

DINÂMICA DO MODELO DE
ISING COM CAMPO TRANSVERSAL
NA FASE ORDENADA

Renato Las Casas

*Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito
parcial para obtenção do grau de MESTRE EM FÍSICA*

Junho - 1980

A minha filha
Livia

RESUMO

Foi calculado para o modelo de Ising com campo transversal, o espectro das flutuações na polarização espontânea, usando-se o método de frações continuadas de Mori, em baixas temperaturas na aproximação de três polos. Os resultados concordam com trabalhos anteriores no mesmo problema.

ABSTRACT

The spectrum of the fluctuation in the polarization for the Ising Model in a transversal field has been calculated by Mori's continued fraction method in the low temperature region, using the three pole approximation. The results agree with previous calculation done on the same problem.

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Lincoln A.A. Ribeiro pela orientação eficiente na realização desta tese, expresso minha sincera gratidão.

Agradeço:

- Aos meus pais, Américo e Júlia, pela dedicação e incentivo constantes.
- Ao amigo L.A.A. Ribeiro, por sua influência, apoio e incentivo.
- Ao amigo Jefferson Ribeiro Diniz, pelo incentivo e exemplo de perseverança e seriedade nos estudos.
- A todos os colegas do Departamento, especialmente a Ester Naves Machado Borges, por seu incentivo.
- Ao Prof. Evaldo Mello de Carvalho, quem me iniciou em pesquisa
- Ao Prof. Roberto Alves Nogueira, pela eficiência e ajuda imprescindível nos trabalhos de computação da presente tese
- Ao Prof. Antônio Sérgio T. Pires pelo incentivo, ainda na graduação e sugestões no trabalho da presente tese
- Aos Profs. Nilton Penha Silva e Geraldo Alexandre Barbosa pelas sugestões
- A Maria Ignês Marcelino, pela eficiência nos serviços datilográficos desta tese
- A todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram na efetivação deste trabalho
- Às instituições CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

INDICE

Página

Capítulo I - Introdução	1
Capítulo II - 1. Funções de Green	4
2. Frações Continuadas	15
Capítulo III - Cálculos	28
Capítulo IV - Resultados e Conclusões	32
Apêndice I	52
Apêndice II	55
Referências	61

INTRODUÇÃO

O modelo de Ising com campo transversal (MICT) é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = -2\Omega \sum_i S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (1.1)$$

onde \vec{S}_i é um operador de spin ou pseudo-spin ($S = 1/2$) atuante no sítio i de uma rede cristalina, com componentes S_i^α ($\alpha = x, y, z$). As somas acima se estendem a todos os pontos da referida rede. Ω é o módulo do campo transversal e J_{ij} é a energia de interação entre os spins ou pseudo-spins situados respectivamente nos sítios i e j da rede.

Esse modelo foi usado por DeGennes⁽¹⁾ para descrever os cristais ferroelétricos do tipo ordem-desordem com ligações de Hidrogênio, cujo principal representante é o KH_2PO_4 (KDP). Segundo o modelo, os prótons das ligações de hidrogênio localizam-se em um ou outro mínimo de um poço de potencial duplo dispondo-se ao longo da ligação, onde cada posição corresponde a um valor de $S^z = \pm 1/2$. O campo transversal nesse caso, representa a energia de tunelamento do próton entre os dois mínimos e o termo de interação representa a energia de correlação entre os possíveis arranjos de prótons. Para uma revisão mais completa da aplicação do modelo ao KDP ver as referências⁽²⁾ e ⁽³⁾. A possibilidade do uso do MICT para ferroelétricos do tipo deslocamento foi sugerida por Elliot⁽⁴⁾ e discutida por Vaks et al⁽⁵⁾.

O modelo foi usado também para explicar o comportamento de materiais ferromagnéticos que apresentam uma forte anisotropia uniaxial cristalina tais como o $\text{Dy}(\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, submetido a um campo transversal⁽⁶⁾. Usou-se ainda o modelo por Wang e Cooper⁽⁷⁾ a fim de descrever a transição paramagnética - ferromagnética em compostos de terras raras do grupo V, apresentando estrutura do NaCl, onde o campo cristalino tem um papel preponderante. Sistemas Jahn-Teller tais como DyVO_4 , TbVO_4 onde os va

lores de $S^z = \pm 1/2$ correspondem aproximadamente aos dubletos da fase distorcida e nos quais a modificação do campo cristalino pelos deslocamentos atômicos dão lugar ao aparecimento de uma interação spin-spin efetiva do tipo Ising. O campo transversal aparece devido aos efeitos residuais do campo cristalino⁽⁷⁾.

Os primeiros trabalhos teóricos no modelo foram realizados por De Gennes⁽¹⁾ e Wang e Cooper⁽⁷⁾. Basearam-se na aproximação do campo molecular para a obtenção de grandezas termodinâmicas e na aproximação das fases aleatórias (RPA) para o cálculo das funções correlações dinâmicas. Fisher⁽⁸⁾ calculou, usando expansões em série a susceptibilidade estática. Foram também calculadas as grandezas termodinâmicas por meio de expansões em série⁽⁹⁾ e por meio de expansões em clusters⁽¹⁰⁾:

Amarante Ribeiro⁽¹¹⁾ calculou por meio do método de funções de Green na aproximação RPA o tensor susceptibilidade elétrica e o calor específico em altas e baixas temperaturas. Chock et al.⁽¹²⁾ Chock e Dagonier⁽¹³⁾ e Moore e Williams⁽¹⁴⁾ calcularam as funções correlações dinâmicas mas se abstiveram ao regime paramagnético. Usando técnicas de perturbações, Stinchcombe⁽¹⁵⁾ calculou as grandezas termodinâmicas e as funções correlações também em temperaturas altas e baixas em uma aproximação superior a RPA. Cheung^(16, 17), Tommet e Huber⁽¹⁸⁾, Blinc et al.⁽¹⁹⁾ e Pak⁽²⁰⁾, usando o método das frações continuadas proposto por Mori⁽²¹⁾ estudaram o espectro das flutuações da polarização em altas temperaturas. Kühmel et al.⁽²²⁾ trataram o MICT por meio de funções de Green usando uma aproximação semi-fenomenológica baseado na aproximação de Mori e Kawasaki⁽²³⁾ e obtiveram o fator de estrutura longitudinal e transversal em toda a região de temperaturas.

O objetivo do presente trabalho é o de estudar o espectro das flutuações de polarização longitudinal do MICT e a técnica de cálculo do método das frações continuadas de Mori, usando-se a aproximação de três polos proposta por Lovesey e Meserve⁽²⁴⁾ com o corte proposto por Tommet e Huber⁽¹⁸⁾. Foram feitos também cálculos na aproximação gaussiana⁽²⁰⁾, mas devido a dificuldades computacionais não foi possível realizar um cálculo dos polos de densidade espectral.

No capítulo II fazemos uma revisão do formalismo matemático empregado no tratamento teórico do problema em questão. Uma exposição

mais completa do assunto é encontrada em Zubarev⁽²⁵⁾ e Mori⁽²¹⁾. No capítulo III fazemos a aplicação do método ao problema. Finalmente, o capítulo IV é reservado para a apresentação dos resultados, discussão e conclusões.

CAPÍTULO II

1. FUNÇÕES DE GREEN

Faremos na primeira parte desse capítulo uma revisão do Método das Funções de Green. Um desenvolvimento mais detalhado é encontrado em Zubarev⁽²⁵⁾.

a) FUNÇÕES CORRELAÇÃO E DENSIDADE ESPECTRAL

Sejam

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle \quad (11.1-1)$$

$$F_{BA}(t, t') = \langle B(t') A(t) \rangle \quad (11.1-2)$$

as funções de correlação dos operadores A e B (média sobre um ensemble estatístico canônico do produto de A e B expressos na representação de Heisenberg).

Derivando (11-1) e (11-2) em relação ao tempo e utilizando a equação de movimento, num sistema de unidades no qual $\hbar = 1$

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

Chega-se a

$$i \frac{d}{dt} F_{AB}(t, t') = \langle [A(t), H] B(t') \rangle \quad (11.1-3)$$

$$i \frac{d}{dt} F_{BA}(t, t') = \langle B(t') [A(t), H] \rangle \quad (11.1-4)$$

Uma das formas de calcular as funções de correlação consiste em integrar (11.1-3) e (11.1-4) e utilizar as condições de contorno apropriadas..

Sejam E_n e $|n\rangle$ os autovalores e autovetores respectivamente do Hamiltoniano do sistema, sendo $\{|n\rangle\}$ um conjunto de autovetores.

Seja $\langle A \rangle$ o valor médio do operador A.

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr } e^{-\beta H} A}{\text{Tr } e^{-\beta H}} = Z^{-1} \text{Tr } e^{-\beta H} A \quad (11.1-5)$$

onde Z é a função partição

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H} ; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (11.1-6)$$

Na representação de Heisenberg o operador A se escreve

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} \quad (11.1-7)$$

Considerando que

$$e^{-iHt} |n\rangle = e^{-iE_n t} |n\rangle \quad (11.1-8)$$

e

$$\langle n | e^{iHt} = \langle n | e^{iE_n t}$$

pode-se escrever

$$\langle B(t') A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_n \langle n | B(t') A(t) | n \rangle e^{-\beta E_n} =$$

$$= Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n[B(t')]_m \rangle \langle m[A(t)]_n \rangle e^{-\beta E_n} \quad (11.1-9)$$

$$\langle B(t') A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n[B]_m \rangle \langle m[A]_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} \quad (11.1-10)$$

e análogamente

$$\langle A(t) B(t') \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n[A]_m \rangle \langle m[B]_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t' - t)} \quad (11.1-11)$$

Usando a definição

$$I(\omega) = Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n[B]_m \rangle \langle m[A]_n \rangle e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m - \omega), \quad (11.1-12)$$

pode-se escrever (11.1-10) e (11.1-11) como:

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t - t')} d\omega \quad (11.1-13)$$

$$\langle B(t') A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega) e^{-i\omega(t - t')} d\omega \quad (11.1-14)$$

A função $I(\omega)$ definida em (11.1-12) é chamada densidade espectral ou função espectral. (11.1-13) e (11.1-14) são as representações espectrais das funções de correlação (11.1-1) e (11.1-2), respectivamente.

Assim sendo, procurando pelas funções de correlação de

um sistema, pode-se utilizar (11.1-3) e (11.1-4) ou (11.1-13) e (11.1-14). Após definir certas funções $G_r^\eta(t, t')$ e $G_a^\eta(t, t')$, conhecidas como funções de Green dependentes do tempo, retardada e avançada, e deduzir algumas de suas propriedades, mostra-se que $I(\omega)$ pode ser obtida a partir dessas funções. Faremos em momento oportuno, alguns comentários acerca da obtenção das funções correlação por meio de (11.1-3) e (11.1-4) ou (11.1-13) e (11.1-14).

b) FUNÇÕES DE GREEN

Há na mecânica estatística, assim como na teoria quântica dos campos, vários tipos de funções de Green. Aqui vão nos interessar apenas as funções de Green dependentes do tempo, retardada e avançada, de finidas por⁽²⁵⁾

$$G_r^\eta(t, t') = \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle_r^\eta = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_\eta \quad (11.1-15)$$

$$G_a^\eta(t, t') = \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle_a^\eta = i\theta(t'-t) \langle [A(t), B(t')] \rangle_\eta \quad (11.1-16)$$

A função $\theta(t-t')$ é a função degrau de Heviside, ou seja:

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{se } t-t' > 0 \\ 0 & \text{se } t-t' < 0 \end{cases} \quad (11.1-17)$$

$\eta = \pm 1$ correspondendo $[A(t), B(t')]_\eta = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t)$ ao comutador ou anticomutador dos operadores $A(t)$ e $B(t')$. Se A e B são operadores de bosons, η é geralmente escolhido como $+1$ e se operadores de fermions como -1 . Algumas vezes, entretanto, a escolha inversa é necessária⁽²⁶⁾.

Cabe salientarmos ainda o fato de (11.1-15) e (11.1-16) estarem escritas em um sistema de unidades no qual $\hbar = 1$; também segue da definição que G_r^η e G_a^η , no equilíbrio estatístico são funções de $t-t'$ apenas, excluindo-se o caso $t = t'$, por não serem essas funções definidas, devido à singularidade da função $\theta(t-t')$ nesse ponto. Por fim lembremos ainda que por definição, G_r^η e G_a^η dependem linearmente de cada um de seus operadores, isto é:

$$\langle\langle \mu A + \nu B | C \rangle\rangle_{r,a}^{\eta} = \mu \langle\langle A | C \rangle\rangle_{r,a}^{\eta} + \nu \langle\langle B | C \rangle\rangle_{r,a}^{\eta} \quad (11.1-18)$$

onde μ e ν são números complexos arbitrários.

Multiplicando (11.1-15) por i e derivando em seguida em relação ao tempo, obtém-se

$$i \frac{d}{dt} G_r^{\eta}(t, t') = \frac{d\theta(t-t')}{dt} \langle [A(t), B(t')] \rangle_{\eta} + \\ + \langle\langle i \frac{dA(t)}{dt} | B(t') \rangle\rangle_r^{\eta} . \quad (11.1-19)$$

Analogamente

$$i \frac{d}{dt} G_a^{\eta}(t, t') = - \frac{d\theta(t-t')}{dt} \langle [A(t), B(t')] \rangle_{\eta} + \\ + \langle\langle i \frac{dA(t)}{dt} | B(t') \rangle\rangle_a^{\eta} . \quad (11.1-20)$$

Levando em conta que $\frac{d\theta(-t)}{dt} = - \frac{d\theta(t)}{dt}$ vemos que as equações de movimento para as funções de Green avançada e retardada são iguais e podem ser escritas em uma forma mais condensada:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle_j^{\eta} = \frac{d\theta(t-t')}{dt} \langle [A(t), B(t')] \rangle_{\eta} + \\ + \langle\langle i \frac{dA(t)}{dt} | B(t') \rangle\rangle_j^{\eta} \quad (11.1-21)$$

com $j = r, a$. Considerando que $\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t)$ e a equação de movimento para operadores, (11.1-21) se torna:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle_j^\eta = \delta(t - t') \langle[A(t), B(t')]\rangle + \langle\langle [A(t), H(t)] | B(t') \rangle\rangle_j^\eta \quad (11.1-22)$$

A função de Green do segundo membro é geralmente de ordem superior à inicial (ela envolve um número maior de operadores); pode-se construir para ela uma equação do tipo (11.1-22) e assim sucessivamente. Tem-se então, em geral, em mãos uma cadeia infinita de equações acopladas. Na grande maioria dos casos, as soluções exatas dessas equações são, porém, impraticáveis. Pode-se entretanto, por algum método aproximado, desacoplá-las e reduzir o problema a um conjunto finito de equações que pode então ser resolvido. Esse desacoplamento deve ser proposto para cada problema específico, uma vez que não existe um método sistemático que independa da situação física presente.

C) FUNÇÕES CORRELAÇÃO, DENSIDADE ESPECTRAL E FUNÇÕES DE GREEN.

Nosso objetivo agora, conforme salientado anteriormente, é mostrar que $I(\omega)$ pode ser obtida a partir das funções de Green avançada e retardada. Como as funções de correlação podem ser dadas em termos da densidade espectral de uma forma simples (11.1-13) e (11.1-14), segue-se que podemos transformar o problema de calcular as funções de correlação em um problema de calcular as funções de Green. As vantagens em agirmos assim parecem evidentes.

Seja $G_r^\eta(E)$ a transformada de Fourier temporal da função de Green $G_r^\eta(t-t')$

$$G_r^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r^\eta(t-t') e^{i E(t-t')} dt \quad (11.1-23)$$

Utilizando (11.1-15), obtem-se

$$G_r^\eta(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i E(t-t')} \theta(t-t') .$$

(11.1-24)

$$\{ \langle A(t) B(t') \rangle - \eta \langle B(t') A(t) \rangle \}$$

Expressando as funções de correlação existentes sob o sinal de Integração em termos das suas representações espectrais (forma de (11.1-13) e (11.1-14), obtem-se

$$G_r^\eta(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega I(\omega) [e^{\beta\omega} - \eta] .$$

(11.1-25)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)(t-t')} \theta(t-t') .$$

Considerando ser a função degrau de Heaviside dada por

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t e^{\epsilon t} \delta(t) dt, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad \epsilon > 0; \quad (11.1-26)$$

e considerando que

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dx, \quad (11.1-27)$$

pode-se escrever

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\epsilon} dx, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad \epsilon > 0 \quad (11.1-28)$$

Substituindo essa última equação em (11.1-25) obtem-se

$$G_r^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) I(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon} \quad (11.1-29)$$

De uma maneira inteiramente análoga pode-se demonstrar que

$$G_a^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) l(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\epsilon} \quad (11.1-30)$$

Obtem-se assim as representações espectrais das funções de Green retardada e avançada, que numa forma compacta pode ser escrita como

$$G_j^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) l(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\epsilon} \quad (11.1-31)$$

O sinal (+) correspondendo a $j = r$ e o sinal (-) correspondendo a $j = a$.

Até aqui E foi considerado real, mas as expressões (11.1-29) e (11.1-30) sugerem a possibilidade de se continuar analiticamente as funções de Green no plano complexo.

Devido a função degrau de Heaviside $G_r^\eta(t) = 0$ para $t < 0$, permite-se escrever por (11.1-23)

$$G_r^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} G_r^\eta(t) e^{iEt} dt \quad (11.1-32)$$

Sendo $E = \alpha + i\rho$ (α e ρ reais), tem-se

$$G_r^\eta(\alpha + i\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} G_r^\eta(t) e^{i\alpha t} e^{-\rho t} dt, \quad \rho > 0 \quad (11.1-33)$$

De uma forma análoga

$$G_a^\eta(\alpha + i\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_a^\eta(t) e^{i\alpha t} e^{-\rho t} dt, \quad \rho < 0 \quad (11.1-34)$$

Assim sendo, introduzindo um corte no eixo real, define-se uma função $G^\eta(E)$ analítica no plano complexo E , tal que possua dois ramos:

$$G^\eta(E) = \begin{cases} G_r^\eta(E) & , \operatorname{Im} E > 0 \\ G_a^\eta(E) & , \operatorname{Im} E < 0 \end{cases} \quad (11.1-35)$$

Pode-se assim escrever, para E complexo

$$G^\eta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega'} - \eta) f(\omega') \frac{d\omega'}{E - \omega'} = \begin{cases} G_r^\eta(E) & , \operatorname{Im} E > 0 \\ G_a^\eta(E) & , \operatorname{Im} E < 0 \end{cases} \quad (11.1-36)$$

(Aqui o termo $\pm i\epsilon$ foi absorvido em E)

Considerando que $\epsilon > 0$, a equação (11.1-35) e fazendo $\alpha = \omega$ e $\rho = \pm \epsilon$, tem-se:

$$G^\eta(\omega + i\epsilon) - G^\eta(\omega - i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega'} - \eta) f(\omega')$$

$$\left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\epsilon} \right] d\omega' \quad (11.1-37)$$

Fazendo o limite de $\epsilon \rightarrow 0$

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

$$\cdot \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\epsilon} \right] d\omega' \quad (11.1-38)$$

Considerando a representação da função $\delta(x)$:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right] \quad (11.1-39)$$

obtem-se a densidade espectral em termos das funções de Green:

$$I(\omega) = \frac{i}{e^{\beta\omega} - \eta} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[G^\eta(\omega + i\epsilon) - G^\eta(\omega - i\epsilon) \right] \quad (11.1-40)$$

Para expressar as funções correlação em termos das funções de Green, simplesmente substitui-se (11.1-40) em (11.1-13) e (11.1-14) obtendo:

$$F_{BA}(t-t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G^\eta(\omega + i\epsilon) - G^\eta(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (11.1-41)$$

e

$$F_{AB}(t-t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G^\eta(\omega + i\epsilon) - G^\eta(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{\omega\beta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (11.1-42)$$

Resumidamente, vimos então que calculando o salto da função de Green no eixo real, obtemos a densidade espectral e consequentemente as funções correlação dependentes do tempo.

Como já salientamos, as funções correlação podem ser calculadas de uma maneira direta pela integração das equações (11.1-3) e (11.1-4), às quais devemos acrescentar as condições de contorno, ou indiretamente, calculando-se previamente as funções de Green avançada e retardada

da e utilizando (11.1-41) e (11.1-42). A fim de resolver o conjunto de equações de movimento das funções de Green (11.1-22), devemos especificar as condições de contorno para o tempo, as quais são diferentes para as funções avançadas ou retardadas. A forma dessas condições pode ser deduzida das definições das funções de Green. Contudo, é mais fácil obtê-las usando-se as transformadas de Fourier temporais dessas funções. Desta forma, as condições de contorno aparecem na forma da representação espectral das funções de Green.

Finalmente, usando a transformada de Fourier (11.1-15), a equação de movimento (11.1-22) pode ser escrita como

$$E G^n(E) = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_n \rangle + \langle\langle [A, H]_n | B \rangle\rangle_E \quad (11.1-43)$$

As funções de Green satisfazem um sistema de equações acopladas e a representação espectral nos permite obter as condições de contorno para essas equações. Pelo desacoplamento das equações de movimento, o sistema de equações torna-se solúvel e através dessas soluções pode-se obter as grandezas termodinâmicas aproximadas do sistema.

2. FRAÇÕES CONTINUADAS

Faremos agora uma revisão do Método das Frações Contínuas. Um desenvolvimento mais detalhado pode ser encontrado em Mori⁽²¹⁾.

Seja o operador $A_{\vec{q}}^{\pm}(t)$, coordenada normal que representa um movimento coletivo de um determinado sistema físico (por exemplo: A pode ser a magnetização num ferromagnético e o movimento coletivo as ondas de spin).

Considere a equação de Heisenberg do operador $A_{\vec{q}}^{\pm}(t)$:
($\hbar = 1$)

$$\frac{d}{dt} A_{\vec{q}}^{\pm}(t) = i[H, A_{\vec{q}}^{\pm}(t)] = iL A_{\vec{q}}^{\pm}(t) \quad (11.2-1)$$

onde L é o operador de Liouville do sistema. Aplicando-se a aproximação das fases aleatórias (RPA) na equação (11.2-1) lineariza-se a equação e obtém-se um termo que contém a frequência coletiva ω_0 . Uma aproximação superior apresenta um termo de amortecimento $-\gamma A_{\vec{q}}^{\pm}(t)$. Se se faz uma aproximação ainda mais alta, então tem-se o aparecimento de uma parte aleatória $f_{\vec{q}}^{\pm}(t)$ que descreve as flutuações do movimento. A equação (11.2-1) pode então ser escrita:

$$\frac{d}{dt} A_{\vec{q}}^{\pm}(t) - i\omega_0 A_{\vec{q}}^{\pm}(t) + \gamma A_{\vec{q}}^{\pm}(t) = f_{\vec{q}}^{\pm}(t) \quad (11.2-2)$$

que é a equação de Langevin para um movimento estocástico da grandeza $A_{\vec{q}}^{\pm}(t)$. Como sabemos a equação deve ser suplementada pela condição

$$\langle f_{\vec{q}}^{\pm}(t_1) f_{\vec{q}}^{\pm}(t_2) \rangle = 2\gamma \langle [A_{\vec{q}}^{\pm}]^2 \rangle \delta(t_1 - t_2) \quad (11.2-3)$$

O problema que se apresenta no momento é a separação de $A_{\vec{q}}^{\pm}(t)$ de outros graus de liberdade entre t e um tempo inicial t_0 . O proble

ma pode ser formulado da seguinte maneira: Seja $\frac{d}{dt} A_q^{\rightarrow}(t) = F_q^{\rightarrow}(t)$ a equação do movimento do sistema descrito pela coordenada normal $A_q^{\rightarrow}(t)$. Suponha que $F(t)$ possa ser separada em duas partes:

$$\frac{d}{dt} A_q^{\rightarrow}(t) = F(t) = F_1(A_q^{\rightarrow}(s), t \geq s \geq t_0) + F_2(t, t_0) \quad (11.2-4)$$

tal que F_1 seja um funcional* de $A(s)$ dependendo também da história de $A_q^{\rightarrow}(t)$ e F_2 um termo que depende de outros graus de liberdade. Expandindo-se F_1 em termos de $A_q^{\rightarrow}(t)$, $t \geq s \geq t_0$:

$$\frac{d}{dt} A_q^{\rightarrow}(t) = \int_{t_0}^t M_q^{\rightarrow}(t-s) A_q^{\rightarrow}(s) ds + f_q^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-5)$$

o primeiro termo do segundo membro é o termo linear e é uma forma generalizada de parte sistemática de Equação de Langevin. A soma dos termos não lineares da expansão e F_2 define unívocamente a força aleatória $f_q^{\rightarrow}(t)$. Esta sendo feita a suposição que $A_q^{\rightarrow}(t)$ é o operador desvio de sua parte invariante, isto é:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A_q^{\rightarrow}(t) dt = 0 \quad (11.2-6)$$

A função M_q^{\rightarrow} é uma função somente do intervalo de tempo e pode-se então tomar $t_0 = 0$ e introduzindo-se a transformada de Laplace.

$$A_q^{\rightarrow}(z) = \int_0^{\infty} A_q^{\rightarrow}(t) e^{-zt} dt \quad (11.2-7)$$

pode-se integrar a equação integro-diferencial obtendo:

$$A_q^{\rightarrow}(t) = F_q^{AA}(t) \cdot A_q^{\rightarrow} + A_q^{\rightarrow} \quad (11.2-8)$$

*Funcional é uma função definida em um espaço constituído das entidades as mais gerais possíveis (por exemplo um espaço de operadores) e tomando valores reais.

$$A_{\vec{q}}^i = \int_0^t F_{\vec{q}}^{AA}(t-s) f_{\vec{q}}(s) ds \quad (11.2-9)$$

onde $F_{\vec{q}}^{AA}(t)$ é definida por sua transformada de Laplace:

$$F_{\vec{q}}^{AA}(z) = \frac{1}{z - M_{\vec{q}}(z)} \quad (11.2-10)$$

De acordo com a relação (11.2-8) a variável $A_{\vec{q}}(t)$ é dividida em duas partes, primeiro numa parte secular $F_{\vec{q}}^{AA}(t) \cdot A_{\vec{q}}$ cuja evolução temporal está inteiramente determinada pela função $M_{\vec{q}}$ e segundo uma parte $A_{\vec{q}}^i(t)$ que descreve efeitos não lineares, processos transientes iniciais e flutuações. Uma interpretação geométrica de (11.2-8) pode ser feita da seguinte forma:

Introduza o espaço de Hilbert das variáveis dinâmicas com partes invariantes nulas e seja (A, B^*) o produto escalar de duas variáveis quaisquer A e B deste espaço. A teoria aqui exposta vale para qualquer produto escalar. Entretanto particularize-a com a seguinte definição:

$$(A, B^*) = \int_0^\beta \langle e^{\lambda H} A e^{-\lambda H} B^* \rangle d\lambda \quad (11.2-11)$$

A razão da presente particularização é a seguinte⁽²⁸⁾:

O espectro de flutuações da grandeza A é obtido da função

$$F_{\vec{q}}^{AA}(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} F_{\vec{q}}^{AA}(z = i\omega), \quad (11.2-12)$$

se a função $F_{\vec{q}}^{AA}(\omega)$ for definida por:

$$F_{\vec{q}}^{AA}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} F_{\vec{q}}^{AA}(t) dt \quad (11.2-13)$$

com

$$F_{\vec{q}}^{AA}(t) = \frac{(A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t), A_{\vec{q}}^{\rightarrow*})}{(A_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*})} \quad (11.2-14)$$

$$(A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t), A_{\vec{q}}^{\rightarrow*}) = \int_0^{\beta} d\lambda \langle e^{\lambda H} A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) e^{-\lambda H} A_{\vec{q}}^{\rightarrow*} \rangle \quad (11.2-15)$$

produto escalar que é da forma (11.2-11). Além das propriedades usuais do produto escalar nos exige que o operador de Liouville seja Hermitiano:

$$(LA, B^*) = (A, (L B)^*) \quad (11.2-16)$$

Em termos da equação de Liouville, a equação de movimento de $A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t)$ pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) = i L A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-17)$$

com

$$A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) = e^{iLt} A_{\vec{q}}^{\rightarrow} \quad (11.2-18)$$

A variável dinâmica $A_{\vec{q}}^{\rightarrow}$ define uma direção no espaço de Hilbert (fig. 11-1)



$$F_{\vec{q}}^{AB} = A_{\vec{q}}^{\rightarrow} \quad (\text{Fig. 11-1})$$

A projeção de um vetor B no eixo A é dada por

$$PB = (B_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*}) \cdot (A_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*})^{-1} \cdot A \quad (11.2-19)$$

esta equação define um operador linear hermitiano P no espaço de Hilbert, chamado projetor em $A_{\vec{q}}^{\rightarrow}$ com a propriedade $P(1-P) = 0$. Motivados por (11.2-14) define-se o produto escalar de tal modo que o primeiro termo em (11.2-8)

seja a projeção de $A_q^{\rightarrow}(t)$ no eixo A_q^{\rightarrow} e o segundo termo sua componente vertical:

$$F_q^{AB}(t) = \frac{(A_q^{\rightarrow}(t), A_q^{\rightarrow*})}{(A_q^{\rightarrow}, A_q^{\rightarrow*})} \quad (11.2-20)$$

$$A_q^{\rightarrow}(t) = (1 - P) A_q^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-21)$$

Como (11.2-9) e (11.2-21) valem para todos os tempos, $f_q^{\rightarrow}(t)$ deve ser ortogonal ao eixo A_q^{\rightarrow} :

$$(f_q^{\rightarrow}(t), A_q^{\rightarrow*}) = 0 \quad (11.2-22)$$

A quantidade mais importante associada a $A_q^{\rightarrow}(t)$ é $i L A_q^{\rightarrow}$. Seja feita a sua divisão em duas componentes, uma na direção A_q^{\rightarrow} e outra ortogonal à essa direção:

$$\frac{d}{dt} A_q^{\rightarrow}(t) = i L A_q^{\rightarrow} = i \omega_0 A_q^{\rightarrow} + \phi_q^{\rightarrow} \quad (11.2-23)$$

onde

$$i \omega_0 = \left[\frac{d}{dt} F_q^{AA}(t) \right]_{t=0} = \frac{(\dot{A}_q^{\rightarrow}(t), A_q^{\rightarrow*})}{(A_q^{\rightarrow}, A_q^{\rightarrow*})} \quad (11.2-24)$$

$$\phi_q^{\rightarrow} = (1 - P) \dot{A}_q^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-25)$$

Operando agora $(1-P)$ em (11.2-18) e usando-se (11.2-21), (11.2-8) e (11.2-24), obtém-se :

$$\frac{d}{dt} A_{\vec{q}}^{\dagger}(t) - (1 - P) i L A_{\vec{q}}^{\dagger}(t) = F_{\vec{q}}^{AA}(t) \cdot \phi_{\vec{q}} \quad (11.2-26)$$

Integrando-se (11.2-26), obtém-se:

$$A_{\vec{q}}^{\dagger}(t) = \int_0^t F_{\vec{q}}^{AA}(s) f_{\vec{q}}^{\dagger}(t-s) ds \quad (11.2-27)$$

onde

$$f_{\vec{q}}^{\dagger}(t) = U(t) \cdot \phi_{\vec{q}} \quad (11.2-28)$$

$$U(t) = e^{(1-P)iLt} \quad (11.2-29)$$

Derivando-se com relação ao tempo (11.2-20) e usando-se (11.2-23), vem

$$\frac{d}{dt} F_{\vec{q}}^{AA}(t) = i\omega_0 F_{\vec{q}}^{AA} + \frac{(\phi_{\vec{q}}^{\dagger}(t), A_{\vec{q}}^{*})}{(A_{\vec{q}}^{\dagger}, A_{\vec{q}}^{*})} \quad (11.2-30)$$

Como $(\phi_{\vec{q}}^{\dagger}(t), A_{\vec{q}}^{*}) = (\phi_{\vec{q}}^{\dagger}, A_{\vec{q}}^{*}(-t))$ de Hermiticidade de L e como $\phi_{\vec{q}}^{\dagger}$ é ortogonal a $A_{\vec{q}}^{\dagger}$ o uso de (11.2-8) e (11.2-27) transforma o segundo termo de (11.2-30) em

$$\int_0^{-t} ds (\phi_{\vec{q}}^{\dagger}, f^{\dagger}(-t-s)^{*}) F_{\vec{q}}^{AA}(s) \cdot (A_{\vec{q}}^{\dagger}, A_{\vec{q}}^{*})^{-1} \quad (11.2-31)$$

Usando-se o fato de que

$$(A_{\vec{q}}^{\dagger}, A_{\vec{q}}^{*}) \cdot F_{\vec{q}}^{AA}(-t) (A_{\vec{q}}^{\dagger}, A_{\vec{q}}^{*}) \quad (11.2-32)$$

e anulando-se as variáveis de s para $t - s$, tem-se:

$$\frac{d}{dt} F_{\vec{q}}^{AA}(t) = i\omega_0 F_{\vec{q}}^{AA}(t) - \int_0^t K_{\vec{q}}^{(1)}(s) F_{\vec{q}}^{AA}(t-s) ds, \quad (11.2-33)$$

onde $K_{\vec{q}}^{(1)}(t)$ é chamada função memória de primeira ordem e é dada por:

$$K_{\vec{q}}^{(1)}(t) = \frac{(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}, f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t)^*)}{(A_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*})} \quad (11.2-34)$$

a razão do nome função memória vem do fato de que ela mede como se pode ver em (11.2-33) o comportamento passado de $F_{\vec{q}}^{AA}(t)$.

A transformada de Laplace de (11.2-33) é:

$$F_{\vec{q}}^{AA}(z) = \frac{1}{z - i\omega_0 + K_{\vec{q}}^{(1)}(z)} \quad (11.2-35)$$

Inserindo-se o valor da função memória de primeira ordem $K_{\vec{q}}^{(1)}(t)$ em (11.2-5), tem-se :

$$\frac{d}{dt} A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) - i\omega_0 A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) + \int_0^t K_{\vec{q}}^{(1)}(t-s) A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(s) ds = f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-36)$$

onde

$$(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t), A_{\vec{q}}^{\rightarrow*}) = 0 \quad (11.2-37)$$

$$(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t_1), f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t_2)) = K_{\vec{q}}^{(1)}(t_1 - t_2) (A_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*}) \quad (11.2-38)$$

A equação (11.2-36) é uma equação de movimento exata para $A_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t)$ sendo chamada equação de Langevin generalizada. Pode-se reescrever a equação (11.2-35) como

$$F_{\vec{q}}^{AA}(z) = \frac{1}{z - i\omega_0 + \delta_1 F_{\vec{q}}^{(1)AA}(z)}, \quad (11.2-39)$$

com

$$\delta_1 = \frac{(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}, f_{\vec{q}}^{\rightarrow*})}{(A_{\vec{q}}^{\rightarrow}, A_{\vec{q}}^{\rightarrow*})} \quad (11.2-40)$$

e

$$F_{\vec{q}}^{AA(1)}(z) = \frac{(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t), f_{\vec{q}}^{\rightarrow*})}{(f_{\vec{q}}^{\rightarrow}, f_{\vec{q}}^{\rightarrow*})} \quad (11.2-41)$$

A equação de movimento de força aleatória é dada por

$$\frac{d}{dt} f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) = (1 - P) i L f_{\vec{q}}^{\rightarrow}(t) \quad (11.2-42)$$

que tem a mesma estrutura da equação de Heisenberg de movimento, se se coloca o operador linear $(1 - P) i L$ no lugar de iLt . Para deduzir (11.2-39) usa-se somente a equação de Heisenberg e a propriedade de Hermiticidade de L . A força aleatória ainda está no hiperplano ortogonal a $A_{\vec{q}}^{\rightarrow}$ e neste hiperplano o operador linear $(1 - P) i L$ ainda é Hermitiano. Assim pode-se escrever semelhantemente a equação (11.2-39)

$$F_{\vec{q}}^{AA(1)}(z) = \frac{1}{z - i\omega_1 + \delta_2 F_{\vec{q}}^{AA(2)}(z)}, \quad (11.2-43)$$

onde as grandezas ω_1 e $F_{\vec{q}}^{AA(2)}(z)$ e δ_2 são definidas de maneira análoga a (11.2-24), (11.2-40) e (11.2-41); $\delta_2 F_{\vec{q}}^{AA(2)}(z) = K_{\vec{q}}^{(2)}(t)$ é a função memória de segunda ordem. $F_{\vec{q}}^{AA(2)}(z)$ segue ainda o mesmo esquema e pode-se também deduzir uma equação semelhante para ela. Prosseguindo sucessivamente, encontra-se:

$$F_{\vec{q}}^{AA}(z) = \frac{1}{z - i\omega_0 + \frac{\delta_1}{z - i\omega_1 + \frac{\delta_2}{z - i\omega_2 + \dots}}}, \quad (11.2-44)$$

onde

$$\delta_n = \frac{(f_n, f_n^*)}{(f_{n-1}, f_{n-1})}, \quad (11.2-45)$$

$$i\omega_n = \frac{(iL f_n, f_n^*)}{(f_n, f_n^*)}; \quad (11.2-46)$$

f_n é a n-ésima força aleatória.

Fazendo-se $n \rightarrow \infty$, (11.2-44) torna-se uma fração continuada infinita. Esta fração continuada é especificada inteiramente pelos parâmetros δ_n e ω_n . O movimento coletivo de $A_{\vec{q}}(t)$ é determinado pelos polos desta fração continuada no plano complexo.

No nosso problema específico, estamos interessados em calcular o espectro das flutuações de polarização, isto é, $F_{\vec{q}}^{ZZ}(\omega)$. Para isso devemos usar a expressão (11.2-12) e portanto precisamos calcular

$F_q^{ZZ}(z)$ que é dada por (11.2-44). Torna-se então necessário calcular-se os δ_n e ω_n .

Pode-se mostrar (29) que os δ_n estão relacionados com os momentos da função espectral, isto é

$$\langle \omega^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F_q^{ZZ}(\omega) \omega^n d\omega \quad (11.2-47)$$

as relações são:

$$\delta_1 = \langle \omega^2 \rangle$$

$$\delta_1 \delta_2 = \langle \omega^4 \rangle - \langle \omega^2 \rangle^2 \quad (11.2-48)$$

$$\delta_2 \delta_3 = \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} - \left(\frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} \right)$$

O conhecimento de todos os momentos permite o cálculo exato da função $F_q^{ZZ}(\omega)$ pois ela pode ser expandida em termos dele da seguinte forma:

$$F_q^{ZZ}(t) = 1 + \frac{\langle \omega^2 \rangle}{2!} t^2 + \frac{\langle \omega^4 \rangle}{4!} t^4 + \dots$$

A fim de podermos calcular $F_q^{ZZ}(\omega)$, devemos ter uma maneira independente de (11.2-47) de calcular os momentos e esta maneira deve ser autoconsistente, isto é, quando levados em (11.2-47) com a respectiva função $F_q^{ZZ}(\omega)$ devem apresentar um resultado exato. Felizmente os momentos podem ser calculados a partir do Hamiltoniano, usando-se a fórmula⁽³⁰⁾:

$$\langle \omega^n \rangle_{AB} = \frac{(-1)^{m+1} \langle [H \dots] H, A [\dots], [H, \dots] H, B [\dots] \rangle}{(A, B)} \quad (11.2-49)$$

Outro problema prático que surge no uso do método das frações continuadas é que ela é infinita. Podemos adiantar que cálculos de momentos acima do quarto são muito difíceis de serem efetuados. Temos as sim de fazer um corte de alguma forma na fração infinita.

Em nosso trabalho, usaremos a aproximação de tres polos, a qual consiste em cortar a fração continuada no terceiro passo e fazendo com que o restante da fração seja igual a $1/\tau$, isto é:

$$F_{\vec{q}}^{ZZ}(z) = \frac{1}{z - i\omega_0 + \frac{\delta_1}{z - i\omega_1 + \frac{\delta_2}{z - i\omega_1 + \frac{1}{\tau}}}} \quad (11.2-50)$$

Usando-se a definição (11.2-46) e as relações de comutação dos operadores de pseudo-spin com o Hamiltoniano do MICT, podemos mos trar que $\omega_0 = \omega_1 = \omega_2 = 0$, de forma que

$$F_{\vec{q}}^{ZZ}(z) = \frac{1}{z + \frac{\delta_1}{z + \frac{\delta_2}{z + \frac{1}{\tau}}}} \quad (11.2-51)$$

A aproximação de três polos é equivalente a substituir a função memória de terceira ordem por uma constante independente de z mas não de \vec{q} . Esta terminação pode ser justificada se $K_{\vec{q}}^{(3)}(z)$ é uma função que varia lentamente com z e este é o caso quando $K_{\vec{q}}^{(3)}(t)$ decai rapidamente na escala de tempo do processo dinâmico. Por este motivo não devemos aplicar a aproximação à frequências muito altas. Um processo análogo consiste na substituição $K_{\vec{q}}^{(2)}(t) = \delta_1 e^{-t/\tau}$ na função memória de 2a ordem.

Usando-se as expressões (11.2-12) e (11.2-51) podemos es crever :

$$F_{\vec{q}}^{ZZ}(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} F_{\vec{q}}^{ZZ}(z = i\omega) =$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\tau \delta_1 \delta_2}{|\omega\tau (\omega^2 - \delta_1 - \delta_2)|^2 + (\omega^2 - \delta_1)^2} \quad (11.2-52)$$

A expressão (11.2-52) para a função $F_{\vec{q}}^{ZZ}(\omega)$ nos dá os três primeiros momentos coerentes, com a definição ($n = 0, 2, 4$) independentemente do valor de τ .

Outro problema prático de importância é a escolha de τ . Tommet e Huber⁽¹⁸⁾ baseados no fato de que para qualquer modelo físico no limite de altas temperaturas, com campos externos fortes a forma de linha é ressonante e nesse caso $\langle \omega^4 \rangle \approx \langle \omega^2 \rangle^2$ e que para pequenos \vec{q} , $\langle \omega^4 \rangle \gg \langle \omega^2 \rangle$ perto de T_c e a forma de linha é difusiva, propôs um valor para τ que interpolasse entre esses dois limites. O valor para τ proposto foi

$$\tau^{-1} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \left[\frac{\delta_2^{3/2}}{\delta_1 + \delta_2} + \frac{0.5 \delta_1^2 \delta_2^{-1/2}}{\delta_1 + \delta_2} \right] \quad (11.2-53)$$

Esse é o valor para τ que usaremos. No próximo capítulo faremos uma justificativa para seu uso.

Outro modo de se aplicar o método das frações contínuas quando se conhece apenas o segundo e o quarto momentos de densidade espectral, consiste em cortar a fração em $n = 2$ (20):

$$F_{\vec{q}}^{ZZ}(z) = \frac{z + K_{\vec{q}}^{(2)}(z)}{z^2 + z K_{\vec{q}}^{(2)}(z) + \delta_1} \quad (11.2-54)$$

e fazer para a função memória de 2ª ordem a aproximação gaussiana:

$$K_{\frac{1}{q}}^{(2)}(t) = \delta_2 e^{-\tau t^2}, \quad (11.2-55)$$

com a escolha

$$\tau = \frac{\pi^2}{8} \delta_2 \quad (11.2-56)$$

Esta escolha também foi feita, mas como há dificuldade de se determinar os polos porque a equação resultante do anulamento do denominador é de difícil solução⁽²⁰⁾, obtivemos assim resultados puramente qualitativos. É o que veremos no capítulo IV.

CAPÍTULO III

CÁLCULOS

Como já apresentamos na introdução o modelo de Ising com campo transversal é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -2\Omega \sum_i S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (III.1)$$

A fim de aplicar o método das frações continuadas é necessário introduzir os operadores de desvio de spin, definidos como

$$\begin{aligned} \tau_i^x &= S_i^x - \langle S_i^x \rangle \\ \tau_i^y &= S_i^y - \langle S_i^y \rangle = S_i^y \\ \tau_i^z &= S_i^z - \langle S_i^z \rangle \end{aligned} \quad (III.2)$$

Como podemos ver as médias dos novos operadores são nulas. Substituindo-se (III.2) em (III.1) e desprezando-se os termos constantes uma vez que eles só alteram os valores absolutos dos níveis de energia, não influenciando a dinâmica do sistema, encontramos

$$H = -2\Omega \sum_i \tau_i^x - J \langle S^z \rangle \sum_i \tau_i^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \tau_i^z \tau_j^z,$$

$$\text{onde } J = \sum_i J_{ij}.$$

Sejam agora

$$\tau_q^\alpha = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \tau_i^\alpha \quad (\alpha = x, y, z) \quad (III.4)$$

as transformadas de Fourier espaciais das componentes dos operadores τ_i^α . Levando-se (III.4) em (III.3) e tendo-se em conta a definição

$$\vec{J}_q = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} J_{ij}, \quad (111.5)$$

encontramos

$$H = -2\Omega \tau_0^x - J \langle S^z \rangle \tau_0^z - \frac{1}{2N} \sum_q J_q \tau_q^z \tau_{-q}^z. \quad (111.6)$$

Usando-se o Hamiltoniano (111.6) e a formula (11-2-49) calculamos (APENDICE I) o segundo e o quarto momento da função espectral, encontrando

$$\langle \omega_k^2 \rangle^{zz} = \frac{2N \Omega \langle S^x \rangle}{(\tau_k^z, \tau_{-k}^z)} \quad (111.7)$$

$$\langle \omega_k^2 \rangle^{zz} = \frac{1}{(\tau_k^z, \tau_{-k}^z)} \{ 8N\Omega^3 \langle S^x \rangle + 4N\Omega^2 J \langle S^z \rangle^2 - 4\Omega^2 J_k \langle S^x \rangle^2 N + \frac{4\Omega^2}{N} \sum_q J_q [\langle \tau_q^z \tau_{-q}^z \rangle - \langle \tau_{k+q}^x \tau_{-k-q}^x \rangle] \}. \quad (111.8)$$

Os segundo e quarto momentos assim calculados são exatos.

Para as médias térmicas dos operadores $\langle S^x \rangle$ e $\langle S^z \rangle$ que aparecem nas expressões exatas do segundo e quarto momento (111.7) e (111.8) são usadas as expressões na aproximação do campo molecular, na região a baixo da temperatura crítica,

$$\langle S^x \rangle = \frac{2\Omega}{J} \quad (111.9)$$

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{J \langle S^z \rangle}{\sqrt{4\Omega^2 + J^2 \langle S^z \rangle^2}} \operatorname{tgh} \left(\frac{1}{2} \frac{\sqrt{4\Omega^2 + J^2 \langle S^z \rangle^2}}{KT} \right) \quad (111.10)$$

As funções correlações $\langle S_k^z S_{-k}^z \rangle$ e $\langle S_k^x S_{-k}^x \rangle$ que aparecem no quarto momento, foram calculadas por meio de funções de Green na

aproximação das fases aleatórias (RPA) a qual consiste em desprezar as flutuações nas médias térmicas dos operadores envolvidos e para seus valores encontramos

$$\langle S_k^z S_{-k}^z \rangle = \frac{N\Omega \langle S^z \rangle}{\omega_k} \left[\frac{e^{-i\omega_k t}}{e^{\beta\omega_k - 1}} - \frac{e^{i\omega_k t}}{e^{-\beta\omega_k - 1}} \right] \quad (III-11)$$

$$\langle S_k^x S_{-k}^x \rangle = \frac{NJ \langle S^z \rangle^2}{2\omega_k} \left[\frac{e^{i\omega_k t}}{e^{\beta\omega_k - 1}} - \frac{e^{-i\omega_k t}}{e^{-\beta\omega_k - 1}} \right] \quad (III-12)$$

A função de relaxação (S_q^z, S_q^{z+}) que aparece nas expressões do segundo e quarto momento foi também calculada a partir da função correlação (III.11). Seu cálculo é feito no APENDICE II e vale

$$\langle S_k^z, S_{-k}^z \rangle = \frac{2N\Omega \langle S^x \rangle}{\omega_k^2} \quad (III-13)$$

Levando-se (III.9) a (III.13) em (III.7) e (III.8) podemos calcular os momentos para vários valores dos parâmetros $\alpha = \frac{2\Omega}{J}$ e

$\gamma = \frac{T}{T_c}$ onde T_c é a temperatura crítica.

Em seguida usamos os valores desses momentos no cálculo dos parâmetros δ_1 e δ_2 dadas por

$$\delta_1 = \langle \omega^2 \rangle \quad (III-14)$$

$$\delta_2 = \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} - \langle \omega^2 \rangle \quad (III-15)$$

Levando-se esses valores na expressão

$$F_{\vec{q}}^{ZZ}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\tau \delta_1 \delta_2}{[\tau(\omega^2 - \delta_1 - \delta_2)]^2 + (\omega^2 - \delta_1)^2}$$

com o corte

$$\tau^{-1} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \left[\frac{\delta_2^{3/2}}{\delta_1 + \delta_2} + 0,5 \frac{\delta_1 \delta_2^{-1/2}}{\delta_1 + \delta_2} \right] \quad (III.d6)$$

Embora esse corte tenha sido originalmente proposto para temperaturas altas porque ele foi deduzido como resultado de uma interpolação entre dois tipos de comportamento, um na região crítica e outro em $T = \infty$, nós podemos usá-lo para baixas temperaturas pois ele nos dá uma realidade dois comportamentos limites conforme sejam os valores de $\langle \omega^2 \rangle$ e $\langle \omega^4 \rangle$. Se a relação $\frac{\langle \omega^2 \rangle^2}{\langle \omega^4 \rangle} = r$ for $r \approx 1$ teremos um caráter ressonante e para $r \approx 0$ teremos um $\langle \omega^4 \rangle$ comportamento difusivo.

Nos cálculos numéricos foi considerada uma rede cúbica simples e a interação somente entre vizinhos mais próximos, isto é

$$J_q = \frac{J}{3} (\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z)$$

Os cálculos foram realizados para o vetor de onda $\vec{q} = 0$ que é o modo crítico; o único que nos dá transição, pois é o único modo que se anula quando alcançamos a temperatura crítica por baixo. Os resultados são apresentados no próximo capítulo.

CAPÍTULO IV-

RESULTADOS E CONCLUSÕES

Iniciamos o capítulo com a apresentação dos resultados sintetizados em treze figuras e uma tabela. Nas figuras (IV-1) a (IV-10) apresentamos o espectro das flutuações na polarização para uma faixa de frequências que vai de 0 a 5 em unidades de frequência de tunelamento Ω . As intensidades nessas figuras são normalizadas à intensidade máxima. As figuras (IV-1), (IV-2) e (IV-3) são aquelas para uma relação $\alpha = \frac{2\Omega}{J} = \frac{1}{3}$ e temperaturas $\gamma = \frac{T}{T_C} = 0,01; 0,25$ e $0,5$ respectivamente.

As figuras (IV-4), (IV-5), (IV-6) e (IV-7) são aquelas para $\gamma = 0,25$ e α variável, respectivamente $1/3, 1/4, 1/5$ e $1/6$.

Já as figuras (IV-8), (IV-9) e (IV-10) para uma relação $\alpha = 1/4$ se encontram na faixa de temperaturas correspondentes a $\gamma = 3/4, 7/8$ e $15/16$.

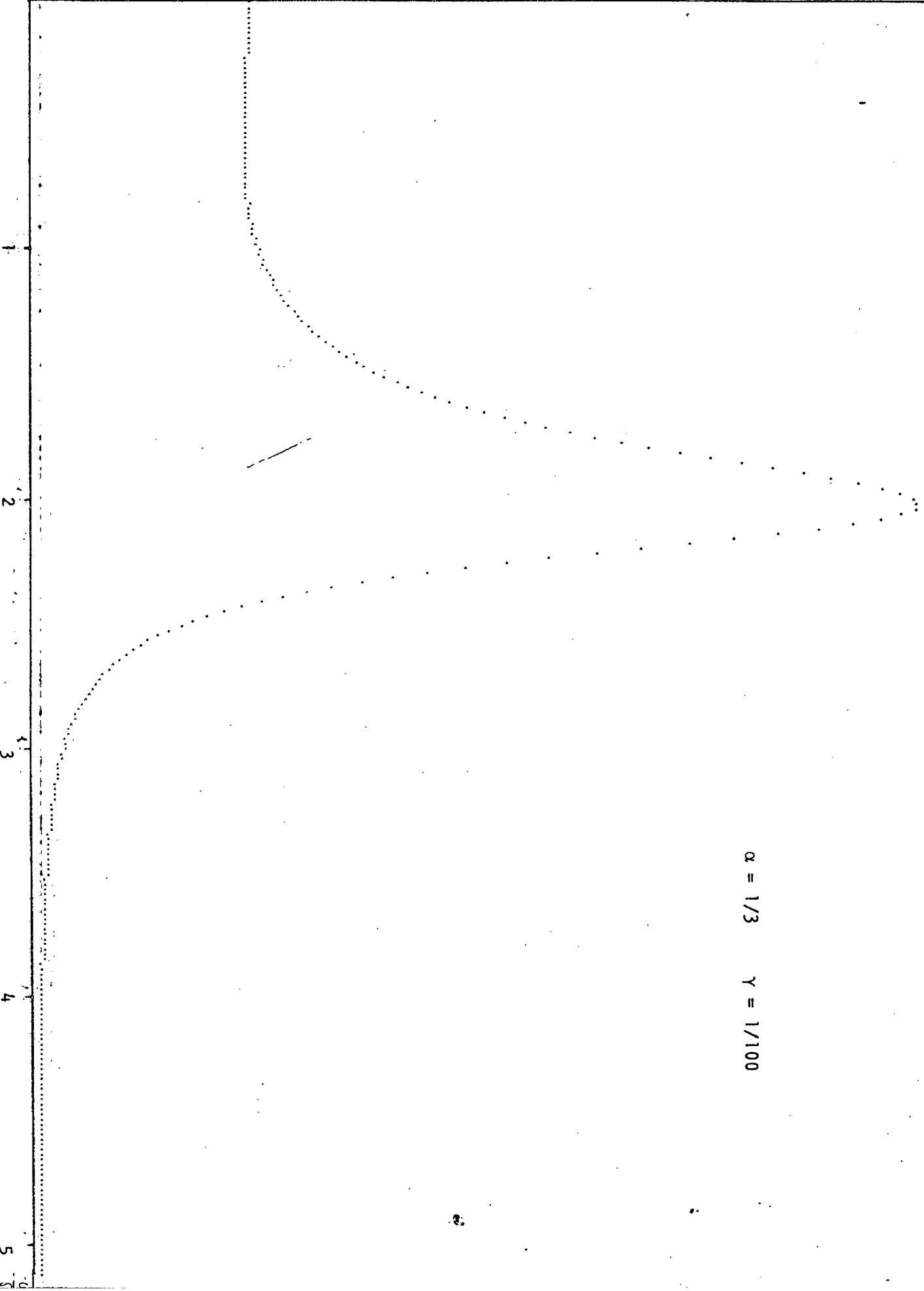
As figuras (IV-11), (IV-12), (IV-13) e (IV-14) representam os gráficos respectivamente de frequência do modo "Soft" ω_2 , largura do modo central Γ_1 , largura do modo "Soft" Γ_2 e largura relativa (largura do modo central/largura do modo "Soft") em função do parâmetro α para vários valores de γ . A tabela (IV-1), para a relação $\alpha = 1/4$ nos dá valores de Γ_1 (largura do modo central), Γ_2 (largura do modo "Soft"), ω_2 (frequência do modo "Soft"), γ (largura relativa) e β (intensidade relativa alguns valores de γ).

Passemos agora a alguns comentários a respeito das figuras acima descritas.

Observando-se as figuras (IV-1), (IV-2) e (IV-3) verificamos que para uma mesma relação α a medida que aproximamos da temperatura crítica, o modo "Soft" caracterizado pelo pico ressonante, caminha para a frequência zero enquanto que o modo central aumenta de intensidade. Isto pode ser visto de modo dramático se observarmos as figuras (IV-8), (IV-9) e

b (m)

Unidades Arbitrárias



$\alpha = 1/3$ $\gamma = 1/100$

FIGURA (a)

$F_{\frac{z}{q}}(\omega)$

Unidades Arbitrárias

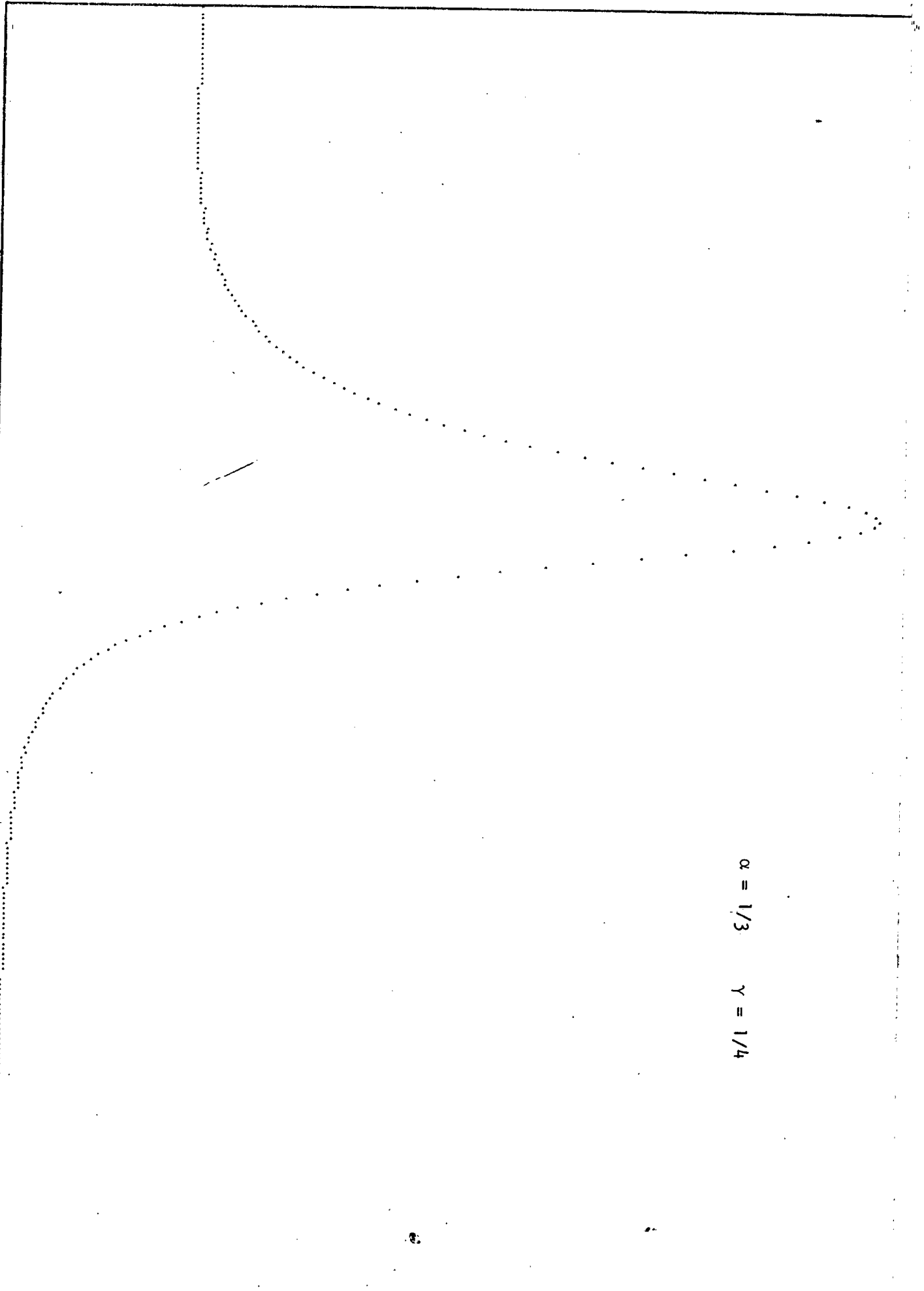
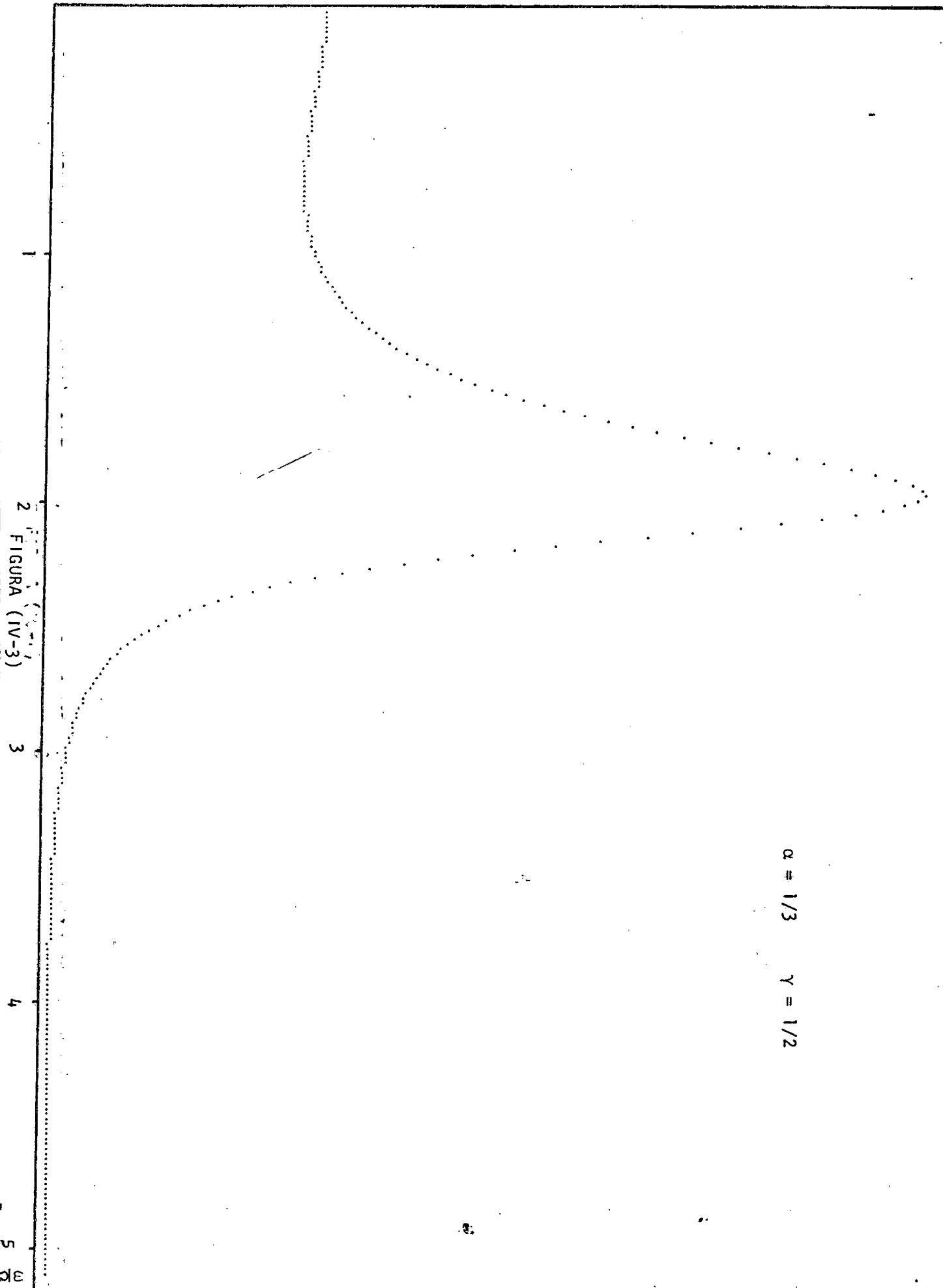


FIGURA (IV-2)

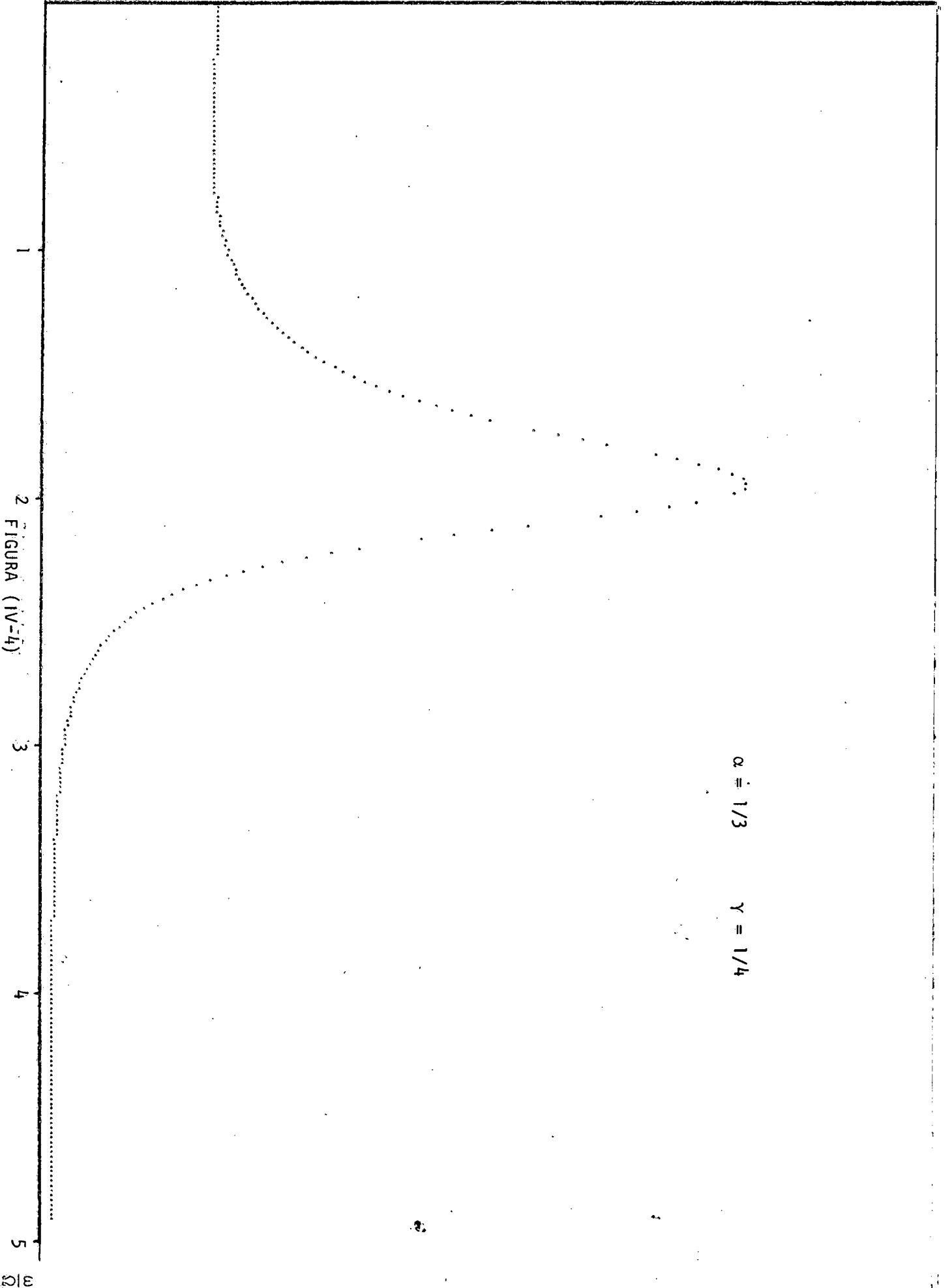
5 ω

$F_{\frac{Z}{q}}^Z(\omega)$

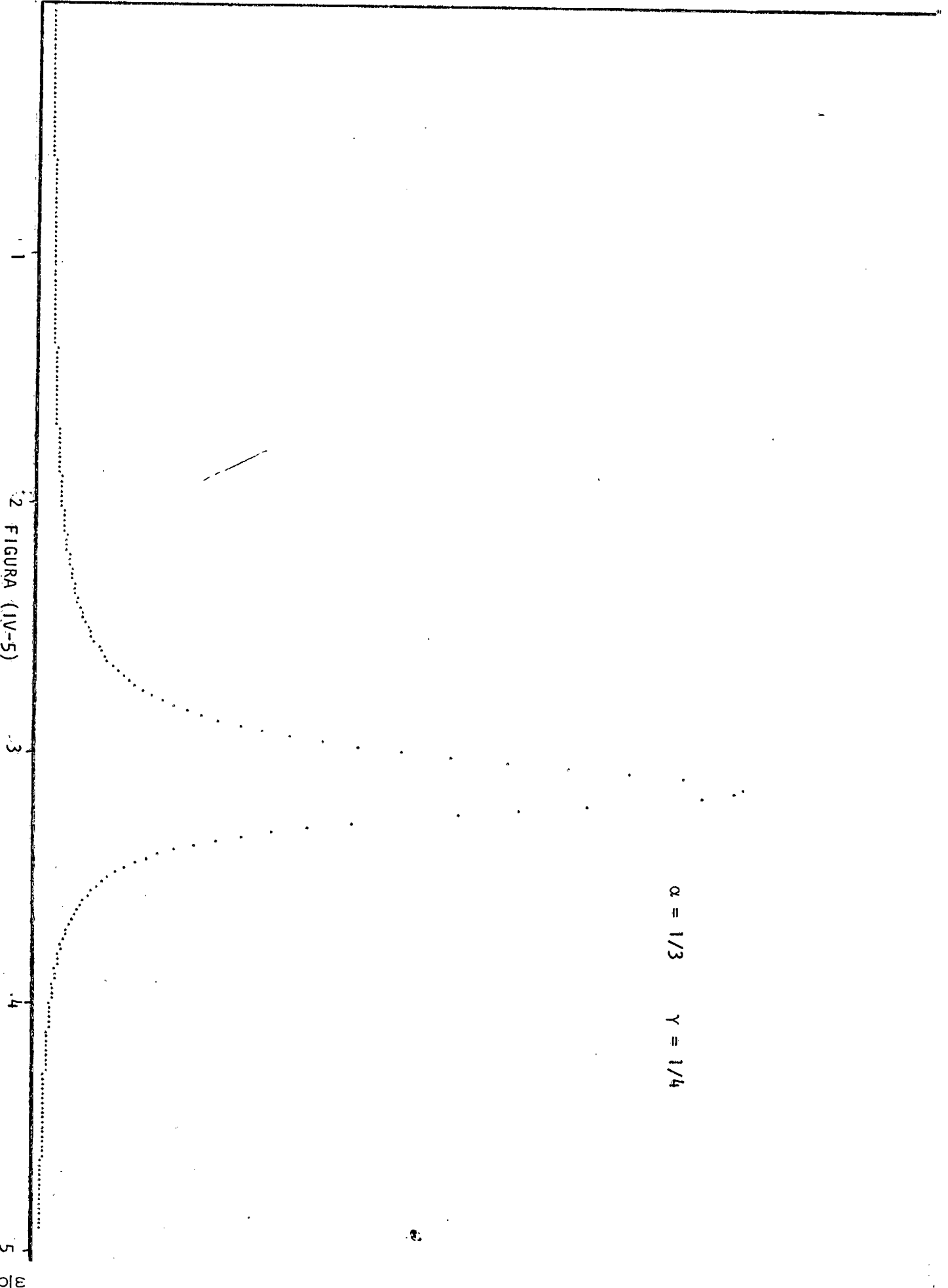
Unidades Arbitrárias



Unidades Arbitrárias



Unidades Arbitrárias



2 FIGURA (IV-5)

Unidades Arbitrárias

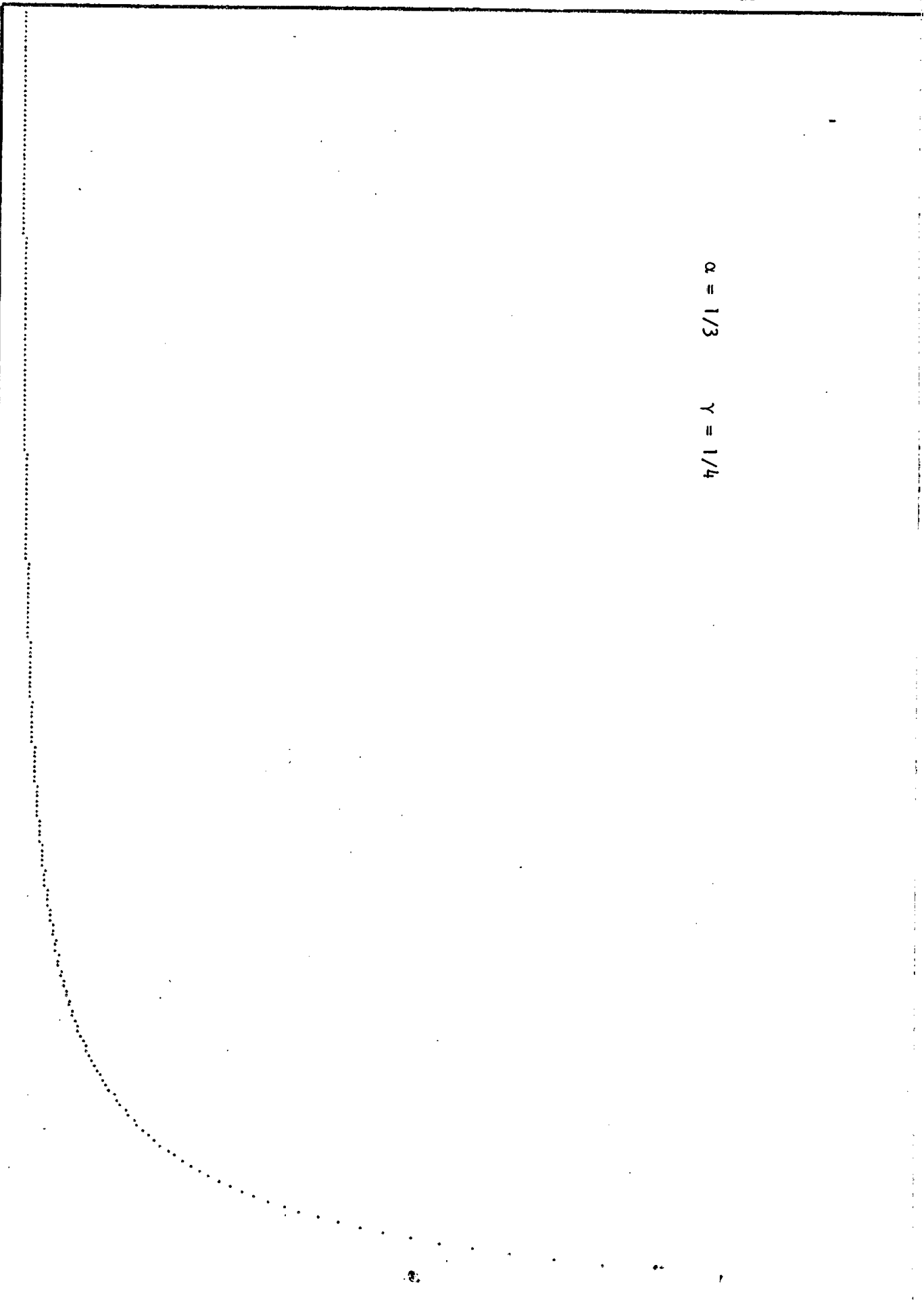
$\alpha = 1/3$ $\gamma = 1/4$

1
2
3
4
5

FIGURA (IV-6)

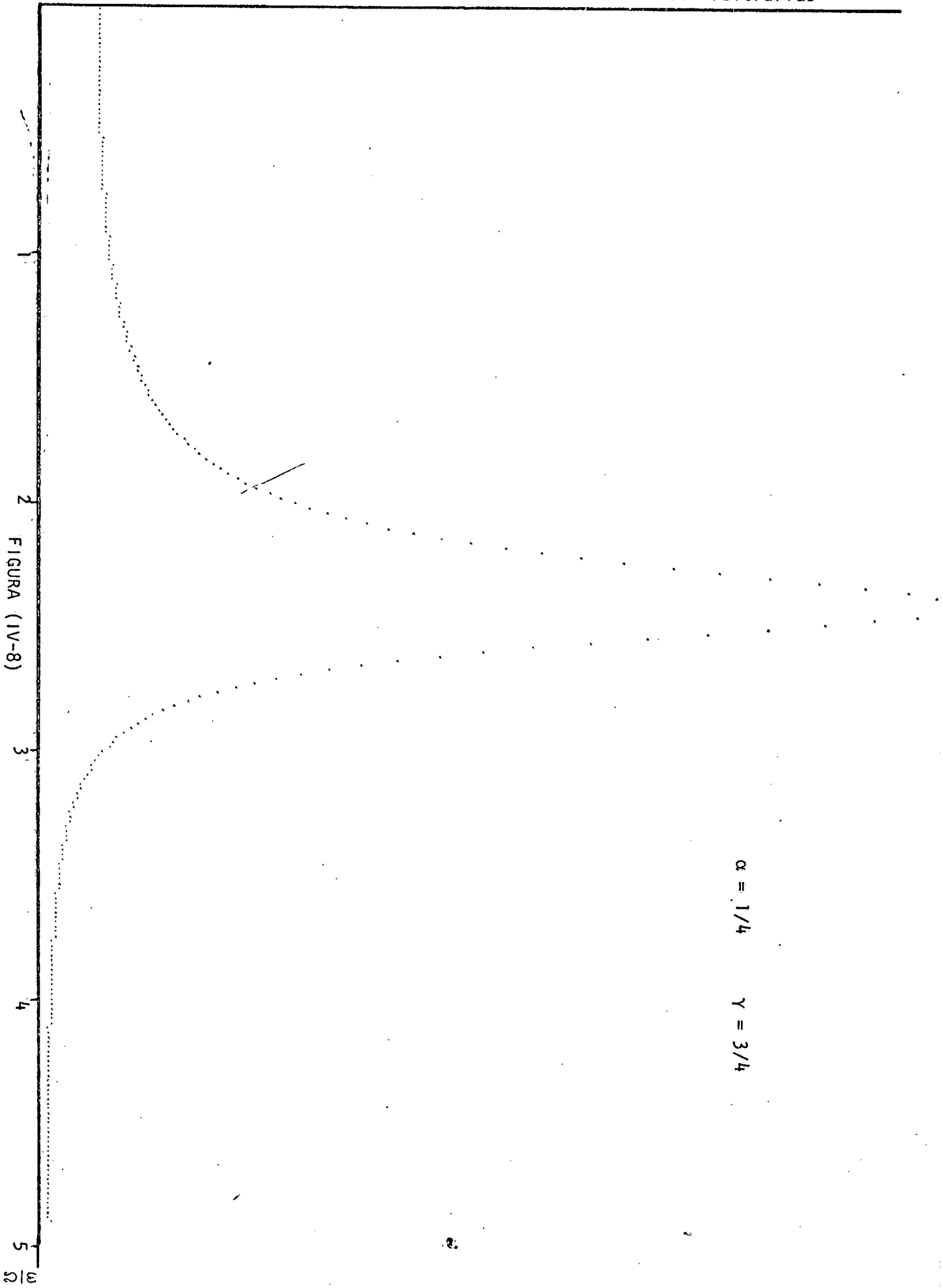
Unidades Arbitrarias

$\alpha = 1/3$ $\gamma = 1/4$



2 FIGURA (IV-7)

Unidades Arbitrarias



Unidades Arbitrarias

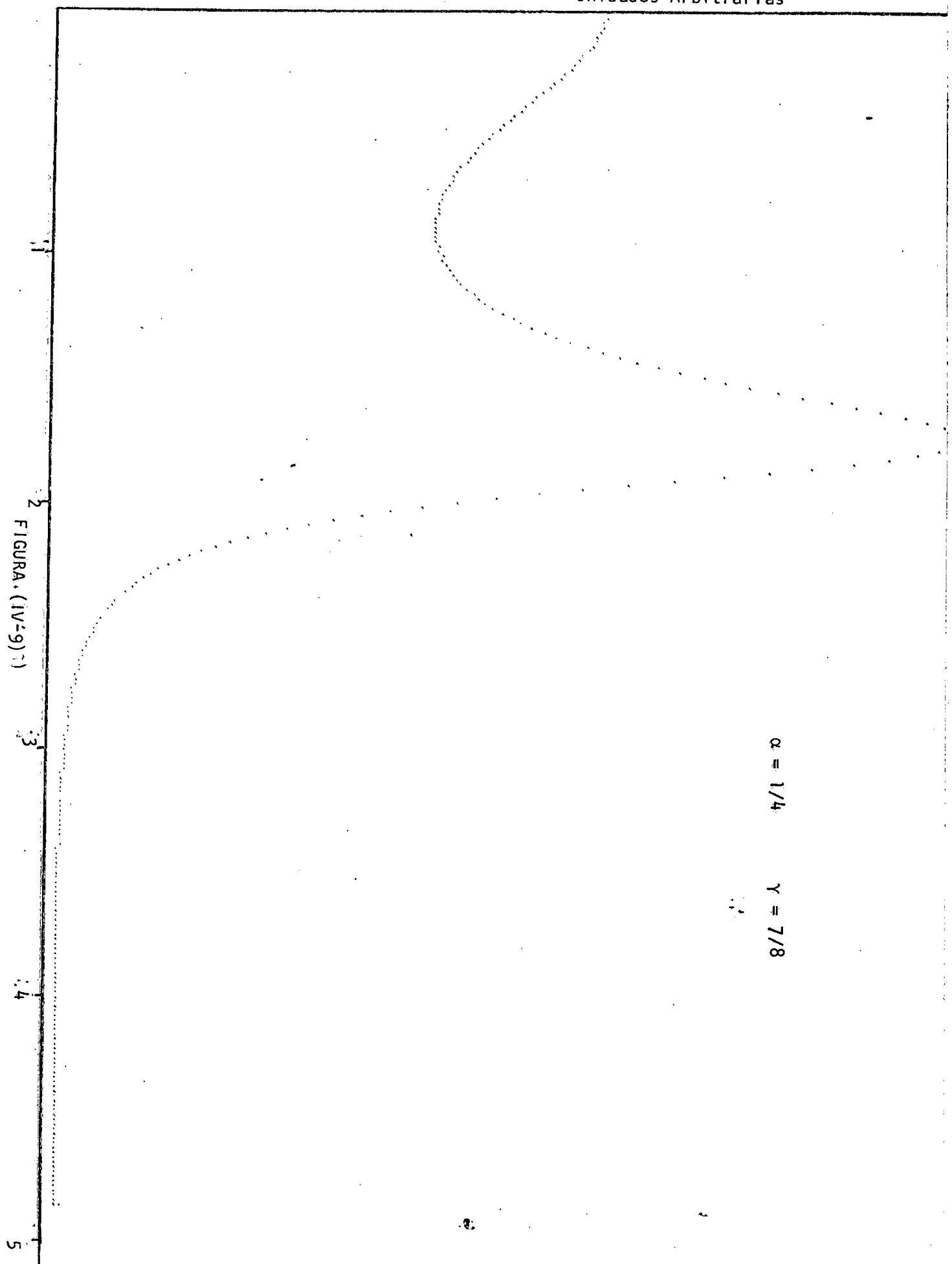
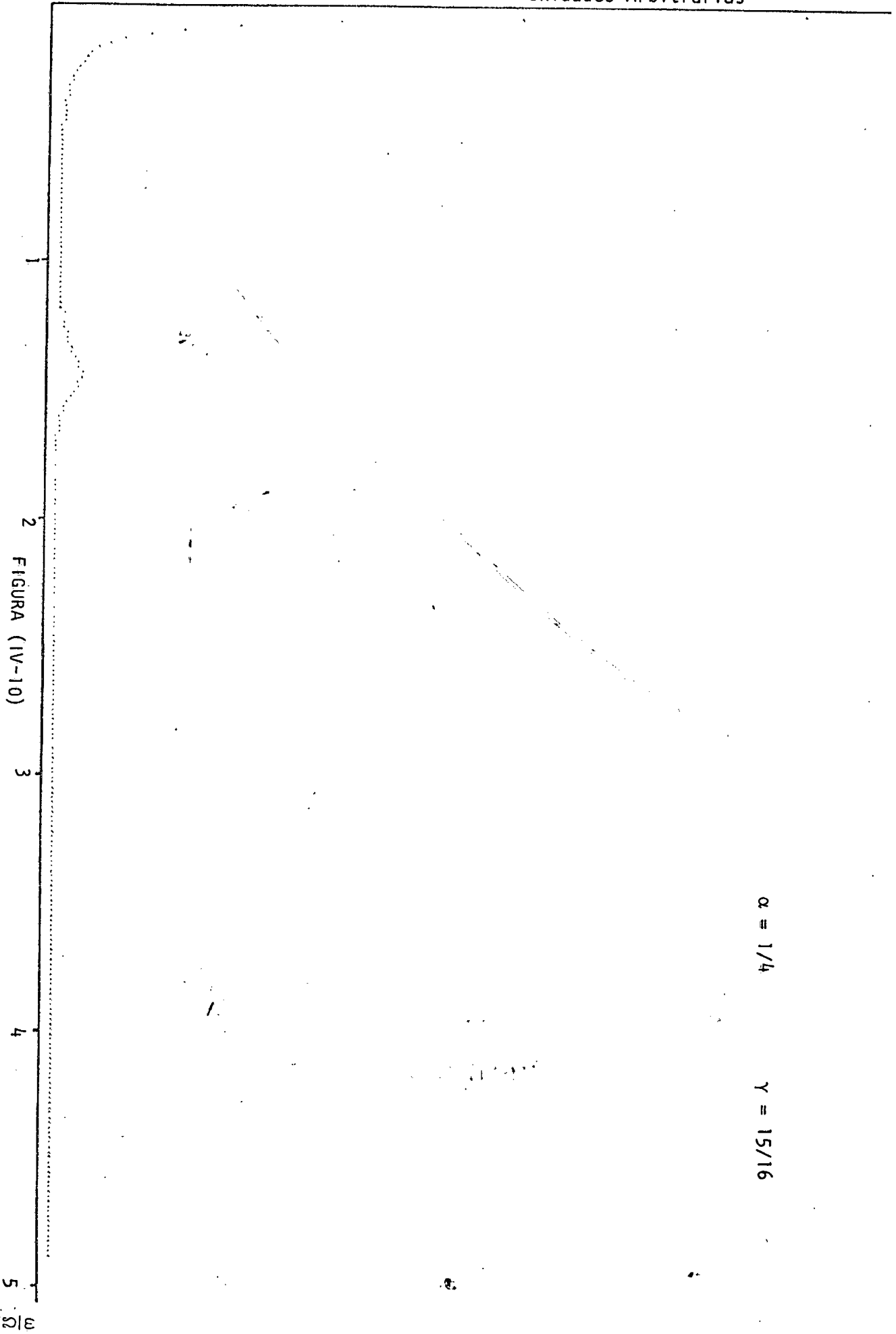


FIGURA. (IV-9)

$F_{ZZ}^q(\omega)$

Unidades Arbitrarias



$\alpha = 1/4$

$\gamma = 15/16$

FIGURA (IV-10)

ω

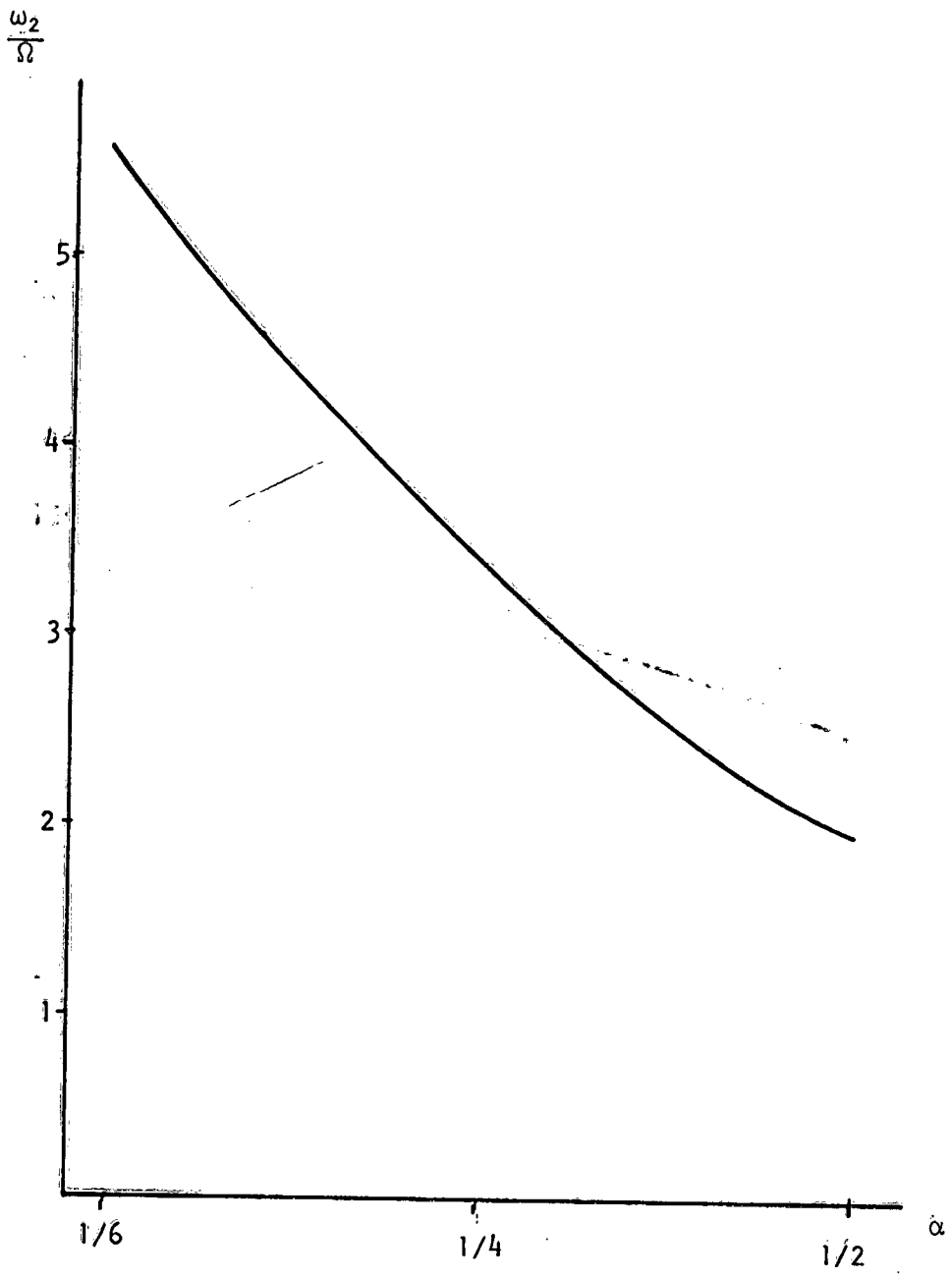


FIGURA (IV-11)

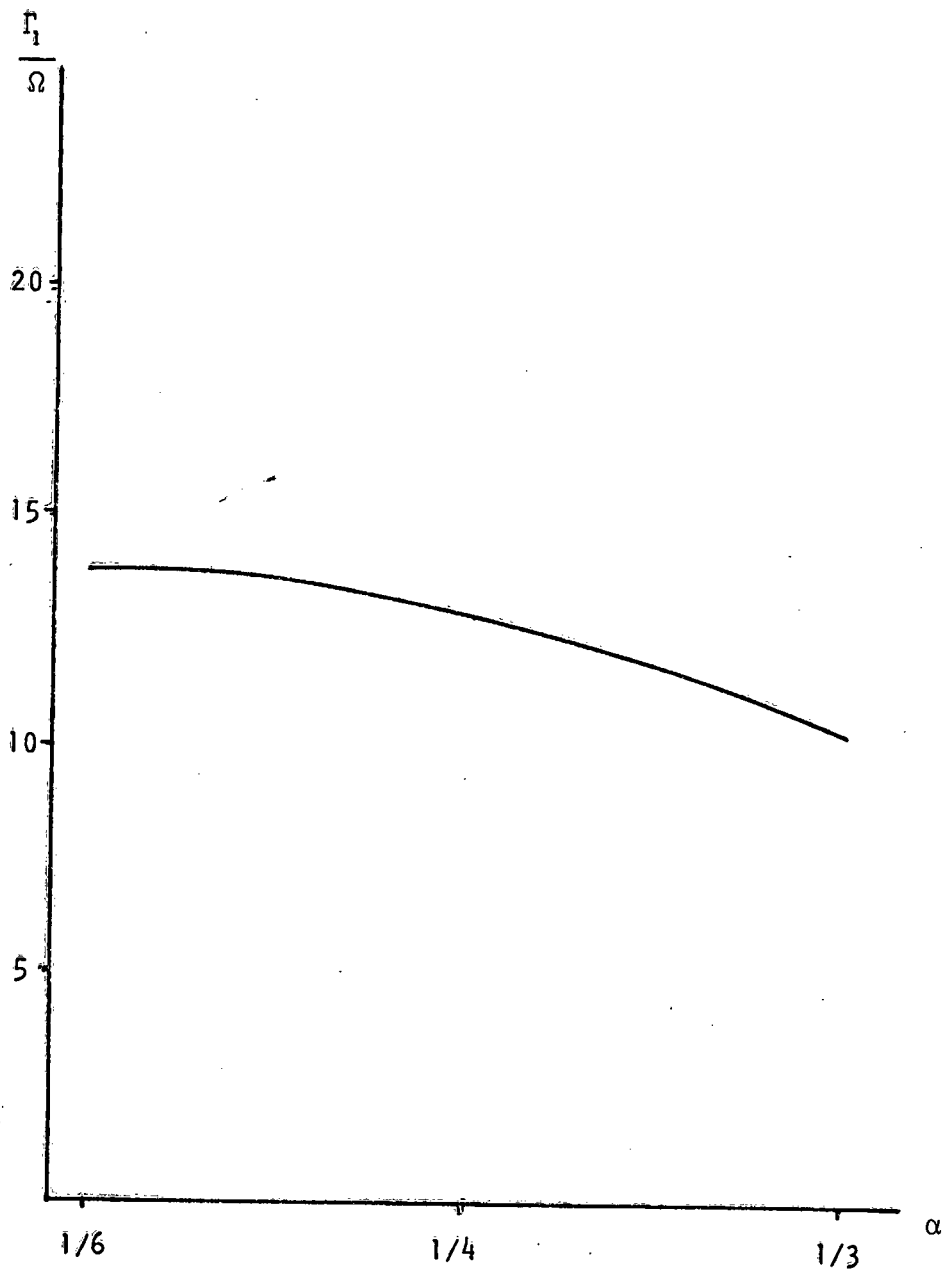


FIGURA (IV-12)

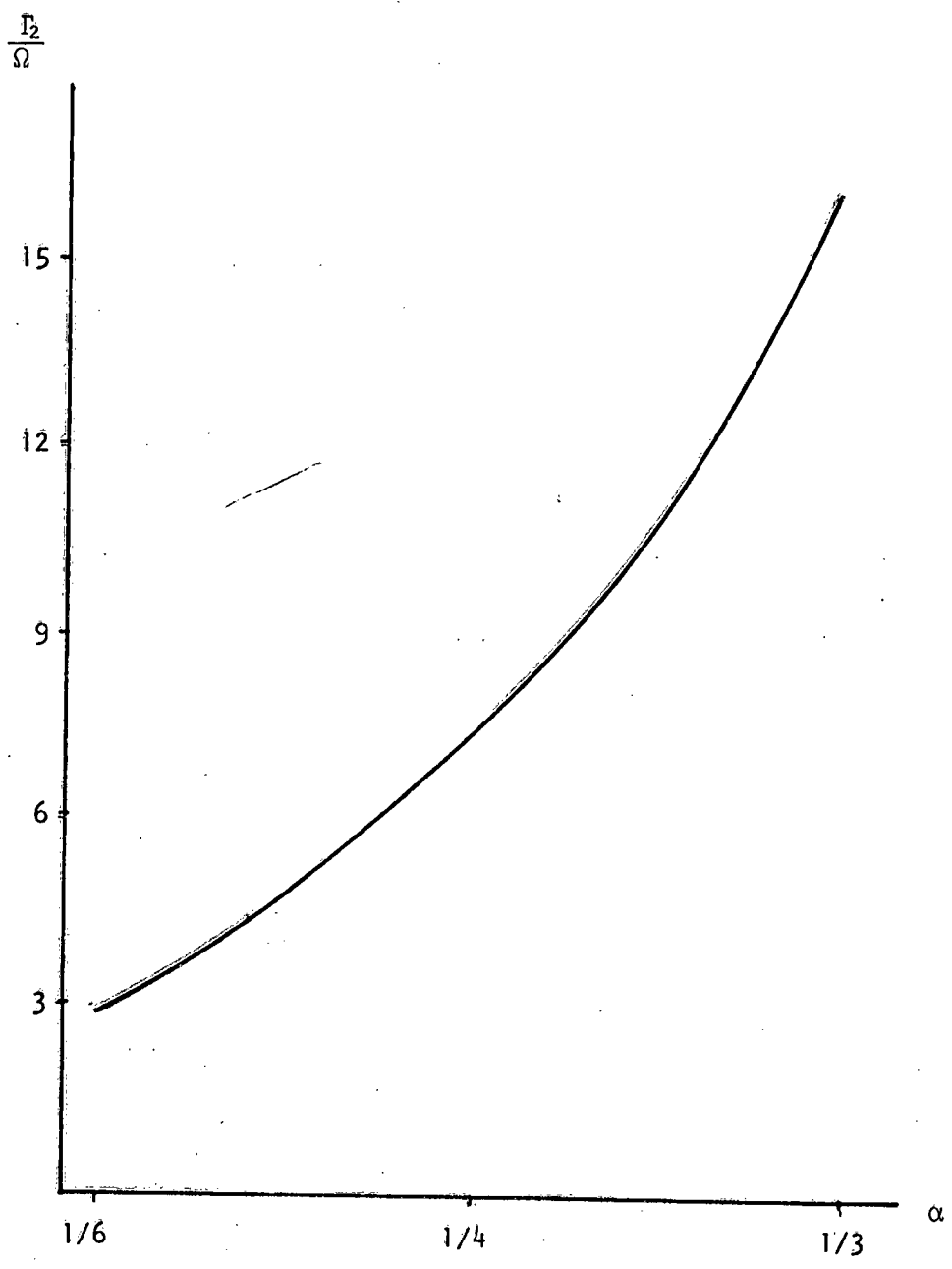


FIGURA (IV-13)

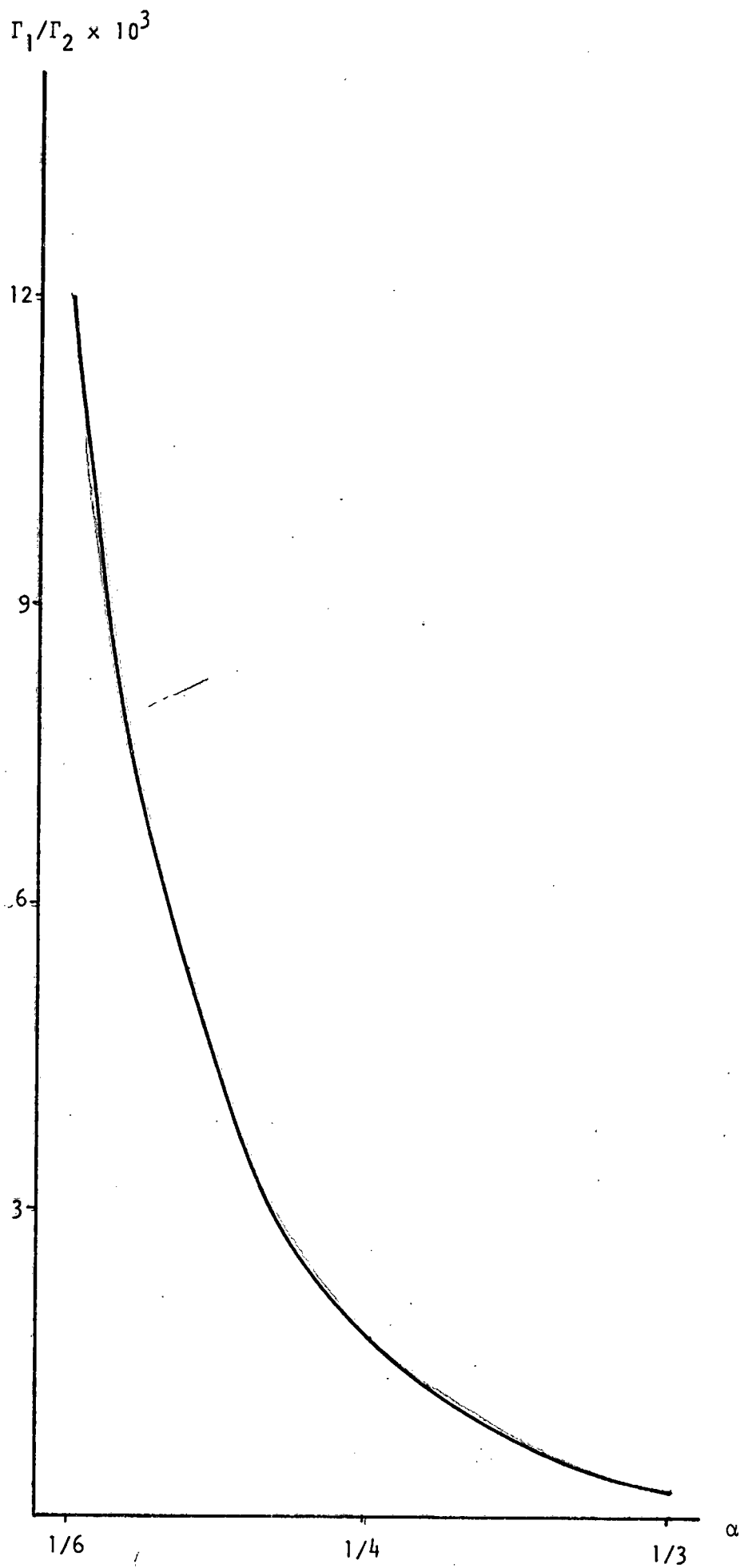


FIGURA (IV-14)

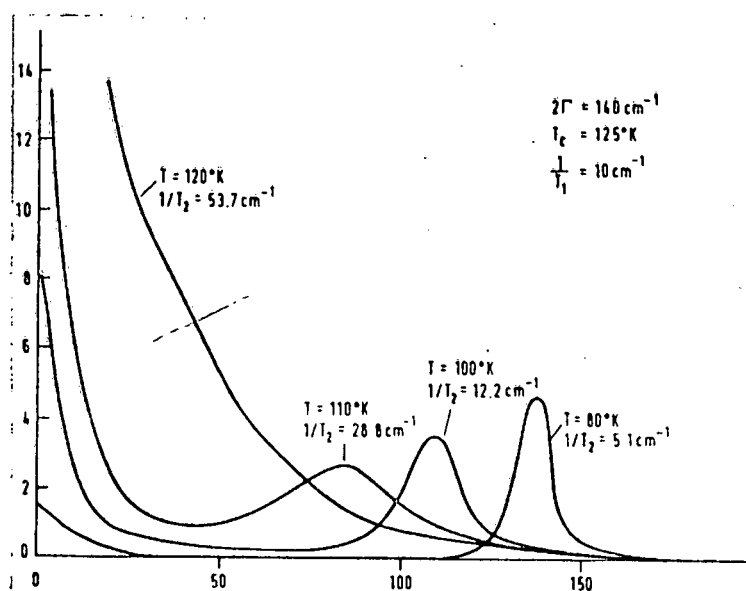


FIGURA (IV-15) - Dependência com a temperatura do espectro das flutuações do parâmetro de ordem calculado usando-se as equações de Bloch (Blinc et al ⁽²⁾).

γ	Γ_1	Γ_2	ω_2	Γ_1/Γ_2	I_1/I_2
1/8	245	7,13	162	34,36	$0,11 \times 10^{-1}$
1/4	245	7,13	162	34,36	$0,11 \times 10^{-1}$
1/2	223	7,63	156	29,23	$0,14 \times 10^{-1}$

TABELA (IV-1)

(IV-10) na faixa de temperatura mais próxima da crítica. Cabem aqui dois comentários:

1 . Como picos na RPA, temos tres frequências caracterís-
ticas; uma $\omega_1 = 0$ e as duas outras

$$\omega_{2,3}^2 = 2\Omega (2\Omega - J_q \langle S^x \rangle) + J^2 \langle S^z \rangle^2 \quad (IV-1)$$

Para o modo $\vec{q} = 0$, que é o único modo crítico em baixas temperaturas e usando o valor de $\langle S^x \rangle = \frac{2\Omega}{J}$ nessa região, podemos resumir a equação (IV-1) como

$$\omega_{2,3} = J \langle S^z \rangle \quad (IV-2)$$

a frequência $\omega = 0$ correspondendo nas nossas figuras ao modo central. E a frequência $\omega_{2,3} = J \langle S^z \rangle$ ao modo ressonante "Soft".

Na R.P.A., como não temos amortecimento o espectro seria constituído de tres deltas de Dirac, um na frequência $\omega_1 = 0$ e os outros dois em $\omega_2 = -J \langle S^z \rangle$ e $\omega_3 = J \langle S^z \rangle$. À medida que caminhamos para a temperatura crítica $\langle S^z \rangle$ caminha para zero, o que provoca a fusão dos modos em um único central, no nosso caso correspondendo ao intenso pico mostrado na figura (IV-10). Note ainda o "amolecimento" do modo "Soft" mostrado na figura (IV-10) como a diminuição de intensidade do pico ressonante.

2 . Na realidade os resultados mostrados nas figuras (IV-8), (IV-9) e (IV-10) só são válidos qualitativamente, já que na região de temperaturas em que eles se encontram ocorre o seguinte: Pode-se mostrar que⁽³¹⁾

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \frac{d \langle S^z \rangle}{d\beta} = (\tau_q^z, E_q^*) \quad (IV-3)$$

onde E_q é o operador densidade de energia

$$E_q = -2\Omega \tau_q^x - J \langle S^z \rangle \tau_q^z - \frac{1}{2N} \sum_{q'} J_{q'} \tau_{q'}^z \tau_{q-q'}^z \quad (IV-4)$$

No caso do primeiro membro da equação (IV-3) ser diferente de zero teremos um acoplamento entre as flutuações na polarização e as flutuações na densidade de energia, acoplamento esse que não foi levado em conta em nossos cálculos e isto pode mascarar os resultados quantitativamente. A decisão sobre a importância deste acoplamento esta sendo levada em conta com a devida generalização pelo nosso grupo. Nas regiões de temperaturas das figuras restantes no entanto, $\langle S^z \rangle$ varia muito lentamente e portanto $(\tau_q^z, E_q^*) = 0$. O inconveniente de só trabalharmos na região de temperaturas em que $\langle S^z \rangle$ varia lentamente é que como podemos verificar nos dados da tabela (IV-1) eles são quase que independentes da temperatura como era de se esperar.

Podemos verificar ainda, observando-se as figuras (IV-4) (IV-5), (IV-6) e (IV-7) que, para uma mesma temperatura a medida que α aumenta, menor é a frequência do modo "Soft".

Da análise das figuras (IV-11), (IV-12), (IV-13) e (IV-14) podemos verificar o seguinte comportamento geral: Para uma dada temperatura a frequência do modo "Soft" diminui com a relação a α , o mesmo ocorrendo com a largura do modo central Γ_1 . Já a largura do modo "Soft" aumenta com o aumento de α . A razão largura do modo central/largura do modo "Soft" aumenta para uma dada temperatura com a diminuição de α . Esse comportamento geral coincide com o obtido usando-se equações de Bloch por Binc et al⁽²⁾, como se pode ver na figura (IV-15).

Cabe salientarmos ainda o fato de nos restringirmos a valores de α entre 1/6 e 1/2. Se Ω for muito pequeno, qualquer frequência ω será $\omega \gg \Omega$ e o corte τ independente da frequência não será um bom corte. Por outro lado, a medida que Ω cresce, a temperatura crítica se aproxima de zero; para $\alpha > 1/2$ não mais teremos transição de fase.

Como salientamos na introdução, foram feitos também cálculos usando-se a aproximação Gaussiana. Os espectros deram o mesmo comportamento qualitativo que na aproximação de tres polos. Não foi porém possível fazer uma análise dos polos porque a equação que os determina é de difícil solução mesmo no computador.

A fim de podermos aplicar os nossos cálculos ao KDP é necessário que façamos a generalização do problema incluindo o acoplamento citado entre as flutuações na polarização com as flutuações na densidade de energia.

Resumindo : abaixo de T_c , o espectro das flutuações na polarização é constituído de dois picos: um modo central do tipo Debye centrado em $\omega = 0$ (o qual corresponde ao modo $\omega_1 = 0$ na R.P.A., que é um modo longitudinal. Isto é devido a um movimento na direção do campo molecular) e um modo "Soft" subatenuado, dependente da temperatura em frequências mais altas (que corresponde ao modo $\omega_{2,3} = J \langle S^2 \rangle$ de R.P.A. o qual representa excitações transversais e descreve a precessão livre dos spins em redor do campo molecular). Quando aproximamos T_c por baixo os dois picos fundem-se e como resultado aparece um único modo superamortecido.

APENDICE I

CÁLCULO DO 2º MOMENTO

Temos

$$\langle \omega_k^2 \rangle^{zz} = \frac{\langle | [\tau_k^z, H], \tau_{-k}^z | \rangle}{(\tau_k^z, \tau_{-k}^z)} \cdot (-1)^{m+1} \quad (A1-1)$$

onde

$$[\tau_k^z, H] = -2\Omega i \tau_k^y \quad (A1-2)$$

e

$$| [\tau_k^z, H], H | = 2\Omega (\tau_0^x + \langle S^x \rangle N) \quad (A1-3)$$

Substituindo (A1-3) em (A1-1); vem portanto

$$\langle \omega_k^2 \rangle^{zz} = \frac{2\Omega N \langle S^x \rangle}{(\tau_k^z, \tau_{-k}^z)}$$

CÁLCULO DO 4º MOMENTO

Temos

$$\langle \omega_k^4 \rangle^{zz} = \frac{\langle | | [\tau_k^z, H], H |, [\tau_{-k}^z, H] | \rangle}{(\tau_k^z, \tau_{-k}^z)} \cdot (-1)^{m+1} \quad (A1-4)$$

Também aqui, nosso trabalho consiste no cálculo das relações de comutação que aparecem no numerador de (A1-4).

$$[\tau_k^z, H] = -2i \Omega \tau_k^y; \quad (\text{A1-4'})$$

$$\begin{aligned} |[\tau_k^z, H], H| &= -2i \Omega \{-2\Omega [\tau_k^y, \tau_0^x] - J \langle S^z \rangle [\tau_k^y, \tau_0^z] - \\ &- \frac{1}{2N} [\tau_k^y, \sum_q J_q \tau_q^z \tau_{-q}^z]\}; \end{aligned} \quad (\text{A1-6})$$

$$\begin{aligned} |[\tau_k^z, H], H| &= 4\Omega^2 \tau_k^z + 4\Omega^2 \langle S^z \rangle N \delta_{k,0} - \\ &- 2\Omega J \langle S^z \rangle \tau_k^x - 2\Omega \langle S^z \rangle \langle S^x \rangle N \delta_{k,0} + \\ &+ \frac{i\Omega}{N} \sum_q J_q i \tau_{k+q}^x \tau_{-q}^z + \frac{i\Omega}{N} \sum_q J_q i \langle S^x \rangle \\ &N \tau_{-q}^z \delta_{k+q,0} + \frac{i\Omega}{N} \sum_q J_q i \tau_q^z \tau_{k-q}^x + \\ &+ \frac{i\Omega}{N} \sum_q J_q i \tau_q^z \langle S^x \rangle N \delta_{k-q,0} \end{aligned} \quad (\text{A1-7})$$

$$[\tau_{-k}^z, H] = -2i \Omega \tau_{-k}^y; \quad (\text{A1-8})$$

$$\begin{aligned} |[\tau_k^z, H], H|, [\tau_{-k}^z, H] &= -8\Omega^3 \tau_0^x - 8\Omega^3 \langle S^x \rangle N - \\ &- 4\Omega^2 J \langle S^z \rangle \tau_0^z - 4\Omega^2 J \langle S^z \rangle^2 N + 4\Omega^2 \langle S^x \rangle J_k \cdot \\ &\cdot (\tau_{-2k}^x + \langle S^x \rangle N) - \frac{4\Omega^2}{N} \sum_q J_q \tau_q^z \tau_{-q}^z - 4\Omega^2 \langle S^z \rangle J \tau_0^z + \\ &+ \frac{4\Omega^2}{N} \sum_q J_q \tau_{k+q}^x \tau_{-k-q}^x + 4\Omega^2 \langle S^x \rangle \tau_0^x \end{aligned} \quad (\text{A1-9})$$

Substituindo (A1-9) em (A1-4) vem

$$\begin{aligned}
\langle \omega_k^y \rangle^{zz} = & \{ 8N \Omega^3 \langle S^x \rangle + 4N \Omega^2 J \langle S^z \rangle^2 - 4\Omega^2 J_k \langle S^x \rangle^2 N + \\
& + \frac{4\Omega^2}{N} \sum_q J_q [\langle \tau_q^z \tau_{-q}^z \rangle - \langle \tau_{k+q}^x \tau_{-k-q}^x \rangle] \}. (\tau_k^z, \tau_{-k}^z)^{-1}
\end{aligned}$$

APENDICE II

CÁLCULO DA FUNÇÃO CORRELAÇÃO $\langle \tau_k^z \tau_{-k}^z \rangle$

A equação de movimento para as funções de Green, apresentada no capítulo II é:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle_j^\eta = \delta(t - t') \langle A(t), B(t') \rangle_\eta + \langle\langle [A(t), H(t)] | B(t') \rangle\rangle_j^\eta \quad (\text{AII-1})$$

Usaremos aqui relações de comutação; ou seja : $\eta = 1$. Temos assim:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^z | \tau_{+k}^z \rangle\rangle = \langle\langle [\tau_{-k}^z, H] | \tau_k^z \rangle\rangle \quad (\text{AII-2})$$

onde

$$[\tau_{-k}^z, H] = -2\Omega i \tau_{-k}^y \quad (\text{AII-3})$$

Substituindo (AII-3) em (AII-2):

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^z | \tau_{+k}^z \rangle\rangle = -2i \Omega \langle\langle \tau_{-k}^y | \tau_k^y \rangle\rangle \quad (\text{AII-4})$$

Trabalhando agora com $\langle\langle \tau_{-k}^y | \tau_k^z \rangle\rangle$:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^y | \tau_k^z \rangle\rangle = \delta(t) \langle \tau_{-k}^y, \tau_k^z \rangle + \langle\langle [\tau_{-k}^y, H] | \tau_k^z \rangle\rangle \quad (\text{AII-5})$$

onde

$$[\tau_{-k}^y, \tau_k^z] = i \tau_0^x + i \langle S^x \rangle N \quad (\text{AII-6})$$

e

$$[\tau_{-k}^y, H] = 2\Omega (i \tau_{-k}^z + i \langle S^z \rangle N \delta_{-k,0}) - J \langle S^z \rangle .$$

$$= (i \tau_{-k}^x + i \langle S^x \rangle N \delta_{-k,0}) - \frac{1}{2N} \sum_q J_q [\tau_{-k}^y, \tau_q^z \tau_{-q}^z] \quad (\text{AII-7})$$

$$[\tau_{-k}^y, H] = 2i \Omega \tau_{-k}^z + 2i \Omega \langle S^z \rangle N \delta_{-k,0} - iJ \langle S^z \rangle \tau_{-k}^x -$$

$$- iJ \langle S^z \rangle \langle S^x \rangle N \delta_{-k,0} - \frac{i}{N} \sum_q J_q \tau_{-k+q}^x \tau_{-q}^z -$$

$$- \frac{i}{N} J_k \langle S^x \rangle N \tau_{-k}^z \quad (\text{AII-8})$$

Levando a equação (AII-8) na equação (AII-5), obtemos

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^y [\tau_k^z] \rangle\rangle = \delta(t) i \langle S^x \rangle N + 2i \Omega \langle\langle \tau_{-k}^z [\tau_k^z] \rangle\rangle -$$

$$- iJ \langle S^z \rangle \langle\langle \tau_k^x [\tau_k^z] \rangle\rangle - \frac{i}{N} \sum_q J_q \langle\langle \tau_{-k+q}^x \tau_{-q}^z [\tau_k^z] \rangle\rangle$$

$$- iJ_k \langle S^x \rangle \langle\langle \tau_{-k}^z [\tau_k^z] \rangle\rangle \quad (\text{AII-9})$$

Na aproximação R.P.A. as funções de três spins são nulas:

$$\langle\langle \tau_{-k+q}^x \tau_{-q}^z [\tau_k^z] \rangle\rangle = \langle S^x \rangle \langle\langle \tau_{-k}^z \tau_k^z \rangle\rangle + \langle S^z \rangle \langle\langle \tau_{-k}^x \tau_k^z \rangle\rangle = 0 \quad (\text{AII-10})$$

Obtemos assim:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^y [\tau_k^z] \rangle\rangle = \delta(t) i \langle S^x \rangle N + 2i \Omega \langle\langle \tau_{-k}^z \tau_k^z \rangle\rangle - \\ - iJ \langle S^z \rangle \langle\langle \tau_{-k}^x [\tau_k^z] \rangle\rangle - iJ_k \langle S^x \rangle \langle\langle \tau_{-k}^z \tau_k^z \rangle\rangle \quad (\text{AII-11})$$

Trabalhando agora com $\langle\langle \tau_{-k}^x | \tau_k^z \rangle\rangle$:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^x [\tau_k^z] \rangle\rangle = \delta(t) \langle [\tau_{-k}^x, \tau_k^z] \rangle + \langle\langle [\tau_{-k}^x, H] | \tau_k^z \rangle\rangle \\ = \langle\langle [\tau_{-k}^x, H] | \tau_k^z \rangle\rangle \quad (\text{AII-12})$$

$$\text{uma vez que } \delta(t) \langle [\tau_{-k}^x, \tau_k^z] \rangle = -i \delta(t) \langle \tau_0^y \rangle = 0$$

Considerando

$$[\tau_{-k}^x, H] = iJ \langle S^z \rangle \tau_{-k}^y - \frac{i}{N} \sum_q J_q \tau_{-k+q}^y \tau_{-q}^z \quad (\text{AII-13})$$

Obtemos:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \tau_{-k}^x [\tau_k^z] \rangle\rangle = iJ \langle S^z \rangle \langle\langle \tau_{-k}^y \tau_k^z \rangle\rangle \quad (\text{AII-14})$$

Realizando as transformadas de Fourier temporais de (AII-4), (AII-11) e (AII-14), obtemos:

$$\omega \langle\langle \tau_{-k}^z [\tau_k^z] \rangle\rangle + 2i \Omega \langle\langle \tau_{-k}^y \tau_k^z \rangle\rangle = 0 \quad (\text{AII-15})$$

$$\begin{aligned}
 & (-2i\Omega + iJ_k \langle S^X \rangle) \langle \tau_{-k}^Z | \tau_k^Z \rangle + \omega \langle \tau_{-k}^Y | \tau_k^Z \rangle + \\
 & + iJ \langle S^Z \rangle \langle \tau_{-k}^X | \tau_k^Z \rangle = \frac{i \langle S^X \rangle N}{2\pi} \quad (A11-16)
 \end{aligned}$$

$$-iJ \langle S^X \rangle \langle \tau_{-k}^Y | \tau_k^Z \rangle + \omega \langle \tau_{-k}^X | \tau_k^Z \rangle = 0 \quad (A11-17)$$

Equações (A11-15), (A11-16) e (A11-17) podem ser escritas na forma matricial; o determinante secular para a resolução de tal sistema sendo:

$$\begin{bmatrix}
 \omega & 2i\Omega & 0 \\
 -2i\Omega + iJ_k \langle S^X \rangle & \omega & iJ \langle S^Z \rangle \\
 0 & -iJ \langle S^Z \rangle & \omega
 \end{bmatrix} = 0$$

a partir do qual obtemos

$$\omega_k^2 = 4\Omega^2 - 2\Omega J_k \langle S^X \rangle + J^2 \langle S^Z \rangle^2 \quad (A11-19)$$

Seja

$$\Delta = \omega^3 - 2J^2 \langle S^Z \rangle^2 \omega - 4\Omega^2 \omega + 2\Omega J_k \langle S^X \rangle \omega \quad (A11-20)$$

temos então

$$\frac{\Delta}{\omega} = \omega^2 - \omega_k^2 \quad (A11-21)$$

Do sistema de equações (A11-15), (A11-16), (A11-17) e de (A11-19), temos:

$$\Delta \langle\langle \tau_{-k}^z | \tau_k^z \rangle\rangle = \frac{N}{2\pi} \langle S^x \rangle \Omega \quad (\text{A11-22})$$

$$\rightarrow \langle\langle \tau_{-k}^z | \tau_k^z \rangle\rangle = \frac{N}{2\pi} \frac{2 \langle S^x \rangle \Omega}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (\text{A11-23})$$

Conforme salientando no capítulo II:

$$\langle B A(t) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle\langle A[B] \rangle\rangle_{\hbar\omega + i\epsilon} - \langle\langle A[B] \rangle\rangle_{\hbar\omega - i\epsilon}}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} e^{-i\omega t}$$

o que nos dá, finalmente, após certa manipulação matemática:

$$\langle \tau_k^z \tau_{-k}^z \rangle = \frac{\Omega N \langle S^x \rangle}{\omega_k} \left[\frac{e^{-i\omega_k t}}{e^{\beta\omega_k} - 1} - \frac{e^{i\omega_k t}}{e^{-\beta\omega_k} - 1} \right]$$

CÁLCULO DA FUNÇÃO RELAXAÇÃO (τ_k^z , τ_{-k}^z)

$$\tau_k^z, \tau_{-k}^z = \int_0^\beta d\lambda \langle \tau_k^z \tau_{-k}^z (t + i\lambda) \rangle$$

Pelo resultado da primeira parte desse Apendice:

$$\langle \tau_k^z \tau_{-k}^z (t + i\lambda) \rangle = \frac{N \Omega \langle S^x \rangle}{\omega_k} \left[\frac{e^{-i\omega_k(t + i\lambda)}}{e^{\omega_k \beta} - 1} \right]$$

Temos então

$$(\tau_k^z, \tau_{-k}^z) = \frac{N\Omega \langle S^x \rangle}{\omega_k} \left[\frac{e^{-i\omega_k t}}{e^{\omega_k \beta} - 1} \int_0^\beta e^{\omega_k \lambda} d\lambda - \frac{e^{i\omega_k t}}{e^{-\omega_k \beta} - 1} \int_0^\beta e^{-\omega_k \lambda} d\lambda \right]$$

Realizando as integrais:

$$(\tau_k^z, \tau_{-k}^z) = \frac{N\Omega \langle S^x \rangle}{\omega_k^2} (e^{i\omega_k t} + e^{-i\omega_k t})$$

Fazendo $t = 0$, obtemos então

$$(\tau_k^z, \tau_{-k}^z) = \frac{2N\Omega \langle S^x \rangle}{\omega_k^2}$$

REFERÊNCIAS

- 1 - P.G. De Gennes - Solid State Commun 1, 132 (1963)
- 2 - R. Blinc e B. Zeks - Adv. Phys. 21, 693 (1972)
- 3 - R. Blinc e B. Zeks - "Soft Modes in Ferroelectric and Antiferroelectrics" North Holand Publishing (1974)
- 4 - R.J. Elliot - "Structural Phase Transitions and Soft Modes" eds. E.J. Samuelsen, E. Andersen e J. Feder (Oslo: Universitetsforlaget)
- 5 - V.G. Vaks, A.I. Larkin e S.A. Pikin - Sov. Phys. JETP 26, 188 (1968)
- 6 - P.W. Wolf - J. Phys., Paris Suppl. (1 32, 26 (1971)
- 7 - Y.L. Wang e B.R. Cooper - Phys. Rev. 172, 539 (1968)
- 8 - M.E. Fisher, Journal of Mathematical Physics 4, 1 (1963)
- 9 - R.J. Elliot - Proc. Second. Int. Conf. Light Scattering in Solids, ed M. Balkanski (Paris : Flammarion Sciences)
- 10 - R. Blinc e S. Svetina - Phys. Rev. 147, 423 (1966)
- 11 - L.A. Amarante Ribeiro. "Funções de Green aplicadas aos ferroelétricos do tipo ordem-desordem". Tese de Mestrado, Belo Horizonte (1973)
- 12 - D.P. Chock, P. Resibois, P. Dervel e R. Dagonnier - Physice, 53, 364 (1971)
- 13 - D.P. Chock e R. Dagonnier - Physice, 53, 393 (1971)
- 14 - M.A. Moore e H.C.W.L. Willians - J. Phys. C 5, 3185 (1972)
- 15 - R.B. Stinchcombe - J. Phys. 66, 2459 (1973)
- 16 - T.H. Cheung - Phys. Stat. Sol (b) 58, 567 (1973)
- 17 - T.H. Cheung - Z. Physik, 267, 251 (1974)
- 18 - T.H. Tommet e D.L. Huber. Phys. Rev B11, 97 (1975)
- 19 - R. Blinc, B. Zeks e R.A. Tahir - Kheli. Phys. Rev B18, 338 (1978)
- 20 - K.N. Pak - Phys. Stat. Sol. (b) 74, 673 (1968)
- 21 - H.Mori - Prog. Theor. Phys. 34, 399 (1965)

- 22 - A. Kühnel, S. Wendt e J. Wesselinowa . Phys. Stat Sol. (b) 84 653 (1977)
- 23 - H. Mori e K. Kawasaki - Prog. Theor. Phys. 27, 529 (1962)
- 24 - S. W. Lovesey e R.A. Meserve - J. Phys. C 6, 79 (1973)
- 25 - D.N. Zubarev - Sov. Phys. Usp 3, 320 (1960)
- 26 - K.H.W. Stevens e G.A. Toombs - Proc. Phys. Soc 85, 1307 (1965)
- 27 - R. Kubo - J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957)
- 28 - L.A. Amarante Ribeiro "Dinâmica de Pseudo-Spins em Ferroelétricos Hidrogenados" - Tese de Doutorado, Belo Horizonte (1979)
- 29 - V.F. Sears - Can. Journal of Phys. 47, 199 (1969)
- 30 - A. Abragam - "The Principles of Nuclear Magnetism" Oxford University Press (1961)
- 31 - R.M. Wilcok - Phys. Rev. 174, 624 (1968)