FUNCION DE GREEN	
2.3 REPRESENTACIONES ESPECTRALES	
2.3.1 FUNCIONES TEMPORALES DE CORRELACION	
2.3.2 REPRESENTACION ESPECTRAL DE LA FUNCION DE CORRELACION	
2.3.3 REPRESENTACION ESPECTRAL DE LA FUNCION DE GREEN	
III.- DESACOPLAMIENTOS	25
3.1 DESACOPLAMIENTO RPA	
3.2 DESACOPLAMIENTO DE CALLEN	
3.2.1 SPIN $1/2$	
3.2.2 SPIN MAYOR QUE $1/2$	
3.3 DESACOPLAMIENTO DE ANDERSON Y CALLEN	

IV.-	SOLUCION DEL HAMILTONIANO	32
4.1	ENERGIA DE LOS MAGNONES Y SOLUCION AUTOCONSISTENTE	
4.2	METODO DE FLAX Y RAICH	
4.3	CALCULO DE TEMPERATURAS CRITICAS	
V.-	RESULTADOS	43
VI.-	DISCUSION Y CONCLUSIONES	49
	APENDICE A	58
	APENDICE B. PROGRAMA COMPUTACIONAL	61
	BIBLIOGRAFIA	63

RESUMEN

Se estudia el comportamiento de un ferromagneto de Heisenberg incluyendo interacción bicuadrática y anisotropía uniaxial mediante el método de funciones de Green tipo Zubarev. Las ecuaciones de movimiento de estas funciones se resuelven desacoplándolas según la aproximación de Anderson y Callen. Se encuentra la temperatura crítica de una red B.C.C. con interacción solo a primeros vecinos en función de los parámetros que cuantifican las interacciones antes mencionadas.

Las expresiones para la evaluación de las temperaturas críticas incluyen sumas generalizadas de Watson, las que son llevadas a una forma analítica conveniente mediante el método de Flax y Raich

INTRODUCCION

En la teoría de los fenómenos cooperativos, como el magnetismo, el Hamiltoniano de Heisenberg ha sido el punto de partida para efectuar cálculos relativos a la magnetización espontánea. En la actualidad este Hamiltoniano es considerado adecuado para construir modelos de magnetismo en aisladores, donde los momentos magnéticos están más o menos localizados. Esta última condición se encuentra en las sales (aisladoras) del grupo de transición y las tierras raras. Ciertos compuestos de tierras raras que exhiben un ordenamiento de tipo magnético pueden ser descritos por un Hamiltoniano de Heisenberg que incluye, además de la usual interacción bilineal, una interacción bicuadrática y un término de anisotropía uniaxial. La interacción bilineal es básicamente una interacción de intercambio que conduce a un acoplamiento de los átomos. La interacción bicuadrática se origina en un mecanismo de superintercambio que permite el acoplamiento de dos iones magnéticos via los electrones de un ión no magnético que los separa. Luego que Harris y Owen (5), Rodbell y otros (6), señalaron la importancia de este término en las propiedades de ciertos materiales antiferromagnéticos se le ha incluido frecuentemente en modelos teóricos del magnetismo. El término de anisotropía se origina en la perturbación que el campo eléctrico cristalino produce en los iones magnéticos. Nos restringimos al caso uniaxial.

El Hamiltoniano que incluye las interacciones antes mencionadas está dado por la expresión:

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 2\alpha J \sum_{i \neq j} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 - \sum_i D S_{iz}^2$$

donde:

J es la constante de intercambio; α , el parámetro de interacción bicuadrática y D , el parámetro de anisotropía uniaxial. \vec{S}_i y \vec{S}_j son operadores de spin correspondientes a los sitios i y j respectivamente. Las sumas consideran la interacción de cada ión magnético con el resto de los iones de la red, sin incluir, por supuesto, la interacción de un ión cualquiera consigo mismo. En el presente trabajo se utilizó una red b.c.c., considerando solo interacciones a primeros vecinos. La primera suma en la expresión para \mathcal{H} , corresponde a la interacción bilineal que experimentan los iones magnéticos del sistema; la segunda, a la interacción bicuadrática, donde α es el parámetro que cuantifica la intensidad de esta interacción, y finalmente, el último término representa la interacción con los campos electrostáticos locales.

Este Hamiltoniano fue tratado con teorías de campo medio por primera vez por R. Ferrer y R. Pintanel (10). En la referencia (25), se presentan los resultados obtenidos utilizando funciones de Green. Por otra parte, se han efectuado cálculos - dentro del marco del método de funciones de Green - que han considerado el Hamiltoniano de Heisenberg con términos bilineal y bicuadrático (12), (13), (20), (21) y otros incluyendo solamente la anisotropía uniaxial (7), (8), (9).

El método de las funciones de Green dependientes de

la temperatura permite encontrar expresiones para la magnetización que son válidas sobre todo el intervalo de temperaturas en acuerdo razonable con resultados conocidos, como los obtenidos con ondas de spin para bajas temperaturas y campo medio para temperaturas cercanas a las de Curie.

Como es usual en los cálculos efectuados mediante funciones de Green se hace necesario un desacoplamiento que permita simplificar el problema matemático, consistente, en principio, en un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas. La exposición del método y de los desacoplamientos aparecen en los Capítulos III y IV respectivamente. En la presente investigación se ocupó el desacoplamiento de Callen (14), el cual es aplicable para cualquier valor de los spines de la red y, además, se basa en un criterio físico plausible.

En el presente trabajo se resolvió el Hamiltoniano, encontrando una ecuación autoconsistente que permitía conocer la temperatura crítica del sistema en función de α y D . Para obtener esta ecuación es necesario evaluar sumas generalizadas de Watson (24). Es frecuente en la literatura que se ocupen aproximaciones por series para tratar estas sumas y poder conocer la dependencia de la magnetización con la temperatura y los otros parámetros involucrados. En este trabajo se utilizó el método desarrollado por L. Flax y J. Raich (16), (17) para la evaluación analítica de sumas de Watson.

Se implementó un programa computacional que permitió encontrar solución a la ecuación autoconsistente. De este modo fué posible encontrar las temperatura críticas del sistema en

función de los parámetros α y D .

En el Capítulo I se describe el Hamiltoniano de Heisenberg considerando el origen de cada uno de los términos incluidos en esta investigación. Se discute muy brevemente ciertas consideraciones sobre la integral de intercambio.

El Capítulo II presenta la definición de las funciones de Green, así como el método de resolución de un Hamiltoniano a través de la ecuación de movimiento.

Los desacoplamientos son tratados en el Capítulo III, describiéndose el de Anderson y Callen y los argumentos físicos que lo sustentan.

En el Capítulo IV se presenta la solución del Hamiltoniano y, en consecuencia, la expresión para la energía de los magnones. Además, se expone el cálculo de temperaturas críticas en función de α y D , ocupando el método de Flax y Raich para obtener expresiones analíticas del número de ocupación cuasibosónico.

Los resultados obtenidos para las temperaturas críticas en función del parámetro bicuadrático y del de anisotropía se presentan en el Capítulo IV.

En el Capítulo VI se discuten y analizan los resultados obtenidos.

CAPITULO I

1. HAMILTONIANO DE HEISENBERG

1.1 Término Bilineal

Con la aparición de la teoría cuántica se pudo, luego de largos siglos en que el magnetismo permaneció sin comprenderse en su origen, entender las interacciones responsables de los fenómenos cooperativos, tales como aquellos que dan lugar a la magnetización espontánea en materiales ferromagnéticos. Fué Heisenberg junto a otros quien señaló por primera vez que estas interacciones eran consecuencia del principio de exclusión de Pauli que impone antisimetría frente a intercambio de partículas a las funciones de ondas electrónicas, con lo cual los autovalores correspondientes a la energía dependen de la orientación relativa de los spines.

Esta interacción de intercambio conduce a un acoplamiento de los spines de los átomos y, por lo tanto, de sus momentos magnéticos. Los iones paramagnéticos en un sólido cristalino tienen momentos magnéticos como consecuencia de electrones no pareados. Estos electrones usualmente pertenecen a capas d ó f parcialmente llenas de los átomos.

El ferromagnetismo, por ejemplo, puede ocurrir en elementos con una capa d ó f incompleta, tales como Fe , Ni ,

y los elementos de tierras raras. Con el fin de evaluar el efecto de intercambio se considerará el ejemplo de un sistema simple de dos iones idénticos paramagnéticos con un electrón no apareado junto a un núcleo con capa cerrada (3). Los átomos están fijos con una separación R_{ab}

El Hamiltoniano del sistema es:

$$H = H_a + H_b + H_{ab} \quad (1.1)$$

$$H_a = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_{1a}} \quad (1.2)$$

$$H_b = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_{2b}} \quad (1.3)$$

$\frac{Ze^2}{r_{1a}}$ es el operador de energía potencial del electrón 1 en el campo del núcleo del ión a; H_b es el Hamiltoniano del electrón 2 en el campo del ión b. Los orbitales atómicos que son soluciones de los correspondientes ecs. de Schrodinger se denotan por

$$H_a \phi_a(r_1) = E_a \phi_a(r_1) \quad (1.4)$$

$$H_b \phi_b(r_2) = E_b \phi_b(r_2) \quad (1.5)$$

H_{ab} es el Hamiltoniano de interacción y tiene la forma

$$H_{ab} = \frac{Ze^2}{R_{ab}} - \frac{Ze^2}{r_{1b}} - \frac{Ze^2}{r_{2a}} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (1.6)$$

$\frac{Ze^2}{R_{ab}}$ repulsión de los núcleos de cada ión

$\frac{Ze^2}{r_{1b}}$ potencial del electrón 1 debido al ión b

$\frac{Ze^2}{r_{2a}}$ potencial del electrón 2 debido al ión a

$\frac{e^2}{r_{12}}$ repulsión coulombiana entre los 2 electrones.

El Hamiltoniano (1.1) no depende explícitamente de los spines de los electrones.

La función de onda de un electrón se puede escribir como

$$\phi_i(\xi) \equiv \phi_i(r, \sigma) = \phi_i(r)\chi_i(\sigma) \quad (1.7)$$

donde ξ denota colectivamente la variable espacial r y la variable de spin σ .

Para un sistema con N electrones la función de onda se construye tomando el determinante de las N funciones ortogonales $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\xi_1) & \phi_2(\xi_1) & \dots & \phi_N(\xi_1) \\ \phi_1(\xi_2) & \phi_2(\xi_2) & \dots & \phi_N(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_1(\xi_N) & \phi_2(\xi_N) & \dots & \phi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (1.8a)$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \dots \phi_N(\xi_N) \right] \quad (1.8b)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P^S \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \dots \phi_N(r_N) \times \quad (1.8c)$$

$$P^\sigma \chi_1(\sigma_1) \chi_2(\sigma_2) \dots \chi_N(\sigma_N)$$

donde P^S y P^σ son los operadores de permutación sobre el espacio y las coordenadas de spin respectivamente. Los autoestados del operador S^2 son combinaciones lineales de estos determinantes, puesto que cualquier función antisimétrica puede ser expandida en términos de determinantes de Slater.

Los autoestados de S^2 y S^z son los tripletes

$$^3 |S=1, M_S=1\rangle_{ab} = \frac{[\phi_a \phi_b]}{(1 - S_{ab}^2)^{1/2}} \quad (1.9a)$$

$$^3 |S=1, M_S=0\rangle_{ab} = \left\{ \frac{[\phi_a \bar{\phi}_b] + [\bar{\phi}_a \phi_b]}{\{2(1 - S_{ab}^2)\}^{1/2}} \right\}^{1/2} \quad (1.9b)$$

$$^3|S=1, M_S=-1\rangle_{ab} = \frac{[\bar{\phi}_a \phi_b]}{(1-S_{ab}^2)^{1/2}} \quad (1.9c)$$

y los simpletes

$$^1|S=0, M_S=0\rangle_{ab} = \frac{[\phi_a \bar{\phi}_b] - [\bar{\phi}_a \phi_b]}{\{2(1+S_{ab}^2)\}^{1/2}} \quad (1.10a)$$

$$^1|S=0, M_S=0\rangle_{aa} = [\phi_a \bar{\phi}_a] \quad (1.10b)$$

$$^1|S=0, M_S=0\rangle_{bb} = [\phi_b \bar{\phi}_b] \quad (1.10c)$$

Al escribir estos determinantes se ha adoptado la siguiente convención

$$\frac{1}{N!} [\phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \dots \phi_N(\xi_N)] = [\phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_N]$$

i.e el factor de normalización es absorbido en $[\dots]$; los orbitales sin barra denotan las funciones spin-up $\phi_1 = \phi_1(r_1) \alpha(1)$ y los con barra denotan funciones spin-down $\phi_3 = \phi_3(r_3) \beta(3)$, α y β son las funciones χ , spin-up y spin-down. Además:

$$S_{ab} = \langle \phi_a(n) | \phi_b(n) \rangle = \int \phi_a^*(n) \phi_b(n) d^3n \quad (1.11)$$

es la integral de traslape de las funciones $\phi_a(r)$ y $\phi_b(r)$

Los estados tripletes de las ecs. (1.9) y el estado singlete de las ecs. (1.10a) corresponden a los estados considerados por Heitler y London (1927) para la molécula de Hidrógeno H-H. Los estados singletes de las ecs. (1.10a) y (1.10b) corresponden a configuraciones tales como $H^+ - H^-$ y $H^- - H^+$, donde uno de los hidrógenos tiene dos electrones y el otro un protón solo. La configuración de la ec. (1.10a) corresponde al estado fundamental que interactuará con los estados excitados de las configuraciones de las ecs. (1.10b) y (1.10c). Habría una corrección de segundo orden a los estados singletes considerando esta interacción. No hay tales correcciones en los estados triplete, puesto que no pueden existir estados excitados con dos electrones con sus spines paralelos ya sea en $\phi_b(r)$ o $\phi_a(r)$ que cumplan con el principio de exclusión de Pauli.

Denotemos la energía de los estados triplete por 3E y la energía de los estados singlete considerando las correcciones debido a las interacciones con los estados excitados por 1E . En forma abreviada

$${}^{(2S-1)} E = K - \{S(S+1) - 1\} J \quad (1.12)$$

donde

$$K \equiv [{}^1E + {}^3E] / 2 \quad (1.13)$$

$$J \equiv [{}^1E - {}^3E] / 2 \quad (1.14)$$

El spin resultante del sistema de dos electrones es $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, donde \vec{S}_1 y \vec{S}_2 son los operadores de spin de los electrones individuales. El spin resultante tendrá entonces los valores $S=0$ (estado singlete) y $S=1$ (estado triplete).

Usando la relación:

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{3}{2} + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.15)$$

se obtiene que el operador

$$\frac{1}{2} (1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \quad (1.16)$$

tiene los autovalores $S(S+1) - 1$, i.e., 1 para el estado triplete y -1 para el estado singlete. Con lo cual la ec. (1.12) puede escribirse como

$$({}^{2s-1})E = K - \frac{1}{2} (1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) J \quad (1.17)$$

La ec.(1.14) define la energía de intercambio J , que será positiva si la energía del estado triplete es la más baja, es decir, si el alineamiento paralelo de los spines tiene mayor probabilidad (ferromagnetismo). Si J es negativo se favorece el alineamiento antiferromagnético. Calculando explícitamente 1E y 3E se obtiene

$$\begin{aligned}
 J = \frac{1}{1 - S_{ab}^4} & \left\{ \left[\langle ab | \frac{e^2}{r_{12}} | ba \rangle + S_{ab} \langle a | \frac{-ze^2}{r_{2a}} | b \rangle \right. \right. \\
 & + S_{ab} \langle b | \frac{-ze^2}{r_{1b}} | a \rangle - S_{ab}^2 \left\{ \langle ab | \frac{e^2}{r_{12}} | ab \rangle + \right. \\
 & \left. \left. \langle b | \frac{-ze^2}{r_{1a}} | b \rangle + \langle a | \frac{-ze^2}{r_{2b}} | a \rangle \right\} \right\} - \frac{1}{1 + S_{ab}^2} \cdot \left\{ \right. \\
 & \left. \frac{|\langle a | -ze^2/r_{1a} | b \rangle|^2 + |\langle b | -ze^2/r_{2b} | a \rangle|^2}{\Delta E (b \rightarrow a) \quad \Delta E (a \rightarrow b)} \right\} \quad (1.18)
 \end{aligned}$$

En esta expresión se ha omitido la repulsión entre los núcleos de los iones ze^2/r_{ab} . La forma explícita de las cantidades que aparecen en la ec.(1.18) son las siguientes

$$\langle a | V(r) | b \rangle \equiv \int \phi_a^*(r) V(r) \phi_b(r) d^3r$$

$$\langle ab | e^2/r_{12} | cd \rangle \equiv \int \phi_a^*(r_1) \phi_b^*(r_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) \phi_c(r_1) \phi_d(r_2) d^3r_1 d^3r_2$$

Los 2 últimos términos de la ec.(1.18) son consecuencia de la interacción del estado fundamental singlete con los dos estados

excitados que representan configuraciones iónicas.

La expresión (1.18) es más exacta que la obtenida por Heisenberg (1928). Despreciando potencias mayores de la integral de traslape se obtiene:

$$J_H = \langle ab | \frac{e^2}{r_{12}} | ba \rangle - 2(S_{ab} + \Gamma_{ab}) \langle b | V | a \rangle \quad (1.19)$$

donde

$$\Gamma_{ab} = \frac{\langle a | V | b \rangle}{\Delta E(a \rightarrow b)}$$

y

$$V = Z e^2 / r_{1b} \quad (1.20)$$

La ec.(1.15) sugiere que hay una contribución a la energía que es dependiente del spin y de la forma

$$H = -2 J_H \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.21)$$

La integral del intercambio $\langle ab | e^2 / r_{12} | ba \rangle$ es siempre positiva; es la autoenergía de una nube electrónica con densidad $e \phi_a^*(r_1) \phi_b(r_1)$



Si este término predomina sobre el segundo en la ec. (1.19), J_H será positivo y el estado ferromagnético será favorecido. Si predomina el segundo, que involucra a la integral de traslape S_{ab} y $a\Gamma_{ab}$, J_H será negativo y el estado antiferromagnético es más probable. Por otra parte, como señala P. Löwdin (11) no puede desarrollarse una teoría de los alineamientos de los spines sobre la base del modelo de Heitler-London - Heisenberg si $S_{ab} = 0$, puesto que en este caso J no cambiaría su signo.

1.2 Término Bicuadrático

El término de interacción bicuadrática es de la forma

$$H_{int} = -2J\alpha (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \quad (1.22)$$

Esta interacción es una corrección bilineal usual y permite describir, considerando el parámetro α , la separación de niveles en el caso en que el spin de los iones sea mayor que 1/2. Si cada ión magnético puede estar en un estado con spin $S=1$, entonces el par acoplado puede tener spin $S=2,1,0$. La interacción bilineal $-2J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ con $S_i = S_j = 1$ entrega tres autovalores de energía: $\mathcal{E}_2 = -2J$ (para $S = 2$), $\mathcal{E}_1 = 2J$ (para $S = 1$) y $\mathcal{E}_0 = 4J$ (para $S = 0$). Estos autovalores pueden encontrarse directamente de la relación $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2} S(S+1) - s(s+1)$ donde S es el spin total y s el valor del spin individual.

Sin embargo, la separación entre los niveles no es

necesariamente la correcta y no puede esperarse a priori que la relación $\epsilon_0 - \epsilon_1 = 1/2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)$ sea verdadera.

Si consideramos entonces el término bicuadrático obtendremos una interacción dada por

$$H_{int} = -2J(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - 2J\alpha (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \quad (1.23)$$

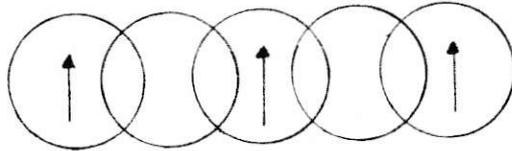
cuyos autovalores son $\epsilon_2 = -2J + 2J\alpha$ (para $S = 2$);
 $\epsilon_1 = 2J + 2\alpha J$ (para $S = 1$) y $\epsilon_0 = 2J + 8J\alpha$ (para $S = 0$)

Los parámetros J y α pueden determinarse experimentalmente y obtener la separación de niveles.

La interacción bicuadrática comenzó a despertar interés teórico luego que Harris y Owen (5), Rodbell y otros (6) establecieron que pudiera tener efectos significativos en las propiedades magnéticas de materiales antiferromagnéticos, como $\alpha - MnS$, MnO , $EuSe$ y en ferromagnéticos.

El origen de la interacción bicuadrática ha sido explicada por Anderson(30) y Huang y Orbach(31) a través del mecanismo de superintercambio, Anderson desarrolló sus cálculos considerando un superintercambio entre los iones M_n^{2+} via ión de oxígeno, en el compuesto M_nO . En este tipo de intercambio los iones magnéticos están separados por un ión

no magnético, es decir, un ión con las capas electrónicas cerradas. No hay traslape de las distribuciones de cargas de los iones magnéticos y la interacción magnética ocurre por medio de los electrones del ión no magnético común (2). Esquemáticamente,



1.2.1 Estado Ferromagnético

Puede mostrarse que cuando las siguientes desigualdades se satisfacen

$$J > 0 \quad ; \quad -\frac{1}{2} S^2 < \alpha < \frac{1}{S}$$

entonces se tiene la seguridad que el estado fundamental será ferromagnético con energía $E_0 = -J S^2 - \alpha J S^4$ (19). Estas son condiciones suficientes pero no necesarias para el ferromagnetismo. Desde un punto de vista clásico podría esperarse que si J y α son positivas el estado fundamental sería ferromagnético, sin importar cuan grande fuera α , puesto que si θ es el ángulo entre los spines, entonces para $\theta=0$ y $\theta=\pi$ la energía bicuadrática es la misma (degeneración). Sin embargo desde el punto de vista clásico el resultado es diferente porque $S = 0$ (spines antiparalelos) da un valor de expectación menor que $S = 2S$ para $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$.

1.3 Termino de Anisotropía

La presencia de un campo cristalino en las vecindades de los iones magnéticos perturba tanto las funciones de onda como los niveles de energía de los iones. Para evaluar la interacción debido a estos campos se considera un modelo de iones con carga puntual. El Hamiltoniano de esta perturbación es simplemente:

$$H_{int} = \sum_i q_i V_i = \sum_i \sum_j' q_i q_j / |\vec{R}_j - \vec{r}_i|$$

donde q_i, q_j son las cargas de los iones i y j respectivamente, ubicados en \vec{r}_i y \vec{R}_j

Si la discusión se restringe al caso uniaxial y suponiendo que el campo es el mismo para cada ión del sistema, el Hamiltoniano debido a la perturbación por el campo cristalino es

$$H_{int} = - D \sum_i S_{iz}^2$$

Un desarrollo detallado de como obtener esta última expresión puede encontrarse en las referencias (28) y (29).

CAPITULO II

2. FUNCIONES DE GREEN

El método de las funciones de Green, utilizado en un principio en la teoría cuántica de campos, constituye una herramienta poderosa para tratar problemas de la mecánica estadística donde el número de partículas interactuantes es muy grande. Particularmente útil ha sido la aplicación de las funciones de Green dependientes del tiempo y la temperatura a tópicos de los procesos irreversibles, superconductividad, electrones interactuantes con la red en metales y semiconductores, y ferromagnetismo. En la referencia (4) se resumen las propiedades de las funciones de Green y sus aplicaciones más importantes.

2.1 Definición de la Función de Green

En lo que sigue a continuación se desarrollará el método considerando sólo la función de Green retardada definida por:

$$G_R(t, t') = \frac{-i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle \quad (2.1)$$

donde $\Theta(t-t')$ es la función escalón definida por:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

El paréntesis cuadrado denota el conmutador. El paréntesis triangular corresponde al promedio estadístico definido por:

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{tr} \{ \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})] \dots \}}{\text{tr} \{ \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})] \}} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (2.3)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano independiente del tiempo, \hat{N} es el número total de partículas y μ el potencial químico. $A(t)$ y $B(t)$ son los operadores A y B en la representación de Heisenberg

$$A(t) = e^{i(\hat{H} - \mu \hat{N})t} A e^{-i(\hat{H} - \mu \hat{N})t} \quad (2.4)$$

Es claro que cuando $t=t'$ la función de Green no está definida por la discontinuidad del factor $\Theta(t-t')$. Puede probarse directamente de la definición que $G(t, t')$ depende solamente de $t-t'$, es decir, $G(t, t') = G(t-t')$

La elección de los operadores A y B depende del problema que se esté investigando. Pueden ser operadores fermiónicos o bosónicos o productos de ellos, así como operadores de Pauli, operadores de corriente, u operadores de densidad, etc.

2.2. Ecuación de Movimiento de la Función de Green

Los operadores $A(t)$ y $B(t)$ satisfacen ecuaciones de movimiento de la forma

$$i \frac{dA}{dt} = AH - HA = [A, H] \quad (2.5)$$

Diferenciando la función de Green con respecto a t se obtiene la ecuación

$$\begin{aligned} i \frac{dG}{dt} &= i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle = d\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \\ &+ \langle\langle i \frac{dA(t)}{dt}, B(t') \rangle\rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

pero

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt \quad (2.7)$$

Ocupando (2.5) y (2.7) la ecuación de movimiento (2.6) puede escribirse como:

$$i \frac{dG}{dt} = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle\langle \{A(t)H(t) - H(t)A(t)\}, B(t') \rangle\rangle \quad (2.8)$$

En general, el miembro derecho de la ec (2.8) contiene funciones de Green de orden superior. Construyendo ecuaciones de movimiento para estas nuevas funciones similares a (2.8) se obtiene una cadena de ecuaciones acopladas para las funciones de Green.

Mediante representaciones espectrales de estas funciones pueden imponerse las condiciones de borde necesarias al conjunto de ecuaciones.

2.3 Representaciones Espectrales

2.3.1 Funciones Temporales de Correlación

Las funciones temporales de correlación $\mathcal{F}_{BA}(t-t')$ y $\mathcal{F}_{AB}(t-t')$ están definidas por

$$\mathcal{F}_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle \quad ; \quad \mathcal{F}_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle \quad (2.9)$$

En equilibrio estadístico \mathcal{F}_{AB} y \mathcal{F}_{BA} dependen solamente de $t-t'$, como las funciones de Green. Están definidas cuando $t=t'$. Corresponde a los promedios de los productos de los operadores

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{F}_{BA}(0) &= \langle B(t)A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle \\ \mathcal{F}_{AB}(0) &= \langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

es decir, son funciones de distribución que permiten calcular el promedio de parámetros dinámicos.

Diferenciando (2.9) respecto a t , considerando la ecuación de movimiento para los operadores, se obtiene:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \mathcal{F}_{BA} &= \langle B(t') \{ A(t)H(t) - H(t)A(t) \} \rangle \\ i \frac{d}{dt} \mathcal{F}_{AB} &= \langle \{ A(t)H(t) - H(t)A(t) \} B(t') \rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

Mediante (2.11) podemos evaluar las funciones de correlación integrando directamente o bien, indirectamente, evaluando primero la función de Green (2.6)

2.3.2 Representación Espectral de la Función de Correlación

Escribamos explícitamente el promedio estadístico de la función de correlación

$$F_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_m \langle m|B(t')A(t)|m \rangle e^{-E_m/kT} \quad (2.12)$$

donde E_m y $|m\rangle$ son los autovalores y las autofunciones respectivamente del Hamiltoniano $\mathcal{H} = H - \mu N$; Z es la función partición, definida por $Z = \sum_m e^{-E_m/kT}$

$$\mathcal{H}|m\rangle = E_m|m\rangle \quad (2.13)$$

ocupando la completitud del conjunto de funciones $|m\rangle$ y sabiendo que $e^{-i\mathcal{H}t}|m\rangle = e^{iE_m t}|m\rangle$ y $\langle m|e^{i\mathcal{H}t} = \langle m|e^{iE_m t}$ se obtiene

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle m|B(0)|n\rangle \langle n|A(0)|m\rangle e^{-\frac{E_m}{kT}} e^{-i(E_m - E_n)(t-t')} \quad (2.14)$$

análogamente

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle m|A(0)|n\rangle \langle n|B(0)|m\rangle e^{-\frac{E_m}{kT}} e^{-(E_m - E_n)(t'-t)} \quad (2.15)$$

Podemos escribir estas funciones como:

$$F_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.16a)$$

$$\mathcal{F}_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.16b)$$

donde:

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle e^{\frac{-E_n}{kT}} \delta(E_n - E_m - \omega) \quad (2.17)$$

Las ecuaciones (2.16) constituyen la representación espectral de las funciones de correlación y $J(\omega)$ es la intensidad espectral de la función $\mathcal{F}_{BA}(t)$; es simplemente la definición de la componente de Fourier.

2.3.3 Representación Espectral de la Función de Green

Podemos obtener la representación espectral de la función de Green mediante las representaciones obtenidas para las funciones de correlación. Sea $G(E)$ la componente de Fourier de la función de Green

$$G(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad (2.18a)$$

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(t) e^{iEt} dt \quad (2.18b)$$

Sustituyendo en la ecuación (2.18b) la expresión para $G(t)$ se obtiene:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \left\{ \langle A(t)B(t') \rangle - \langle B(t')A(t) \rangle \right\} \quad (2.19)$$

Usando las representaciones espectrales para las funciones de correlación que aparecen en la ecuación (2.19) se obtiene

$$G_R(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - 1) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon} \quad (2.20)$$

donde se ha utilizado que:

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\epsilon} dx \quad (2.21)$$

Podemos construir la densidad espectral $J(\omega)$ conociendo $G(E)$ y luego encontrar expresiones para las funciones de correlación:

$$F_{BA}(t-t') = \langle B(t') A(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.22)$$

Esta ecuación junto con la ecuación de movimiento de la transformada de Fourier de la función de Green, $G(E) = \langle\langle A; B \rangle\rangle_E$

$$E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = (1/2\pi) \langle [A, B] \rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle_E \quad (2.23)$$

constituyen las únicas ecuaciones requeridas para la aplicación del método de Funciones de Green.

CAPITULO III

3. DESACOPLAMIENTOS

Como es usual en la técnica de las funciones de Green, mediante un desacoplamiento se simplifica la ecuación de movimiento facilitando su resolución. La idea esencial de los desacoplamientos consiste en ignorar algún tipo de correlación en los parámetros termodinámicos, basándose en argumentos físicos plausibles, de acuerdo a la situación tratada. Se trata, en consecuencia, de una aproximación.

3.1 Desacoplamiento RPA (Random Phase Aproximation)

Básicamente, este desacoplamiento ignora las fluctuaciones de S_g^z , reemplazando este operador por su valor promedio (15), (27)

$$\langle\langle S_g^z S_f^+; B \rangle\rangle \xrightarrow{f \neq g} \langle S_z \rangle \langle\langle S_f^+; B \rangle\rangle \quad (3.1)$$

En esta aproximación el movimiento transversal del spin en el sitio f no tiene ninguna correlación con el movimiento longitudinal del spin en el sitio g . Esto es razonable en la medida de lo diferente que sean f y g . En el caso especial

$f = g$ esta aproximación es menos válida ya que no se pueden separar ambos movimientos, por el contrario, están íntimamente relacionados.

3.2. Desacoplamiento de Callen

Este es el desacoplamiento usado en el presente trabajo. Su formulación se debe a H.B. Callen (14). Las ideas fundamentales de esta aproximación se exponen a continuación.

3.2.1 Spin $1/2$

En el caso de que el valor del spin sea $1/2$, el operador S_g^z puede escribirse como:

$$S_g^z = \frac{1}{2} (S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+) \quad (3.2)$$

o bien como:

$$S_g^z = S - S_g^- S_g^+ \quad (3.3)$$

Si se multiplica la ec. (3.2) por un parámetro arbitrario ϵ y la ec. (3.3) por $(1-\epsilon)$ y sumamos se obtiene:

$$S_g^z = \epsilon S + \frac{1}{2} (1-\epsilon) S_g^+ S_g^- - \frac{1}{2} (1+\epsilon) S_g^- S_g^+ \quad (3.4)$$

La función de Green que se quiere desacoplar es:

$$\langle\langle S_g^z S_f^+ ; B \rangle\rangle$$

Si introducimos la ec. (3.4) para S_g^z se obtienen las siguientes funciones

$$\langle\langle S_g^- S_g^+ S_f^+ ; B \rangle\rangle ; \quad \langle\langle S_g^+ S_g^- S_f^+ ; B \rangle\rangle$$

Estas funciones pueden ser razonablemente desacopladas en la siguiente forma simétrica

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^- S_g^+ S_f^+ ; B \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq f} \langle S_g^- S_g^+ \rangle \langle\langle S_f^+ ; B \rangle\rangle + \\ \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B \rangle\rangle + \langle S_g^+ S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^- ; B \rangle\rangle \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^+ S_g^- S_f^+ ; B \rangle\rangle \xrightarrow{g \neq f} \langle S_g^+ S_f^- \rangle \langle\langle S_f^+ ; B \rangle\rangle + \\ \langle S_g^+ S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^- ; B \rangle\rangle + \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B \rangle\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

$\langle S_g^+ S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^- ; B \rangle\rangle = 0$ porque el operador $S_g^+ S_f^+$ no es diagonal en la componente \hat{z} total del spin.

Ocupando las ecs. (3.5) y (3.6) y las igualdades (3.2) y (3.3) se obtiene finalmente

$$\langle\langle S_g^z S_f^+ ; B \rangle\rangle = \langle S_g^z \rangle \langle\langle S_f^+ ; B \rangle\rangle - \epsilon \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+ ; B \rangle\rangle \quad (3.7)$$

Si $\epsilon = 1$ el resultado corresponde a desacoplar de acuerdo a la identidad (3.3); $\epsilon = 0$ corresponde a desacoplar según (3.2); $\epsilon = -1$ corresponde a desacoplar según la identidad $S_g^z = -S + S_g^+ S_g^-$

De acuerdo a esto puede hacerse una corrección al desacoplamiento con RPA que dependerá de la elección de ϵ . Para

esto se utiliza un criterio físico.

El operador $S^- S^+$ representa en la ec. (3.3) la desviación de S^z con respecto a $+S$. Es el operador $S^- S^+$ el que se trata aproximadamente cuando el desacoplamiento se hace tomando la ec. (3.3). Por lo tanto, parece razonable usar la ec. (3.3) cuando la desviación desde $S_z = S$ es pequeña; esto es, cuando $\langle S_z \rangle \approx S$. Claramente esta condición se satisface para bajas temperaturas, donde las desviaciones del estado fundamental, con todos los spines alineados, son pequeñas (ondas de spin).

Similarmente, el operador $\frac{1}{2}(S^+ S^- - S^- S^+)$ en la ec. (3.2) representa la desviación de S^z con respecto a cero, luego es razonable usar la ec. (3.2) como base del desacoplamiento cuando $\langle S_z \rangle \approx 0$. Esto último ocurre en la región de altas temperaturas, en la vecindad de temperaturas críticas, donde los campos efectivos, que son proporcionales a la magnetización, tienden a anularse.

Las condiciones anteriores se cumplen con la elección

$$E = \frac{\langle S_z \rangle}{S} \quad (S = 1/2) \quad (3.8)$$

Con lo cual ec. (3.4) queda como:

$$S_g^z = \langle S_z \rangle + \left[\frac{S - \langle S_z \rangle}{2S} S_g^+ S_g^- - \frac{S + \langle S_z \rangle}{2S} S_g^- S_g^+ \right] \quad (3.9)$$

El operador entre paréntesis, que será desacoplado, representa la desviación de S^z con respecto a $\langle S^z \rangle$ y debe ser autoconsistentemente pequeño en todas las regiones de temperatura.

Reemplazando (3.8) en (3.7) se obtiene el desacoplamiento para spin $1/2$.

$$\langle\langle S_g^z S_f^+; B \rangle\rangle_{g \neq f} \longrightarrow \langle S_z \rangle \langle\langle S_f^+; B \rangle\rangle - \langle S_z \rangle \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+; B \rangle\rangle \quad (3.10)$$

3.2.2 Spin $> 1/2$

Se considera la ec. análoga a la ec. (3.3)

$$S_g^z = S(S+1) - (S_g^z)^2 - S_g^- S_g^+ \quad (3.11)$$

la ec. (3.2) sigue siendo válida.

Desacoplando como antes y despreciando las fluctuaciones de $(S_g^z)^2$, es decir, considerando que:

$$\langle\langle (S_g^z)^2 S_f^+; B \rangle\rangle \longrightarrow \langle (S_g^z)^2 \rangle \langle\langle S_f^+; B \rangle\rangle \quad (3.12)$$

se obtiene:

$$\langle\langle S_g^z S_f^+; B \rangle\rangle_{g \neq f} \longrightarrow \langle S_z \rangle \langle\langle S_f^+; B \rangle\rangle - \epsilon \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+; B \rangle\rangle \quad (3.13)$$

Sin embargo, ya no es posible, como en el caso $S = 1/2$, interpretar en la ecuación (3.11) el operador $S^- S^+$ como la desviación de S^z respecto a $+S$, por lo cual la elección de ϵ no es tan evidente como en el caso anterior. Para determinar ϵ se imponen las siguientes condiciones:

i) Para $S = 1/2$, ϵ debe reducirse a $\langle S_z \rangle / S$

ii) Para $\langle S_z \rangle = 0$, ϵ debe anularse. Este requisito se desprende del hecho de que la identidad (3.2) sigue siendo válida para un S arbitrario.

iii) Para $\langle S_z \rangle \approx S$ se espera que S^z tenga la forma $S^z \approx S - \eta$ donde η es una desviación del spin respecto a la dirección z .

El requisito iii) implica que $\epsilon \langle S_g^- S_f^+ \rangle$ debería ser del orden de la unidad, más que en orden de S , a bajas temperaturas. Por otra parte $(1/2S) \langle S_g^- S_g^+ \rangle$ es la desviación de spin en el orden más bajo; similarmente $\langle S_g^- S_f^+ \rangle$ será del orden $2S$ si f y g están acoplados en sitios muy cercanos. En consecuencia se toma:

$$\epsilon = \left(\frac{1}{2S} \right) \frac{\langle S_z \rangle}{S} \quad (3.14)$$

La ec. (3.13) junto con la ec. (3.14) constituyen la aproximación formulada por Callen para spin arbitrario.

3.3 Desacoplamiento de Anderson y Callen

El término con el parámetro de anisotropía, $-\sum_g D (S_g^z)^2$ conduce al siguiente término en la ecuación de movimiento en la función de Green.

$$D \langle\langle S_g^+ S_g^z + S_g^z S_g^+; S_n^- \rangle\rangle$$

Anderson y Callen (9) adoptaron un desacoplamiento para este término análogo al formulado por Callen en el estudio de un ferromagneto de Heisengerg con término bilineal solamente. Por consiguiente, la función de Green del término con anisotropía queda como:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_g^+ S_g^z + S_g^z S_g^+; S_n^- \rangle\rangle \longrightarrow & \left[2 \langle S_g^z \rangle - \epsilon \langle S_g^z \rangle \langle S_g^+ S_g^- \rangle \right. \\ & \left. + \langle S_g^- S_g^+ \rangle \right] \langle\langle S_g^+; S_n^- \rangle\rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

CAPITULO IV

4. SOLUCION DEL HAMILTONIANO

4.1 Energía de los Magnones y Solución autoconsistente

El hamiltoniano de nuestro sistema es

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{i < j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 2\alpha J \sum_{i < j} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 - \sum_i D S_{iz}^2 \quad (4.1)$$

Consideremos la función de Green:

$$G_{gh} = \langle\langle S_g^+; S_h^- \rangle\rangle \quad (4.2)$$

La ecuación de movimiento es entonces:

$$E \langle\langle S_g^+; S_h^- \rangle\rangle = \frac{\langle [S_g^+, S_h^-] \rangle}{2\pi} + \langle\langle [S_g^+, \mathcal{H}]; S_h^- \rangle\rangle \quad (4.3)$$

Efectuando el conmutador de S_g^+ con \mathcal{H} se obtiene:

$$\begin{aligned} E \langle\langle S_g^+; S_h^- \rangle\rangle &= \langle [S_g^+, S_h^-] \rangle - 2J \sum_f \langle\langle (S_g^z S_f^+ - S_g^+ S_f^z); S_h^- \rangle\rangle \\ &- 2\alpha J \sum_f \langle\langle [(S_g^z)^2 (S_f^z S_f^+ + S_f^+ S_f^z) - (S_f^z)^2 (S_g^z S_f^+ + S_g^+ S_f^z)] \rangle\rangle \\ &+ \frac{1}{2} (S_g^z S_g^- + S_g^- S_g^z) S_f^+ S_f^+ - \frac{1}{2} (S_f^z S_f^- + S_f^- S_f^z) S_g^+ S_g^+ + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} (S_f^z S_g^- S_f^+ S_f^- + S_g^+ S_g^z S_f^- S_f^+) - \frac{1}{2} (S_f^z S_f^+ S_g^+ S_g^- + S_f^+ S_g^z S_g^- S_g^+) \Big] ; S_h^- \Big\rangle \\
& + \mathcal{D} \langle\langle S_f^+ S_g^z + S_g^z S_f^+ ; S_h^- \rangle\rangle
\end{aligned} \tag{4.4}$$

donde $f \neq g$

Para reducir las funciones de Green de orden mayor que aparecen en la parte bicuadrática de la ecuación de movimiento se ignoran las correlaciones inter - spin (RPA) y se obtienen funciones de Green de tres spines:

$$\langle\langle (S_f^z)^2 S_g^z S_g^+ ; S_h^- \rangle\rangle = \langle (S_f^z)^2 \rangle \langle\langle S_g^z S_g^+ ; S_h^- \rangle\rangle \tag{4.5a}$$

$$\langle\langle S_g^z S_g^+ S_f^+ S_f^- ; S_h^- \rangle\rangle = \langle S_f^+ S_f^- \rangle \langle\langle S_g^z S_g^+ ; S_h^- \rangle\rangle \tag{4.5b}$$

$$\langle\langle S_g^z S_g^- S_f^+ S_f^+ ; S_h^- \rangle\rangle = \langle S_f^+ S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^z S_g^- ; S_h^- \rangle\rangle \tag{4.5c}$$

donde $\langle S_f^+ S_f^+ \rangle = 0$ como se mencionó anteriormente

Utilizando ahora el desacoplamiento de Callen para las funciones de Green correspondientes al término bilineal y el desacoplamiento de Anderson y Callen, junto con el RPA de las ecs. (4.5), para las funciones de Green generadas por el término bicuadrático y de anisotropía se obtiene:

$$\begin{aligned}
E G_{gh} &= \langle [S_g^+, S_h^-] \rangle - 2 \langle S_z \rangle \sum_f J_{gf} [G_{fh} - G_{gh}] \\
&+ \langle S_z \rangle \sum_f J_{gf} [\langle S_g^- S_f^+ \rangle G_{gh} - \langle S_f^- S_g^+ \rangle G_{fh}] \\
&- 4\alpha J_{gf} \langle S_z \rangle \sum_f [\langle (S_g^z)^2 \rangle G_{fh} - \langle (S_f^z)^2 \rangle G_{gh}] \\
&+ \alpha J_{gf} \langle S_z \rangle \sum_f [\langle (S_g^z)^2 \rangle (\langle S_f^+ S_f^- \rangle + \langle S_f^- S_f^+ \rangle) G_{gh} \\
&- \langle (S_f^z)^2 \rangle (\langle S_g^+ S_g^- \rangle + \langle S_g^- S_g^+ \rangle) G_{gh}] \\
&- \alpha J_{gf} \langle S_z \rangle \sum_f \{ (\langle S_f^+ S_f^- \rangle + \langle S_f^- S_f^+ \rangle) G_{gh} \\
&- (\langle S_g^+ S_g^- \rangle + \langle S_g^- S_g^+ \rangle) G_{gh} \} + D \langle S_z \rangle \langle (S_g^z)^2 \rangle G_{gh}
\end{aligned}
\tag{4.6}$$

En la obtención de esta última expresión se utilizó la condición de equivalencia de los sitios de la red:

$$\langle S_g^z \rangle = \langle S_f^z \rangle = \langle S_z \rangle
\tag{4.7}$$

Además, las funciones de Green del tipo $\langle\langle S_f^+ S_f^z ; S_h^- \rangle\rangle$ fueron desacopladas según RPA. Para obtener el término que multiplica el parámetro de anisotropía se ocuparon las siguientes igualdades válidas para S mayores que $1/2$.

$$\langle S_g^- S_g^+ \rangle = S(S+1) - \langle (S_g^z)^2 \rangle - \langle S_g^z \rangle \quad (4.8a)$$

$$\langle S_g^+ S_g^- \rangle = S(S+1) - \langle (S_g^z)^2 \rangle - \langle S_g^z \rangle \quad (4.8b)$$

La invariancia traslacional permite la transformada espacial de Fourier de los términos que aparecen en la ecuación de movimiento

$$G(\vec{k}) = \sum_{g-h} e^{-i(\vec{g}-\vec{h}) \cdot \vec{k}} G_{gh} \quad (4.9)$$

$$J(\vec{k}) = \sum_{g-l} e^{-i(\vec{g}-\vec{l}) \cdot \vec{k}} J_{gl} \quad (4.10)$$

por definición:

$$J(0) = \sum_f J(g-f) = \sum_f J_{gf} \quad (4.11)$$

$$\Psi(\vec{k}) = \sum_{g-h} \langle S_h^- S_g^+ \rangle e^{-i(\vec{g}-\vec{h}) \cdot \vec{k}} \quad (4.12)$$

Aquí $\vec{g} \cdot \vec{k}$ denota el producto de los vectores $\vec{R}_g \cdot \vec{k}$

donde \vec{R}_g es el vector posición en el sitio g . Reemplazando en la ec. de movimiento se obtiene

$$\begin{aligned}
 E G(\vec{k}) = & \frac{2 \langle S_z \rangle}{2\pi} + 2 \langle S_z \rangle [J(0) - J(\vec{k})] G(\vec{k}) + \\
 & 2 \langle S_z \rangle [J(0) - J(\vec{k})] f G(\vec{k}) + 4\alpha \langle (S_z^2) \rangle [J(0) - J(\vec{k})] \langle S_z \rangle G(\vec{k}) \\
 & - 2\alpha [J(0) - J(\vec{k})] \langle S_z \rangle f G(\vec{k}) + J \langle S_z \rangle \langle S_z^2 \rangle G(\vec{k})
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

En la ec. (4.13) se ha supuesto la simplificación de tomar solo la interacción a vecinos más cercanos, por consiguiente, $J(\vec{k})$ toma la forma:

$$J(\vec{k}) = J \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \tag{4.14}$$

donde $\vec{\delta}$ recorre los vecinos más cercanos de un ión representativo; se supone que todos los iones magnéticos son cristalográficamente equivalentes. En este caso $J(0)$, la componente de Fourier correspondiente a $\vec{k}=0$ de la interacción de intercambio, es igual a $\vec{z} \cdot \vec{J}$, donde \vec{z} es el número de vecinos más cercanos. La función f está definida por

$$f = \frac{1}{NJ(0)} \sum_{\vec{k}} J(\vec{k}) \phi(\vec{k}) \tag{4.15}$$

donde

$$\phi(\vec{k}) = \left[\exp \{ E(\vec{k}) / kT \} - 1 \right]^{-1} \tag{4.16}$$

f es, por lo tanto, una función de la temperatura, $\langle S_z \rangle$, de J y la estructura de la red.

Despejando $G(k)$ de la ec.(4.13) se obtiene:

$$G(k) = \frac{2 \cdot \langle S_z \rangle}{2\pi [E - E(k)]} \quad (4.17)$$

donde

$$E(k) = 2 \langle S_z \rangle [J(0) - J(k)] [1 + \langle S_z \rangle (1 - \alpha)] + 2 \langle S_z^2 \rangle \alpha + J \langle S_z \rangle \langle S_z^2 \rangle \quad (4.18)$$

es la energía de los magnones.

Nuestro problema es encontrar la magnetización $\langle S_z \rangle$ en función de la temperatura y de los parámetros α y J . Tanto $\langle S_z \rangle$ como $\langle S_z^2 \rangle$ pueden expresarse como función de $\bar{\Phi}$, donde

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{N} \sum_k \phi(k) \quad (4.19)$$

Las expresiones que los relacionan son, (15) :

$$\langle S_z \rangle = 1 + 2\bar{\Phi} / 1 + 3\bar{\Phi} + 3\bar{\Phi}^2 \quad (4.20)$$

$$\langle S_z^2 \rangle = 2 \langle S_z \rangle \bar{\Phi} - \langle S_z \rangle + 2 \quad (4.21)$$

pero puesto que $\bar{\Phi} = \frac{1}{N} \sum_k \left(\exp E(k)/kT - 1 \right)^{-1}$ y $E(k)$ es función de $\langle S_z \rangle$, $\langle S_z^2 \rangle$ y f es claro entonces que $\bar{\Phi}$ puede escribirse como:

$$\bar{\Phi} = g(\bar{\Phi}, f) \quad (4.22)$$

y, similarmente, f como:

$$f = h(\bar{\Phi}, f) \quad (4.23)$$

donde g y h son funciones que pueden encontrarse reemplazando en las expresiones para $\bar{\Phi}$ y f , $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_z^2 \rangle$ por las ecs. (4.20) y (4.21).

Este sistema de ecuaciones autoconsistente puede resolverse numéricamente y encontrar $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_z^2 \rangle$ en función de la temperatura del sistema y de los parámetros α y D .

4.2 Método de Flax y Raich

L. Flax y J. Raich desarrollaron un método que permite evaluar sumas generalizadas de Watson que aparecen en magnetismo y otros fenómenos cooperativos

Las sumas tienen la forma

$$\bar{\Phi}(\mu, \eta) = \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \exp \left[\mu \left(1 - \eta \frac{J(k)}{J(0)} \right) \right] - 1 \right\}^{-1} \quad (4.24)$$

y se efectúan sobre todos los vectores de la red recíproca en la primera zona de Brillouin. μ y η son parámetros. El método se limita a:

$$0 \leq \mu \leq \infty \quad ; \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (4.25)$$

La forma en que comúnmente se calculaba Φ era a través de expansiones en serie, válidas sobre regiones limitadas de temperatura. Con el presente método se encuentran expresiones analíticas para $\Phi(\mu, \eta)$. En la ref. (17) se calculan las expresiones para sumas como las que ocurren en la función f . Aplicaremos este método a las expresiones obtenidas en este trabajo. El argumento de la exponencial en la suma $\Phi(\mu, \eta)$ es la energía de los magnones dividida por kT .

En nuestro caso puede escribirse como:

$$\frac{E(k)}{kT} = \frac{2 \langle S_z \rangle J(0)}{kT} \left[\left[1 - \frac{J(k)}{J(0)} \right] \left\{ 1 + \langle S_z \rangle (1-\alpha) f + 2 \langle S_z^2 \rangle \alpha \right\} + \mathbb{D} \langle S_z^2 \rangle / 2 J(0) \right] \quad (4.26)$$

si definimos:

$$\mathbb{F} =: 1 + \langle S_z \rangle (1-\alpha) f + 2 \langle S_z^2 \rangle \alpha \quad (4.27)$$

$$\mathbb{D} = \mathbb{D} \langle S_z \rangle / 2 J(0) \quad (4.28)$$

$$Q = \frac{\langle S_z \rangle J(0)}{kT} =: \frac{\langle S_z \rangle}{t} \quad (4.29)$$

se obtiene que:

$$\frac{E(k)}{kT} = 2Q \left[(F + \mathbb{D}) - F \frac{J(k)}{J(0)} \right] \quad (4.30)$$

Definiendo dos nuevas variables, ξ y g , dadas por

$$\xi = F + \mathbb{D} \quad (4.31)$$

$$g = \frac{F}{F + \mathbb{D}} \quad (4.32)$$

el método de Flax y Raich entrega las siguientes expresiones para Φ y f .

$$\Phi = (2Q\xi)^{-1} \left[\left[\frac{2K(k)}{\pi} \right]^2 + Q\xi \coth Q\xi - 1 + \frac{1}{8} g^2 Q^3 \xi^3 (\operatorname{csch}^2 Q\xi) \cdot \right. \\ \left. \coth Q\xi - \frac{1}{8} g^2 \right] \quad (4.33)$$

$$f = (2Q\xi g)^{-1} \left\{ \left[\frac{2K(k)}{\pi} \right]^2 - 1 \right\} + g (16Q\xi)^{-1} (Q^2 \xi^2 \operatorname{csch}^2 Q\xi - 1) \quad (4.34)$$

donde $K(k)$ es la integral elíptica completa de primer tipo,

$$k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - (1 - g^2)^{1/2} \right] \quad (4.35)$$

4.3. Cálculo de Temperaturas Críticas.

Para encontrar las temperaturas críticas es necesario evaluar los límites:

$$\lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} f \cdot \langle S_z \rangle \quad ; \quad \lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} \Phi \cdot \langle S_z \rangle \quad (4.36)$$

Evaluando estos límites y sabiendo que $\Phi \cdot \langle S_z \rangle = 2/3$ cuando $\langle S_z \rangle \rightarrow 0$ se obtiene:

$$\frac{2}{3} = \frac{t_c}{2\xi} \left[\left(\frac{2K(k)}{\pi} \right)^2 \right] \quad (4.37)$$

$$\lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} f \cdot \langle S_z \rangle = \frac{t_c}{2\xi g} \left[\left(\frac{2K(k)}{\pi} \right)^2 - 1 \right] \quad (4.38)$$

Cuando $\langle S_z \rangle \rightarrow 0$, $\langle S_z^2 \rangle = \frac{2}{3}$, por consiguiente:

$$\lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} \xi = \left(1 + \frac{4}{3}\alpha \right) + \left[\lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} f \cdot \langle S_z \rangle \right] (1 - \alpha) \quad (4.39)$$

sea $\chi = \lim_{\langle S_z \rangle \rightarrow 0} f \cdot \langle S_z \rangle$ y $u = \left[\frac{2K(k)}{\pi} \right]^2$ Dividiendo (4.38) por (4.37) y considerando $\mathcal{J} = 0$, i.e., $g = 1$ se obtiene que

$$\chi = \frac{2}{3} \left(\frac{u-1}{u} \right) \quad (4.40)$$

y reemplazando en (4.37) se encuentra la expresión para la temperatura crítica en función de α , el parámetro bicuadrático.

$$\frac{kT}{J} = 4z \left[\frac{2}{9} \left(\frac{u-1}{u^2} \right) + \frac{1}{3u} + \alpha \left[\frac{1}{3} \left\{ \frac{4}{3u} - \frac{2}{3} \left(\frac{u-1}{u^2} \right) \right\} \right] \right] \quad (4.41)$$

$$= 4z \left[0.2842 + \alpha \cdot 0.2740 \right] \quad (4.42)$$

Esta expresión coincide con la calculada en el apéndice A sin ocupar el método de Flax y Raich.

Si $\mathcal{D} \neq 0$ entonces $g < 1$; la ecuación para χ es

$$\frac{3}{2} \chi = \frac{u-1}{ug} \quad (4.43)$$

La ecuación (4.43) es una ecuación autoconsistente en χ ; se resolvió numéricamente.

CAPITULO V

5. RESULTADOS

5.1 Temperaturas Críticas

5.1.1 Caso $D = 0$

Expondremos en primer lugar los resultados obtenidos considerando nula la anisotropía uniaxial. El gráfico N°1 se señala la dependencia lineal de la temperatura crítica del sistema con el parámetro bicuadrático α . Un aumento de la interacción bicuadrática conduce a un aumento de la temperatura crítica. Este resultado se discutirá más adelante. Si $\alpha = 0$ la temperatura crítica es:

$$KT_c/J = 9.096$$

Este valor coincide, naturalmente, dentro del error numérico, con el valor obtenido por Callen (14): $KT_c/J = 9.1$, sin considerar interacción bicuadrática.

5.1.2 Caso $D \neq 0$

Para el cálculo de las temperaturas críticas cuando se incluía la anisotropía se utilizó la ec. (4.43), la cual se

resolvió numéricamente con el programa computacional del apéndice B.

En el gráfico N°2 se muestra la dependencia de las temperaturas críticas en función de α para diferentes valores de D . La dependencia continua siendo lineal en α y el parámetro de anisotropía tiene el efecto de aumentar la pendiente de las curvas, es decir, a mayor D , el efecto de interacción bicuadrática es mayor.

La dependencia de las temperaturas críticas con D se presenta en el gráfico N°3. Para D pequeño las temperaturas críticas del sistema son bastante sensibles a la variación de D , sin embargo, a medida que D toma valores muy grandes la temperatura crítica tiende a un valor límite.

Para apreciar en mejor forma la variación de la temperatura crítica cuando D no es muy grande se graficó (N°4) $T_c(D)/T_c(0)$ en función de D , donde $T_c(D)$ es la temperatura crítica del sistema en función de D y $T_c(0)$ la temperatura crítica en $D=0$.

De acuerdo a los resultados anteriores, la temperatura crítica reducida $T_c(D)/T_c(0)$ es mayor a medida que D aumenta. Las curvas correspondientes a $\alpha=1.0$ y $\alpha=0.5$ están muy próximas, es decir, la temperatura reducida varía levemente para α mayores que 0.5. Esto significa que porcentualmente la relación entre la temperatura crítica para un D cualquiera y la temperatura crítica para $D=0$ es prácticamente constante para α cercanos a 1.

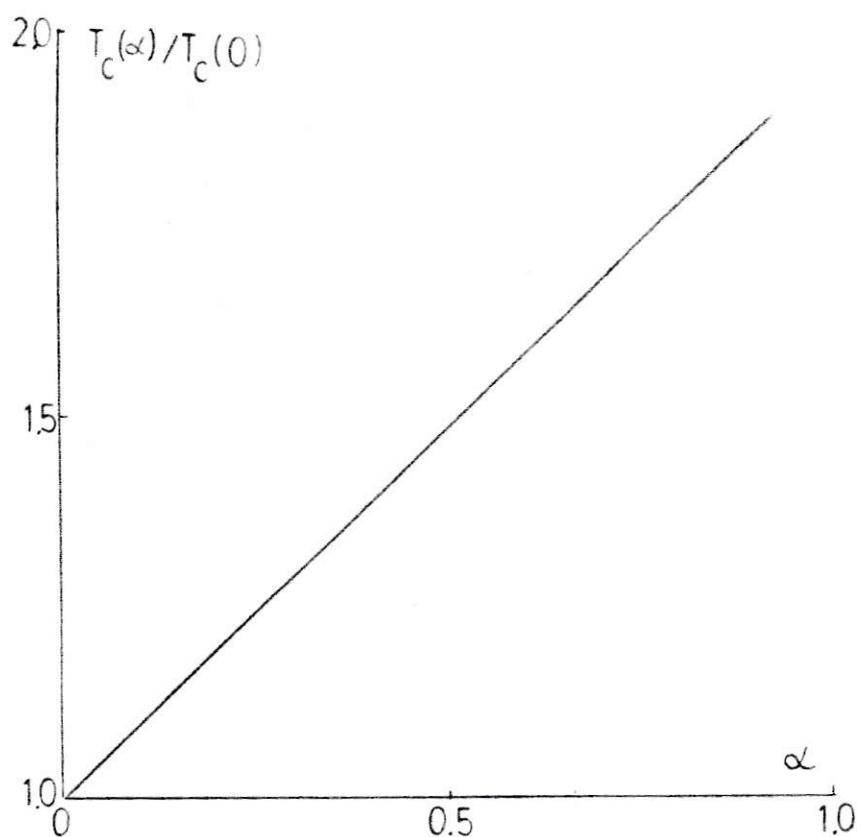


GRAFICO N°1

$T_c(\alpha)/T_c(0)$ v/s α . Ocupando desacoplamiento de Callen; $D = 0$,
 $z = 8$

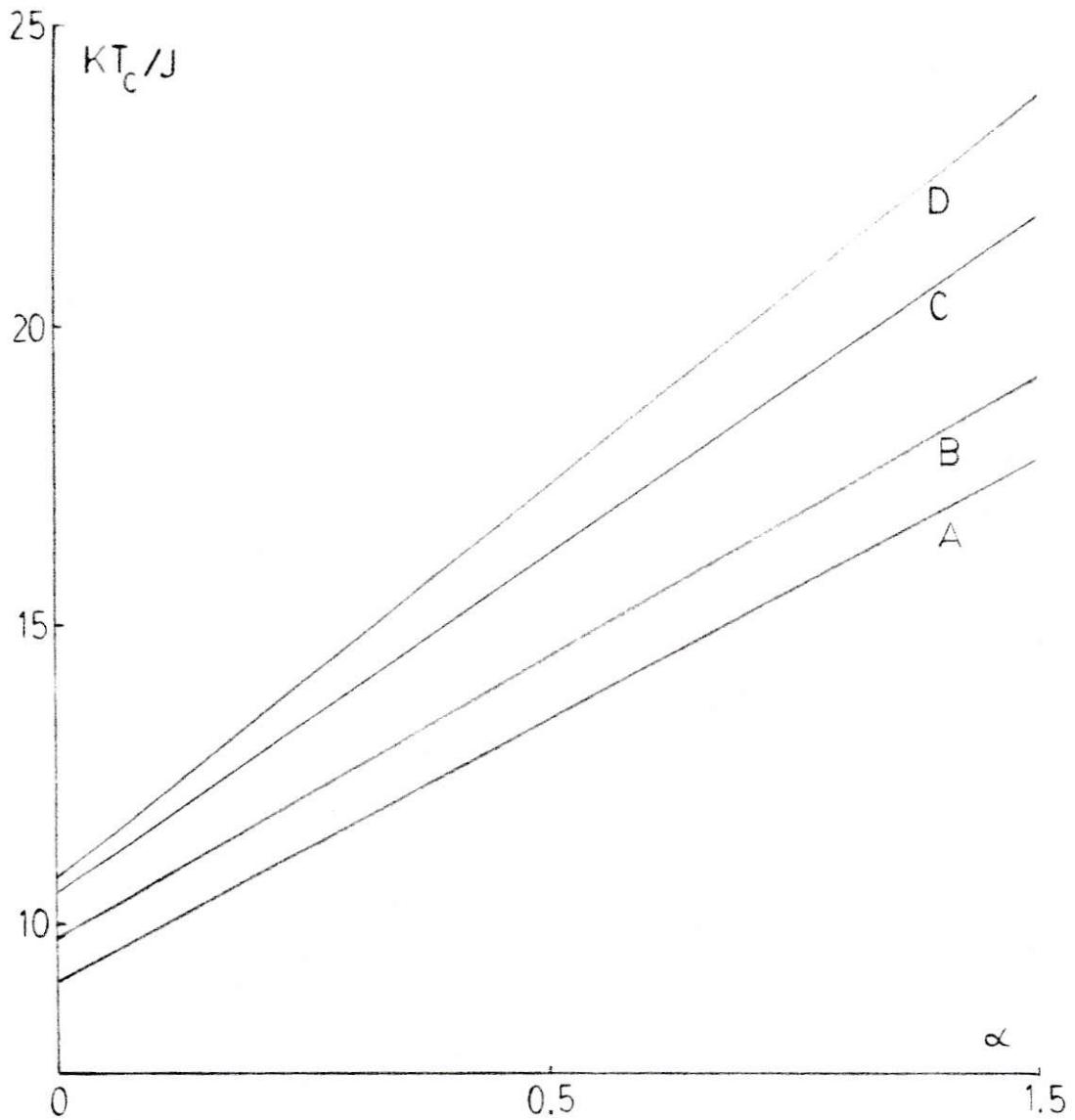


GRAFICO N°2

KT_c/J v/s α Ocupando el des-
 coplamiento de Callen;
 Curva A: $D = 0$
 Curva B: $D = 1.0$
 Curva C: $D = 10$
 Curva D: $D = 50$

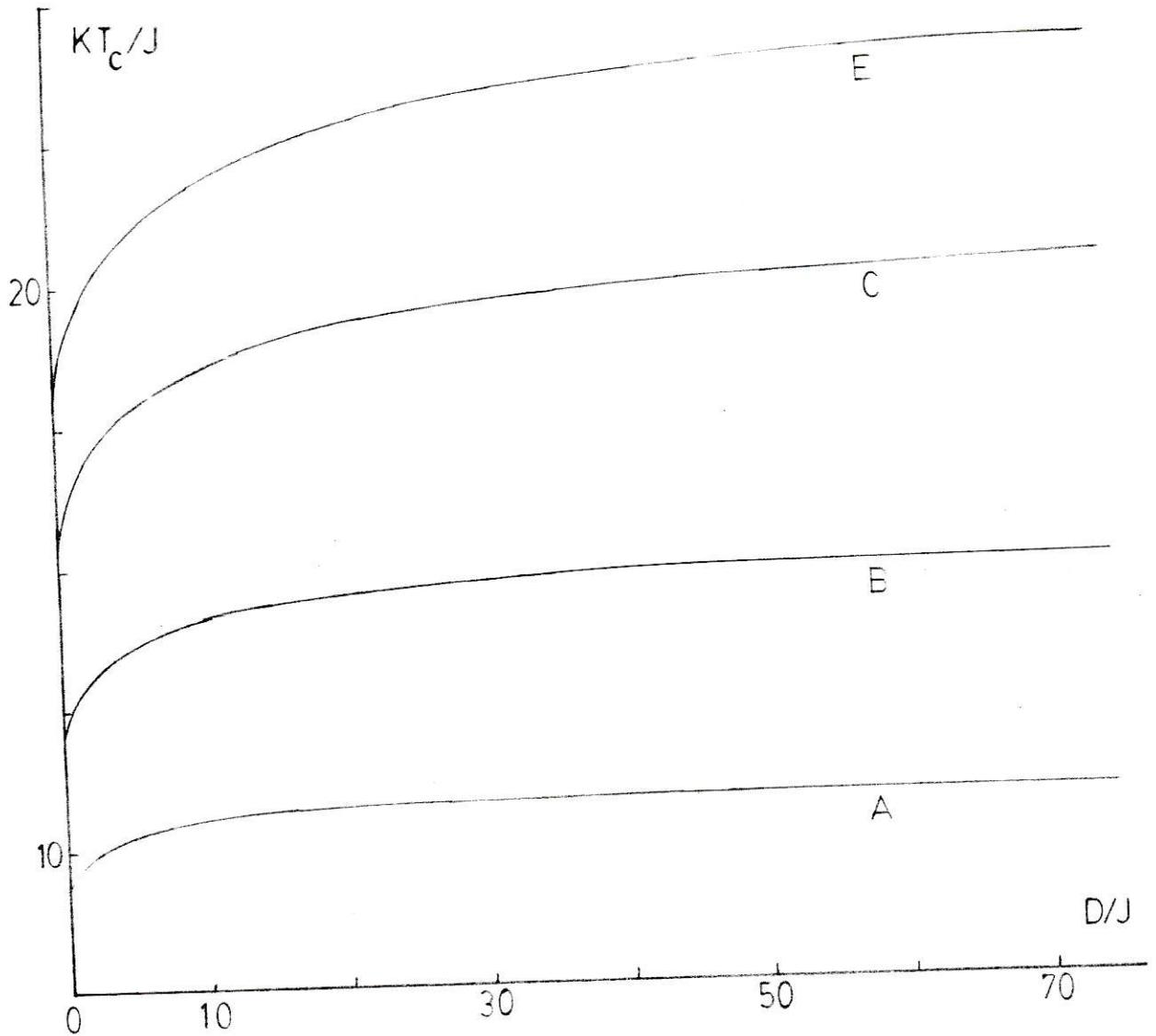


GRAFICO N°3

KT_c/J v/s D/J Ocupando el des-
 coplamiento de Callen; $Z=8$
 Curva A: $\alpha = 0$
 Curva B: $\alpha = 0.3$
 Curva C: $\alpha = 0.7$
 Curva E: $\alpha = 1.0$

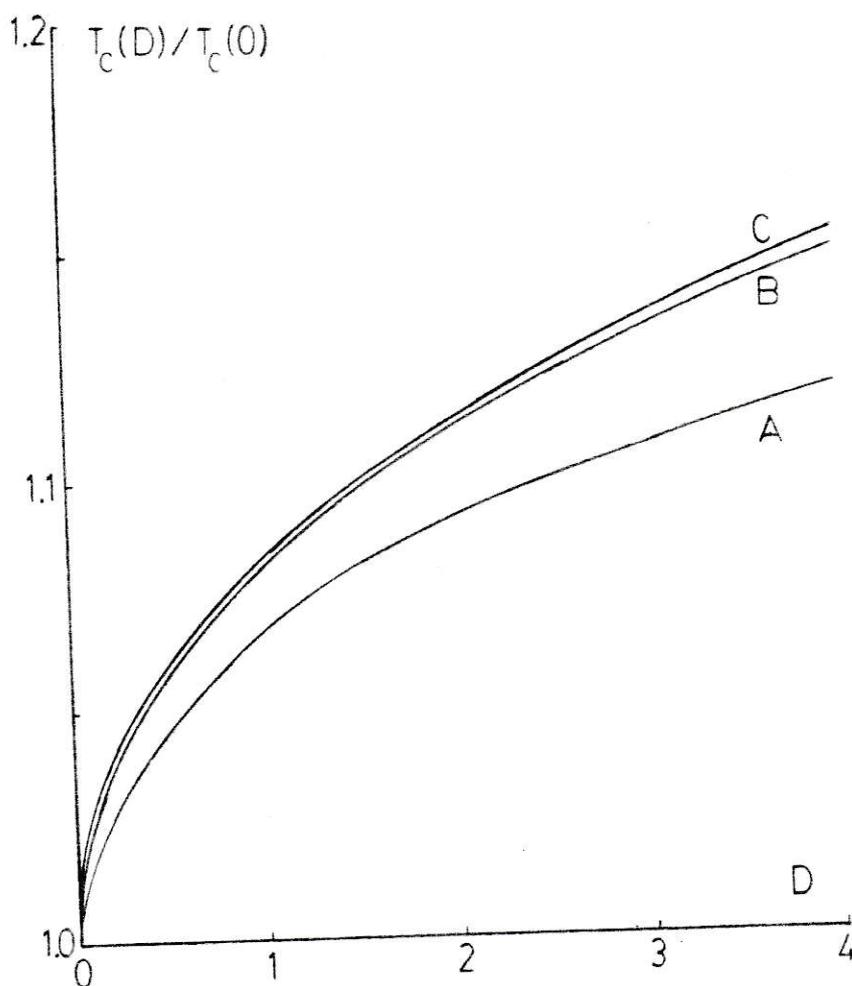


GRAFICO N°4

$T_c(D)/T_c(0)$ v/s Ocupando el des-
 coplamiento de Callen; $\bar{Z} = 8$
 Curva A: $\alpha = 0$
 Curva B: $\alpha = 0.5$
 Curva C: $\alpha = 1.0$

CAPITULO VI

6. DISCUSION Y CONCLUSIONES

En seguida analizaremos los resultados expuestos en el capítulo anterior y compararemos las curvas obtenidas con las de otros autores que han utilizado ya sea teorías de campo medio como teorías con funciones de Green.

6.1 Caso $D = 0$

En el caso en que $\alpha = D = 0$ la temperatura crítica coincide, dentro de un pequeño error numérico, con la obtenida por Callen (14). Este resultado es consistente con el desacoplamiento ocupado. En el gráfico N°5 se muestra la variación de la temperatura crítica del sistema en función del parámetro bicuadrático. La temperatura crítica obtenida por R. Ferrer y R. Pintanel (10) utilizando la aproximación de constante de acoplamiento (A.C.A.) cuando $\alpha = D = 0$ es $K T_c / J = 8.65$ valor ligeramente inferior al obtenido por Callen. Por otra parte, M. Tiwari y R. Srivastava (12) obtienen, consistentemente, el mismo valor que Callen cuando los parámetros α y D son nulos. Estos autores ocupan el desacoplamiento de Callen y suponen que el producto $\lambda \alpha \langle S_i^z \rangle$ es despreciable para todos los valores de α . La curva obtenida por ellos se aproxima bastante a la obtenida en ref. (10), apreciándose una diferencia mayor

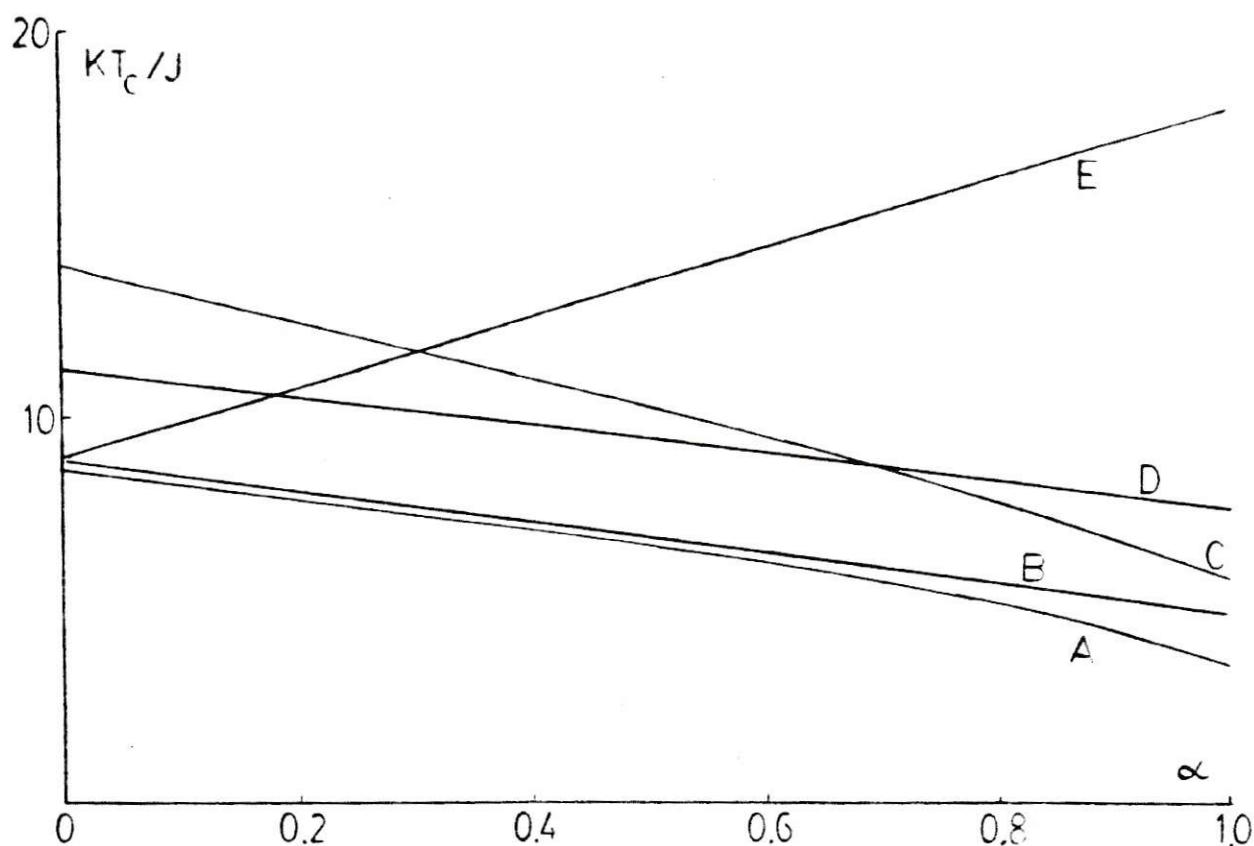


GRAFICO N°5

KT_c/J v/s α

Curva A: Resultado de R. Ferrer y R. Pintanel (10); $D = 0$, $z = 8$

Curva B: Resultados de M. Tiwari y R.N. Srivastava (12); $D = 0$, $z = 8$

Curva C: Resultados de R. Ferrer y R. Pintanel; $D = \infty$, $z = 8$

Curva D: Resultados de K.G. Chakraborty (13); $D = 0$, $z = 8$

Curva E: Desacoplamiento de Callen; $D = 0$, $z = 8$

en las temperaturas críticas conforme α se aproxima a la unidad.

Para $\alpha = 0$ Chakraborty obtiene que KT_c/J es igual a 11.26, valor superior a los obtenidos usando tanto funciones de Green con la aproximación de Callen, como constante de acoplamiento.

La diferencia más notable con los resultados obtenidos por otros autores radica en la dependencia de la temperatura crítica como función de α . Mientras el gráfico N°5 muestra que la temperatura crítica disminuye conforme aumenta α en los resultados de los otros trabajos en nuestro caso sucede a la inversa: la temperatura crítica aumenta conforme aumenta α . Este resultado es una consecuencia directa de no despreciar el término $2\alpha \langle S_z^2 \rangle$ tal como se hace en la referencia (12), sino que considerar que en la temperatura crítica se tiene simetría, de modo que $\langle S_z^2 \rangle$ debe valer $\frac{1}{3}S(S+1)$ y, por lo tanto $2\alpha \langle S_z^2 \rangle = \frac{4}{3}$, para $S=1$. La sola inclusión de este término es suficiente para cambiar el signo de la pendiente de las curvas de temperatura crítica en función de α .

Un comportamiento similar al de este trabajo, si bien es un rango más limitado del parámetro α , y para D diferente de cero, se muestra en la referencia (25). Esto aparece dibujado en el gráfico N°6.

6.2 Caso $D \neq 0$

Como ya se señaló en el capítulo anterior el efecto del parámetro de anisotropía sobre las curvas de temperatura

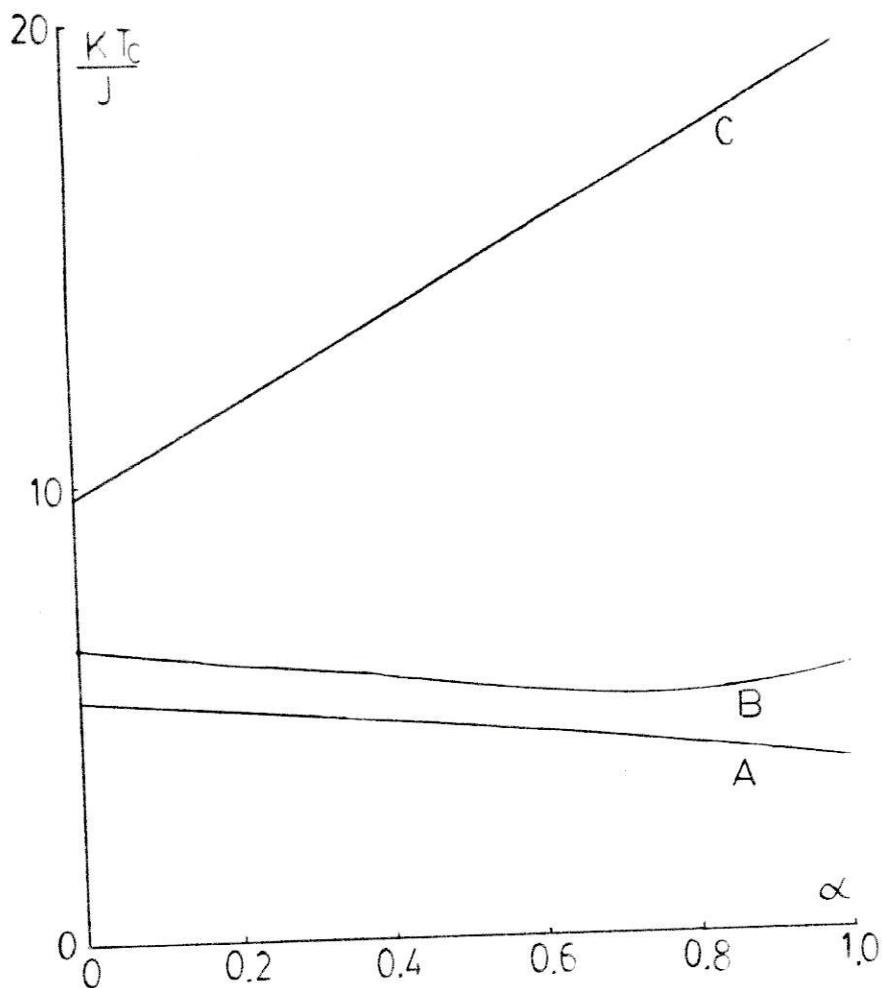


GRAFICO N°6

K_{T_c}/J v/s α

Curva A: Resultados de M. Tiwari
y R.N. Srivastava (25); $D=0, z=6$

Curva B: Resultados de M. Tiwari
y R.N. Srivastava (25); $D=1, z=6$

Curva C: Desacoplamiento de Callen;
 $D = 1, z = 8$

crítica en función de α es el de aumentar la pendiente (gráfico N°2) y, en consecuencia D contribuye a favorecer la tendencia de la temperatura crítica a aumentar si α aumenta. En la aproximación de constante de acoplamiento (10) (gráfico N°5) la situación es similar pero en sentido contrario. Para D muy grande las temperaturas críticas descienden más rápidamente conforme aumenta α .

La teoría expuesta en la referencia (25) utiliza funciones de Green empleando la técnica de Devlin (7) y Tanaka y Kondo (26) y desacoplando con un R.P.A. las funciones de orden superior. Los resultados obtenidos por este método muestran un cambio en la pendiente de la curva de la temperatura crítica en función del parámetro bicuadrático para $D = 1$ (el cálculo se efectuó considerando una red s.c). Cuando D vale cero el comportamiento de las temperaturas críticas es similar al de otros autores ya comentados.

Existe un buen argumento físico que explica el descenso de las temperaturas críticas del sistema conforme aumenta α . En términos estadísticos el término de interacción bicuadrática $\alpha(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$ favorece tanto los estados con spines paralelos como aquellos con spines antiparalelos, en consecuencia, a mayor α es decir, conforme α se aproxime a la unidad, la contribución de los pares son spines antiparalelos será mayor. Si se considera que el término de anisotropía tiende a favorecer tanto las alineaciones positivas como negativas de los spines puede entenderse el hecho de que el parámetro D tienda a reforzar el efecto de la interacción bicuadrática. Esto queda graficado en el cam-

bio de pendiente de las curvas de temperatura crítica T_c α conforme varía el valor D.

El comportamiento de las T_c encontrado en este trabajo es consecuencia del desacoplamiento ocupado y no es claro extraer en base a consideraciones de cierta simplicidad razones físicas que permitan una comprensión más directa del problema. Por esta razón, es adecuado seguir el camino inverso: extraer información sobre el significado físico de un desacoplamiento estudiando los resultados que él entrega.

De acuerdo a los valores encontrados, el desacoplamiento de Callen, en el contexto del presente trabajo, refuerza la contribución ferromagnética de la interacción bicuadrática, consiguiendo que el sistema posea temperaturas críticas más elevadas.

En el gráfico N°7 con $T_c(D)/T_c(0)$ v/s D se comparan nuestros resultados con los obtenidos por Ferrer y Pintanel utilizando la aproximación de constante de acoplamiento. Para $\alpha=0$ y con D menores que 2.6 las temperaturas críticas son mayores que las obtenidas por ellos. Sin embargo, para D mayores que 2.6 ocurre a la inversa. Para $\alpha=1$, los valores obtenidos son claramente menores que los de A.C.A., además de que la dependencia con D es considerablemente menor. Puede apreciarse claramente que existe una marcada diferencia en A.C.A. entre las curvas para $\alpha=1$ y $\alpha=0$. No ocurre así en nuestros resultados. Las curvas difieren mucho menos, incluso para D menores que 0.2 se superponen. Esto nos está indicando nuestra aproximación sub-estima el efecto de la interacción bicuadrática con

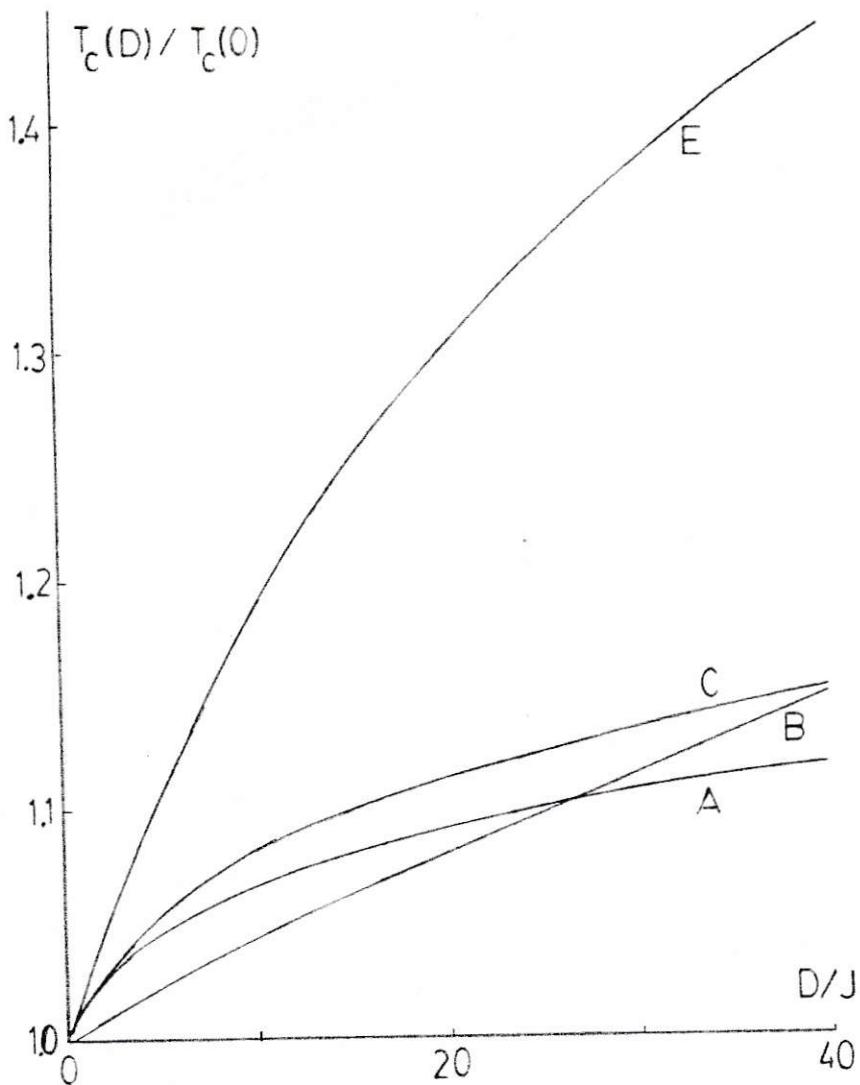


GRAFICO N°7

$T_c(D)/T_c(0)$ v/s D/J

Curva A: Desacoplamiento de Callen;
 $\alpha = 0, z = 8$

Curva B: Resultados de R. Ferrer y
 R. Pintanel (10); $\alpha = 0, z = 8$

Curva C: Desacoplamiento de Callen;
 $\alpha = 1.0, z = 8$

Curva E: Resultados de R. Ferrer y
 R. Pintanel (10); $\alpha = 1, z = 8$

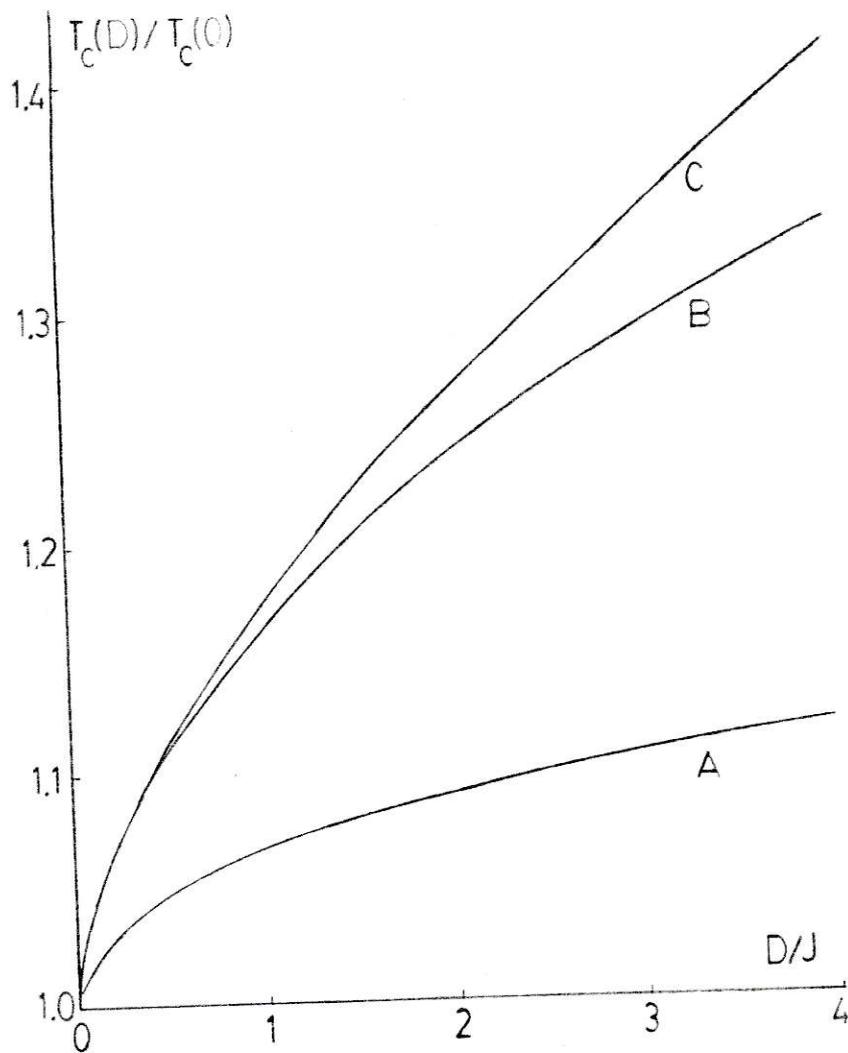


GRAFICO N°8

$T_c(D)/T_c(0)$ v/s D/J

Curva A: Desacoplamiento de Callen; $\alpha = 0, z=8$
 Curva B: Resultados de Devlin (7) $\alpha = 0, z=8$
 Curva C: Resultados de Anderson y Callen (9):
 $\alpha = 0, z = 8$

respecto a A.C.C.

Finalmente el gráfico N°9 presenta nuestros resultados junto a los de Anderson y Callen (9) y los de Devlin (7). La dependencia de $T_c(D)/T_c(0)$ con D es mucho menor que la de estos autores. Los resultados de Anderson y Callen sobreestiman la importancia de D y predicen, además que $T_c(D) \rightarrow \infty$ si $D \rightarrow \infty$, resultado que no es físico puesto que si $D \rightarrow \infty$ los estados de los spines serían $|S\rangle$ y $|-S\rangle$ y en este caso la temperatura crítica deberá seguir teniendo un valor finito, aunque mayor que si $D = 0$. Por su parte, Devlin supera la dificultad anterior y encuentra que la temperatura crítica se satura conforme D se hace muy grande. Este mismo comportamiento presentan nuestros resultados (ver gráfico N°3). Sin embargo, en el cálculo de temperaturas críticas hemos supuesto completa isotropía para todos los valores del parámetro D, es decir hemos tomado $\langle (S_y^z)^2 \rangle = \frac{1}{3} S(S+1)$ cuando el sistema se encuentra en la temperatura crítica. La aproximación de Anderson y Callen aplicada por ellos a un sistema antiferromagnético predice también que para $T = T_c$, $\langle (S_y^z)^2 \rangle = \frac{1}{3} S(S+1)$

APENDICE A

CALCULO DE LA TEMPERATURA CRITICA EN FUNCION DE α

Expandiendo $\langle S_z \rangle$ en potencias de Φ^{-1} se obtiene cuando $\langle S_z \rangle \rightarrow 0$

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{3} S(S+1) \Phi^{-1} + \mathcal{O}(\Phi^{-2}) \quad (\text{A.1})$$

para $S=1$

$$\langle S_z \rangle \cdot \Phi = 2/3 \quad (\text{A.2})$$

Por otra parte como $E(k) \propto \langle S_z \rangle$ entonces expandimos la exponencial en la expresión para Φ conservando solo términos de primer orden:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{E(k)}{kT} \right)^{-1} \quad (\text{A.3})$$

Reemplazando (A.3) en (A.2) y ocupando la expresión para $E(k)$ dada en la ec. (4.18) sin considerar el término de anisotropía se obtiene:

$$1 + f(1-\alpha) \langle S_z \rangle + 2\alpha \langle S_z^2 \rangle = \frac{3kT}{4J(0)} F(-1) \quad (\text{A.4})$$

donde:

$$F(-1) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{J(0)}{J(0) - J(k)} \quad (\text{A.5})$$

De modo semejante se obtiene una expresión para :

$$f(1-\alpha)\langle S_z \rangle = \frac{kT}{2J(0)} \left[1 + f(1-\alpha)\langle S_z \rangle + 2\alpha\langle S_z^2 \rangle \right] \left[F(-1) - 1 \right] (1-\alpha) \quad (\text{A.6})$$

En la región de temperatura crítica se cumple que:

$$\langle S_z^2 \rangle = \frac{1}{3} S(S+1) = \frac{2}{3} \quad (\text{A.7})$$

La ecuación (A.4) puede escribirse como:

$$f(1-\alpha)\langle S_z \rangle = \frac{3kT}{4J(0)} F(-1) - \frac{4}{3}\alpha - 1 \quad (\text{A.8})$$

Multiplicando (A.4) por (A.8) resulta:

$$\left[1 + f(1-\alpha)\langle S_z \rangle + \frac{4}{3}\alpha \right] \left[f(1-\alpha)\langle S_z \rangle \right] = \frac{3kT}{4J(0)} F(-1) \cdot \left[\frac{3kT}{4J(0)} F(-1) - \frac{4}{3}\alpha - 1 \right] \quad (\text{A.9})$$

La ecuación (A.6) la escribimos como:

$$\left[f(1-\alpha)\langle S_z \rangle \right] \left[1 + f(1-\alpha)\langle S_z \rangle + \frac{4}{3}\alpha \right] = \frac{kT}{2J(0)} \left[F(-1) - 1 \right] (1-\alpha) \quad (\text{A.10})$$

Igualando (A.9) con (A.10) se obtiene:

$$\left[\frac{3kT}{4J(0)} F(-1) \right] \left[\frac{3kT}{4J(0)} F(-1) - \frac{4}{3}\alpha - 1 \right] = \frac{kT}{2J(0)} \left[F(-1) - 1 \right] (1-\alpha) \quad (\text{A.11})$$

Despejando se obtiene la temperatura crítica:

$$\frac{kT_c}{J} = \frac{4z}{9F^2(-1)} \left[5F(-1) - 2 + 2\alpha \left[F(-1) + 1 \right] \right] \quad (\text{A.12})$$

Para una red b.c.c:

$$F(-1) = 1.39320 \quad (\text{A.13})$$

Reemplazando el valor dado en (A.13) en (A.12) se obtiene una ecuación lineal para la temperatura crítica en función de

$$\frac{kT_c}{J} = 4z [0.2843 + 0.2740 \cdot \alpha] \quad (\text{A.14})$$

ELIPTICO
HAMILTONIANO DE HEISENBERG ANISOTROPICO CON INTERCAMBIO
ELECTRATICO. RESOLUCION POR FUNCIONES DE GREEN SEGUN METODO
FLAX Y RAICH. ESTE PROGRAMA RESUELVE LA ECUACION ALTERNANTE
QUE PERMITE ENCONTRAR LAS TEMPERATURAS CRITICAS EN FUNCION DE
ALFA (EL PARAMETRO BICADRATICO) Y D (EL PARAMETRO DE ANISOTRO-
PIA). ESTA ECUACION SE ENCUENTRO TOMANDO EL LIMITE QUE ENTREGA EN
LAS FUNCIONES DEL METODO DE FLAX Y RAICH.
IMPLICIT REAL *8 (A-F,C-Z)
COMMON LJ,A,BETA
EK=0.00001

111 REAL (1,1,1,1) DJ,A1,AF,DELTA
55 FORMAT(3X,F5.1,14X,F5.2,12X,F5.2,7X,F4.2)

40 WRITE(3,46) DJ
40 WRITE(5,46) DJ
40 FORMATT(5X, DJ=,F5.1,)

15 S=0.0
S=S*1.
IF(S.LT.30.)GO TO 44
GO TO 105

88 F10=C.188153
F11=C.21
N=0

20 K=ELIP(F10)
AK=LAES(R)
IF(AR.LT.EK) GO TO 3C
P=ELIP(F11)
AP=LAES(P)

71 IF(AP.LT.EK) GO TO 3E
IF(P*K)/7C,71,71
F10=F10/1.2
F11=F11+0.2

IF(N.LT.25) GO TO 2C
GO TO 80

70 F12=((AR/AP)*F11+F10)/(1.+(AR/AF))
EF12=ELIP(F12)
IF(EF12) 60,3C,4C

60 F10=F12
GO TO 20
40 F11=F12
GO TO 20

ELI00010
ELI00011
ELI00012
ELI00013
ELI00014
ELI00015
ELI00016
ELI00017
ELI00018
ELI00019
ELI00020
ELI00021
ELI00022
ELI00023
ELI00024
ELI00025
ELI00026
ELI00027
ELI00028
ELI00029
ELI00030
ELI00031
ELI00032
ELI00033
ELI00034
ELI00035
ELI00036
ELI00037
ELI00038
ELI00039
ELI00040
ELI00041
ELI00042
ELI00043
ELI00044
ELI00045
ELI00046
ELI00047
ELI00048
ELI00049
ELI00050

```

11 WRITTE(5,11)F12,F11
   FURMAT(2X, F12=,F7.4,5X, F11=,F15.5)
   AUX=F12
   GO TO 100
80 WRITTE(3,21)A
   FURMAT(2X, A=,F6.2,5X, NC ENCLNTR A FI ',/)
21 GO TO 105
30 WRITTE(3,31)A,F10,F11
   FURMAT(2X, A=,F6.2,5X, F1=,F7.4,5X,F15.5)
31 AUX=F10
   GO TO 100
35 WRITTE(3,36)A,F11,F11
   FURMAT(2X, A=,F6.2,5X, F1=,F7.4,5X,F15.5)
36 FURMAT(2X, A=,F6.2,5X, F1=,F7.4,5X,F15.5)
   AUX=F11
   GO TO 100
100 TC=*(4./3.)*(AUX*(1.-A)+1.+(4./3.)*A)/BETA
   WRITTE(3,57)TC
   FURMAT(2X, TC=,F7.4,/)
57 FURMAT(2X, TC=,F7.4,/)
105 A=A+LELTA
   IF(AF-A) 25,15,15
25 STOP
   END

```

```

FUNCTION ELIP (FI)
IMPLICIT REAL *8 (A-H,C-Z)
COMMON L,A,BETA
PI=3.1415926

```

```

699 (UA=1.333333
   GE=(1.+FI*(1.-A)+CUA*A)/(1.+FI*(1.-A)+CUA*A+LJ/24.)
   WRITTE(5,699)GE
   FURMAT(2X, GE=,F5.3)
   XM=0.5*(1.-DSQR(1.-GE*GE))
   XM1=(1.-XM)
   XKM1=(1.333333+0.1115723)*M1+(0.0725296*XM1*XM1)
   XKM2=(10.5+0.1213478)*M1+0.0233125*XM1*XM1)*CLCG(1./XKM1)
   XKM=XKM1+XKM2
   WRITTE(5,698)XKM
   FURMAT(2X, XKM=,F10.3)
   EETA=(2.*XKM/PI)*((2.*XKM/PI)
   ELIP=F1-(2./3.)*((BETA-1.)/(GE*BETA))
788 WRITTE(5,788)ELIP
   FURMAT(2X, ELIP=,F15.13)
   RETURN
   END

```

```

EL1100776C
EL1100777C
EL1100778C
EL1100779C
EL1100780C
EL1100781C
EL1100782C
EL1100783C
EL1100784C
EL1100785C
EL1100786C
EL1100787C
EL1100788C
EL1100789C
EL1100790C
EL1100791C
EL1100792C
EL1100793C
EL1100794C
EL1100795C
EL1100796C
EL1100797C
EL1100798C
EL1100799C
EL1100800C
EL1100801C
EL1100802C
EL1100803C
EL1100804C
EL1100805C
EL1100806C
EL1100807C
EL1100808C
EL1100809C
EL1100810C
EL1100811C
EL1100812C
EL1100813C
EL1100814C
EL1100815C
EL1100816C
EL1100817C
EL1100818C
EL1100819C
EL1100820C
EL1100821C
EL1100822C
EL1100823C
EL1100824C
EL1100825C
EL1100826C
EL1100827C
EL1100828C
EL1100829C
EL1100830C
EL1100831C
EL1100832C
EL1100833C
EL1100834C
EL1100835C
EL1100836C
EL1100837C
EL1100838C
EL1100839C
EL1100840C
EL1100841C
EL1100842C
EL1100843C
EL1100844C
EL1100845C
EL1100846C
EL1100847C
EL1100848C
EL1100849C
EL1100850C
EL1100851C
EL1100852C
EL1100853C
EL1100854C
EL1100855C
EL1100856C
EL1100857C
EL1100858C
EL1100859C
EL1100860C
EL1100861C
EL1100862C
EL1100863C
EL1100864C
EL1100865C
EL1100866C
EL1100867C
EL1100868C
EL1100869C
EL1100870C
EL1100871C
EL1100872C
EL1100873C
EL1100874C
EL1100875C
EL1100876C
EL1100877C
EL1100878C
EL1100879C
EL1100880C
EL1100881C
EL1100882C
EL1100883C
EL1100884C
EL1100885C
EL1100886C
EL1100887C
EL1100888C
EL1100889C
EL1100890C
EL1100891C
EL1100892C
EL1100893C
EL1100894C
EL1100895C
EL1100896C
EL1100897C
EL1100898C
EL1100899C
EL1100900C
EL1100901C
EL1100902C
EL1100903C
EL1100904C
EL1100905C
EL1100906C
EL1100907C
EL1100908C
EL1100909C
EL1100910C
EL1100911C
EL1100912C
EL1100913C
EL1100914C
EL1100915C
EL1100916C
EL1100917C
EL1100918C
EL1100919C
EL1100920C
EL1100921C
EL1100922C
EL1100923C
EL1100924C
EL1100925C
EL1100926C
EL1100927C
EL1100928C
EL1100929C
EL1100930C
EL1100931C
EL1100932C
EL1100933C
EL1100934C
EL1100935C
EL1100936C
EL1100937C
EL1100938C
EL1100939C
EL1100940C
EL1100941C
EL1100942C
EL1100943C
EL1100944C
EL1100945C
EL1100946C
EL1100947C
EL1100948C
EL1100949C
EL1100950C
EL1100951C
EL1100952C
EL1100953C
EL1100954C
EL1100955C
EL1100956C
EL1100957C
EL1100958C
EL1100959C
EL1100960C
EL1100961C
EL1100962C
EL1100963C
EL1100964C
EL1100965C
EL1100966C
EL1100967C
EL1100968C
EL1100969C
EL1100970C
EL1100971C
EL1100972C
EL1100973C
EL1100974C
EL1100975C
EL1100976C
EL1100977C
EL1100978C
EL1100979C
EL1100980C
EL1100981C
EL1100982C
EL1100983C
EL1100984C
EL1100985C
EL1100986C
EL1100987C
EL1100988C
EL1100989C
EL1100990C
EL1100991C
EL1100992C
EL1100993C
EL1100994C
EL1100995C
EL1100996C
EL1100997C
EL1100998C
EL1100999C
EL1100000C

```

BIBLIOGRAFIA

1. J.S. Smart, Effective Field Theories of Magnetism. Saunders, Philadelphie, 1966.
2. N. Ashcroft y N. Mermin, Solid State Physics. Holt - Saunders International Editions, 1976.
3. K. Prasad Sinha y N. Kumar, Interactions in Magnetically Ordered Solids. Oxford University Press 1980.
4. D.N. Zubarev. Soviet Physics Uspekhi 3, 320 (1960).
5. E.A. Harris y J. Owen , Phys. Rev. Letters 11, 9 (1963).
6. D.S. Rodbell, I.S. Jacobs, J. Owen y E.A. Harris, Phys. Rev. Letters 11, 10 (1963).
7. J.F. Devlin, Phys. Rev. B4, 136 (1971).
8. R. Brahmachari y K.G. Chakraborty, Phys. Rev. B22, 1348 (1980).
9. F. Burr Anderson y H.B. Callen, Phys. Rev. 136, 1068 (1964).
10. R. Ferrer y R. Pintanel, Physica 119B, 321 (1983).

11. Per-Olov Löwdin, Rev. Of Mod. Phys. 34, 80, (1962).
12. M. Tiwari y R.N. Srivastava, Il Nuovo Cimento 58, 523, (1980)
13. K.G. Chakraborty, J. Phys. C. 9, 1499, (1976).
14. H.B. Callen, Phys. Rev. 130, 890, (1963).
15. R.A. Tahir - Kheli y D. Ter Haar, Phys. Rev. 127, 88, (1962).
16. L. Flax y J.C. Raich, Phys. Rev. 185, 797, (1969).
17. L. Flax y J.C. Raich, Phys. Rev. B3, 186, (1971).
18. S.M. Rezende y D.W. Hone, J. Phys. C. 16, 5899, (1983).
19. M. Nauciel - Bloch, G. Sarma y A. Castets, Phys. Rev. Bs.
4603, (1972).
20. J. Adler, J. Oitmaa y A.M. Stewart, J. Phys. C. 15, 2911
(1976).
21. K.G. Chakraborty, Z. Physik 268, 179, (1974).
22. H.A. Brown, Phys. Rev. B4, 115, (1971).
23. M.E. Lines, Phys. Rev. B3, 1749, (1971).

24. G.N. Watson, Quart. J. Math. 10, 266, (1939).
25. M. Tiwari y R.N. Srivastava, Z. Phys. B49, 115, (1982).
26. Tanaka, M., Kondo, Y. Prog. Theor. Phys. 48, 1815 (1972).
27. S.V. Tyablikov, Ukr. Mat. Zh. 11, 287 (1959).
28. Mónica Hernández, Efecto de los Términos no Axiales de la Anisotropía Magnética, sobre el Estado Ferromagnético de Aleaciones Amorfas. Tesis para optar al Grado de Magister en Ciencias con mención en Física, Facultad de Ciencias Básicas y Farmacéuticas, U. de Chile (1980).
29. Ricardo Pintanel H. , Sistema Ferromagnético de Heisenberg Anisotrópico con Interacción Bicuadrática, Tesis para optar al Grado de Licenciado en Ciencias con mención en Física, Facultad de Ciencias, U. de Chile (1982).
30. P.W. Anderson, Phys. Rev. 79, 350 (1950); 115, 2 (1959); en Solid State Physics (Academic, New York, 1963), Vol. 14, Sec. 99, p. 214.
31. N.I. Huang y R. Orbach, Phys. Rev. Letters 12, 275 (1964).