FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DE SPINS ELETRÔNICOS E NUCLEARES EM UM MEIO SEMI-INFINITO ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG[§]

E. F. Sarmento[+§], D. R. Tilley[+], M. G. Cottam[*] e B. Žekš[+**]*
[+]*Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas*
57.000, Maceio, Brasil

[*]*Department of Physics, University of Essex, Colchester*
CO4 3SQ, England

Resultados são encontrados para as funções dinâmicas de correlação (ou suas funções de Greens correspondentes) entre qualquer combinação incluindo pares de operadores de spins eletrônicos e nucleares em um meio semi-infinito antiferromagneto, à baixas temperaturas $T \lesssim T_N$. Essas funções de correlação são usadas para investigar ao mesmo tempo as propriedades de ondas de spins superficiais no volume e na superfície. As relações de dispersão dos modos acoplados de ondas de spins eletrônicas e nucleares na superfície são encontradas resolvendo um sistema de equações linearizadas de operadores de spins.

** Endereço permanente : Institut Jozef Stefan, Ljubljana, Yugoslavia.

§ Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq, Brasil.

As propriedades dinâmicas de ferro e antiferromagnetos de Heisenberg, no qual os spins eletrônicos são acoplados aos correspondentes spins nucleares por meio de uma interação hiperfina, tem sido considerado em um número de trabalhos anteriores relativo a cristais infinitos. Em particular de Gennes et al {1} mostrou que o espectro de excitações consiste do acoplamento de ondas de spins eletrônicos e nucleares. A existência de ondas de spins nucleares superficiais em antiferromagnetos foi previamente mostrado por Sarges {2}. As funções de correlação dinâmica entre um par de operadores de spins na ausência do acoplamento hiperfino em qualquer dois sítios dentro de um antiferromagneto de Heisenberg semi-infinito à baixas temperaturas, foram obtidas por Cottam {3}. Recentemente, Sarmento e Cottam {4,5} usando o mesmo formalismo, obtiveram as funções de Green dependentes de spin de um isolante ferromagnético semi-infinito no qual existe uma interação de troca de Heisenberg entre spins eletrônicos vizinhos e um acoplamento hiperfino entre os spins nucleares e eletrônicos. Nesse trabalho nós calculamos as funções de Green dependente de spin de um antiferromagneto semi-infinito, as quais fornecem uma descrição de todos os seis modos de ondas de spins (quatro modos no volume e dois na superfície).

O Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}'} J(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}')\underset{\sim}{S}_{\underset{\sim}{r}}\cdot\underset{\sim}{S}_{\underset{\sim}{r}'} - \gamma_E\left[\sum_{\underset{\sim}{r}}(H_o + H_a(\underset{\sim}{r}))S^z_{\underset{\sim}{r}} + \sum_{\underset{\sim}{r}'}(H_o - H_a(\underset{\sim}{r}'))S^z_{\underset{\sim}{r}'}\right]$$
$$+ A\left[\sum_{\underset{\sim}{r}} \underset{\sim}{S}_{\underset{\sim}{r}}\cdot\underset{\sim}{I}_{\underset{\sim}{r}} + \sum_{\underset{\sim}{r}'} \underset{\sim}{S}_{\underset{\sim}{r}'}\cdot\underset{\sim}{I}_{\underset{\sim}{r}'}\right] - \gamma_N H_o\left[\sum_{\underset{\sim}{r}} I^z_{\underset{\sim}{r}} + \sum_{\underset{\sim}{r}'} I^z_{\underset{\sim}{r}'}\right] \qquad (1)$$

onde $\underset{\sim}{r}$ e $\underset{\sim}{r}'$ referem-se a sítios nas subrêdes 1 (spins ↑) and 2 (spins ↓) respectivamente e $J(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}')$ é a interação de troca. Nós assumimos que os spins eletrônicos $\underset{\sim}{S}_{\underset{\sim}{r}}$ e os spins nucleares $\underset{\sim}{I}_{\underset{\sim}{r}}$ estão nos sítios $\underset{\sim}{r}=(na,\underset{\sim}{\rho})$, onde $\underset{\sim}{\rho}$ é um vetor em duas dimensões no pleno yz com o eixo dos x perpendicular à superfície. H_o é um campo aplicado na direção x, e $H_a(\underset{\sim}{r})$ e

$g_a(\underline{r}')$ são campos de anisotropia. A é a interação hiperfina, enquanto γ_E e γ_N são os fatores giromagnéticos eletrônicos e nucleares respectivamente. Nós assumiremos uma interação de troca diferente de zero, apenas para primeiros vizinhos das subredes opostas, tendo o valor J_1 se um dos spins está na superfície e J para os demais. Nós indicaremos as camadas atômicas paralelas a superfície com um índice n, e a camada n contém apenas spins ↑ se n for ímpar e apenas spins ↓ se n for par.

Nós desenvolvemos as funções de Green transversas de spin $F_{n,n'} = << \alpha_n^+ ; \beta_{n'}^- >>_{\underline{q},E}$, onde α e β podem ser S ou I. Seguindo procedimentos idêntico ao de Cottam {3} à função de Green para os spins eletrônico com n e n' par é dada por

$$G^{s,t}_{2,2}(\underline{q},E) = \frac{1}{2\pi}\ \frac{E-\gamma_I}{8SJ^2\xi^2(\underline{q})}\ \frac{\gamma st}{(1-\gamma s)(1-\gamma t)}\left(\frac{1}{1-st} - \frac{\gamma\Delta}{1+\gamma\Delta}\right) \qquad (2)$$

onde

$$\gamma_I = \gamma_E(H_o + H_a) + 8JS - AI + (A^2SI)/(E-\gamma_N^+)$$

$$\xi(\underline{q}) = \cos(1/2\ q_y a)\cos(1/2\ q_z a), \quad \gamma_N^+ = \gamma_N H_o - AS$$

e γ é uma variável complexa ($|\gamma| \leqslant 1$) satisfazendo

$$\gamma + \gamma^{-1} = -\{\{[(E-\gamma_I)(E-\gamma_p)]/[(4JS\xi(\underline{q}))]^2\} + 2\} \qquad (3)$$

com

$$\gamma_p = \gamma_E(H_o - H_a) - 8JS + AI + (A^2SI)/(E-\gamma_N^-)$$

e $\gamma_N^- = \gamma_N H_o + AS$. Parâmetro Δ, o qual depende de características da superfície é dado por

$$\Delta = 1 - \frac{E-\gamma_I}{E-\gamma_s}\left(\frac{J_1}{J}\right)^2 + \frac{(E-\gamma_I)(J-J_1)}{4S(J\xi(\underline{q}))^2} \qquad (4)$$

onde

$$\gamma_s = \gamma_E(H_o + H_a) + 8J_1S - AI_s + (A^2SI_s)/(F-\gamma_N^+)$$

Detalhes desses cálculos, assim como as demais funções de Green existentes serão dados em {6}.

Os modos de ondas de spins no bulk correspondem à $\gamma = \exp(iq_x a)$, o qual substituído em (3) fornece a equação quártica

$$(E - \gamma_I)(E-\gamma_p) = - \left[8JS\xi(q) \cos(1/2\, q_x a)\right]^2 \qquad (5)$$

cujas soluções são os usuais modos acoplados de ondas de spins eletrônicos e nucleares no bulk. As excitações de superfície correspondem à condição de $(1+\gamma\Delta) = 0$, e a substituição de $\gamma = -1/\Delta$ em (3) fornece

$$(E-\gamma_s)(E-\gamma_p) = (E-\gamma_I)\, 4JS\, (\xi(q))^2 \qquad (6)$$

cujas soluções representam os modos acoplados de ondas de spins eletrônicos e nucleares na superfície. Duas soluções dessa equação são não físicas e portanto descartadas, desde que elas não satisfazem a condição $|\gamma|<1$. Os resultados mostram que a frequência dos modos superficiais ficam abaixo da banda dos modos de frequência do bulk. Essas relações de dispersão são discutidas em mais detalhes em {6}. As funções de correlação encontradas aqui são de interesse, desde que elas determinam a resposta dinâmica do sistema magnético, e nós pretendemos aplicá-las para discutir a observabilidade de ondas de spins nucleares por técnicas de resonância magnética em uma publicação subsequente.

REFERENCIAS

{1} P. G. de Gennes, P. A. Pincus, F. Hartman-Boutron and J. M. Winter, Phys. Rev. 129, (1963), 1105.

{2} K. H. Sarges, Phys. Letters 36A, (1971), 9.

{3} M. G. Cottam, J. Phys. C11, (1978), 151.

{4} E. F. Sarmento e M. G. Cottam, J. of Mag. Mag. Mat. 15-18, (1980), 1013.

{5} E. F. Sarmento e M. G. Cottam, submetido ao J. Phys. C.

{6} E. F. Sarmento, D. R. Tilley, M. G. Cottam e B. Zeks - em preparação.