

538 Sena Filho, Roberto Ferreira  
S477t Teoria Microscópica de Ondas de Spin em Nanofios Magnéticos./ Roberto Ferreira Sena Filho. Fortaleza: 2007. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Ceará  
Orientador: Raimundo Nogueira Costa Filho.  
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.  
1. Física - Dissertação. 2. Magnetismo. 3. Ondas de Spin. 4. Ferromagnetismo. 5. Antiferromagnetismo. 6. Relação de Dispersão. I. Costa Filho, Raimundo Nogueira. II. Universidade Federal do Ceará. Departamento de Física. III. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

*Teoria Microscópica de Ondas de Spin em  
Nanofios Magnéticos*

Roberto Ferreira Sena Filho

Dissertação de Mestrado

Orientador:  
Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho

Fortaleza  
12 de Janeiro de 2007

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Roberto Ferreira Sena Filho**

*Teoria Microscópica de Ondas de Spin em  
Nanofios Magnéticos*

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

---

Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho  
Orientador

---

Dr. Nilson Sena de Almeida  
Universidade Federal do Ceará

---

Dr. Claudionor Gomes Bezerra  
Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Aprovada em 12 de Janeiro de 2007.

*À minha família*

# *Agradecimentos*

Ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho pelo trabalho de orientação, pela compreensão, paciência e amizade.

Ao Prof. Dr. João Milton Pereira Jr e ao Tayroni pela colaboração e amizade.

Ao Coordenador da Pós-Graduação Prof. Dr. José Soares de Andrade Jr e ao Vice-Coordenador Josué Mendes Filho pela confiança e pelo apoio aos estudantes da Pós-Graduação.

As secretárias da Pós-Graduação Rejane Ramos Coelho e Ana Cleide Ferreira Sampaio pela presteza e competência em seus serviços.

A todos os professores do Departamento que de alguma forma contribuíram para a minha formação acadêmica.

Aos meus pais, Roberto Ferreira Sena e Maria das Graças Pires de Oliveira, as minhas irmãs Ayana Karine de Oliveira Sena e Ayana Karoline de Oliveira Sena, aos meus sobrinhos Caleo, Artur e Kaio e a minha namorada Francisca Maria Vieira Pinto, pessoas centrais em todas as minhas conquistas, pelo carinho e apoio.

Aos meus colegas Acrísio, Adelmo, Alrenice, Ana, Apiano, Bartolomeu, Bruno, Cauby, Cesar, Chiquinho, Ciro, Clenilton, Damasceno, Daniela, Éder, Eduardo, Elton, Erivelton, Erneron, George, Glendo, Hermínio, Hudson, Ivan, J.J., Jonatã, José Alves, Luciana, Luis, Mairton, Marcelo, Marcio Gledson, Michel, Nizomar, Nuno, Pablo, Paulo William, Paschoal, Ricardo, Rogerio, Roner, Sara, Saulo, Sergio Bezerra, Sergio Gomes, Valmir, Vladimir, Wagner.

“O presente trabalho foi realizado com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq - Brasil”.

# *Resumo*

O comportamento dinâmico de spins em materiais magnéticos é influenciado pela geometria que eles apresentam. Além disso, outro aspecto relevante é a dimensionalidade do sistema. Trabalhos recentes comprovam o interesse do estudo das propriedades magnéticas em sistemas de baixa dimensionalidade, que é devido em grande parte as aplicações tecnológicas, tais como: nanosensores, gravadores magnéticos de alta densidade, dispositivos magneto-eletrônicos, etc. Neste trabalho estudamos a propagação de ondas de spin em nanofios magnéticos cilíndricos, onde a abordagem é feita utilizando teoria microscópica, através do Hamiltoniano de Heisenberg, em que os spins são considerados fixos nos sítios da rede e cuja geometria da seção transversal dos cilindros é hexagonal. Entre as interações magnéticas estudadas consideramos: a interação de troca que pode ser ferromagnética se os primeiros vizinhos dos spins estão numa configuração paralela, ou antiferromagnética se estiverem antiparalelos; a interação Zeeman que é devido ao campo magnético externo aplicado ao sistema; a interação de Anisotropia, esta sendo responsável pela direção de magnetização preferida que diversos sistemas magnéticos reais apresentam e a interação dipolar de natureza magnetostática, presente em todos os materiais. O formalismo leva em consideração a dependência espacial dos spins no sistema, onde os operadores de spin do hamiltoniano são escritos em termos de operadores bosônicos de criação e aniquilação através da Representação de Holstein-Primakoff. Em seguida, aproveitando-se da simetria translacional em uma direção devido a periodicidade da rede, realizamos a transformada de Fourier para estes operadores fornecendo um sistema de equações matriciais no espaço dos vetores de onda. A partir desse sistema de equações obtemos vários espectros de excitação como: a relação de dispersão para as ondas de spin, que é o gráfico onde mostra como a frequência de ondas de spin varia em função do vetor de onda e a variação da energia do sistema com o campo aplicado.

# *Abstract*

The dynamical behavior of spins in magnetic materials is affected by its geometry and dimensionality. One can find several new results in the literature exploiting the magnetic properties of low dimension systems with different geometries, since the development of new devices such as: nanosensors, high density magnetic storage, etc., is closely related to new geometries. In this piece of work, we study the propagation of spin waves on cylindrical magnetic nanowires described by a microscopic theory through the Heisenberg Hamiltonian, where we consider the spins fixed at the sites lattice and the transversal section of the wire is hexagonal. Our model takes into account the exchange interaction between the spins that can be ferromagnetic or antiferromagnetic, the interaction of an external field with the spins (Zeeman interaction), anisotropic interactions due to a preferred direction of magnetization, and finally dipole-dipole interactions. The spins are described by boson operators through Holstein-Primakoff representation. The equations of motion for the spins are written in terms of these operators and translational symmetry in a preferential direction allows us to calculate several excitations spectra.

*“Nenhuma religião contemporânea e nenhum credo da Nova Era me parecem levar realmente em consideração a grandiosidade, a sutileza e complexidade do Universo revelado pela Ciência.”*

*– Carl Sagan –*



# *Sumário*

## Lista de Figuras

<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Teoria Microscópica das Ondas de Spin</b>	<b>5</b>
1.1 Introdução . . . . .	5
1.2 As Interações . . . . .	8
1.2.1 A Interação de Troca . . . . .	9
1.2.2 A Interação Dipolar . . . . .	13
1.2.3 A Interação de Anisotropia . . . . .	13
1.2.4 A Interação Zeeman . . . . .	14
1.3 As Ondas de Spin . . . . .	15
<b>2 O Nanofio Ferromagnético</b>	<b>18</b>
2.1 Introdução . . . . .	18
2.2 O Hamiltoniano . . . . .	20
2.3 A Representação Holstein-Primakoff . . . . .	20
2.4 Resultados Numéricos . . . . .	28
2.4.1 Sem Interação Dipolar . . . . .	29
2.4.2 Com Interação Dipolar . . . . .	34
<b>3 O Nanofio Antiferromagnético</b>	<b>39</b>
3.1 Introdução . . . . .	39
3.2 O Hamiltoniano . . . . .	40
3.3 A Representação Holstein-Primakoff . . . . .	42
3.4 Resultados Numéricos . . . . .	51
3.4.1 Sem Interação Dipolar . . . . .	52
3.4.2 Com Interação Dipolar . . . . .	55
<b>Conclusões Gerais e Perspectivas</b>	<b>59</b>
<b>Referências</b>	<b>61</b>

# *Lista de Figuras*

1.1	Três tipos de ordenamento magnético (colinear): (a) ferromagnético, (b) antiferromagnético e (c) ferrimagnético. . . . .	6
1.2	Representação da estrutura dos domínios magnéticos dispostos aleatoriamente em um material policristalino. Neste caso cada grão monocristalino contém um único domínio magnético. Assim, o material está desmagnetizado, ou seja, não produz um campo magnético externo. . . . .	8
1.3	Representação da transição dos momentos magnéticos na interface entre dois domínios com polarização oposta: (a) transição abrupta dos dipolos magnéticos e (b) transição suave com um comprimento $\delta$ maior. . . . .	8
1.4	Ilustração de uma onda de spin na visão semi-clássica propagando-se em uma cadeia ferromagnética. Os spins precessionados em um dado tempo são mostrados em perspectivas em (a) e, em (b) temos a vista de cima mostrando o seu comprimento de onda. . . . .	16
2.1	Representação de um nanofio ferromagnético com $N = 7$ , submetido à presecção de um campo magnético uniforme externo longitudinal ( $H_0$ ), onde $a$ é o parâmetro de rede. . . . .	21
2.2	Seções transversais de nanofios magnéticos para: (a) $N = 7$ , (b) $N = 19$ e (c) $N = 37$ . . . . .	22
2.3	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 7$ na ausência de campo magnético aplicado tomando $S = J = 1, 0$ . . . . .	30
2.4	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 7$ na presença de campo magnético externo com valor arbitrário $h = 1, 0$ . . . . .	30
2.5	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 7$ na ausência de campo magnético externo aplicado. . . . .	31
2.6	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 91$ sem a aplicação de campo externo. . . . .	32
2.7	Frequência de ondas de spin (em $q = 0$ ) versus campo longitudinal aplicado para um nanofio com $N = 19$ . . . . .	32
2.8	Variação da magnetização média de um nanofio ferromagnético com $N = 7$ em relação a temperatura ( $k_B = 1$ ). . . . .	33

2.9	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 7$ em um campo aplicado longitudinal, tomando $h = f_D = 0,3$ . . . . .	35
2.10	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 19$ na presença de campo externo $h = 2,0$ e $f_D = 0,4$ . . . . .	35
2.11	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 37$ em um campo aplicado longitudinal, tomando $h = 3,0$ e $f_D = 0,7$ . . . . .	36
2.12	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 91$ na presença de campo externo $h = 3,5$ e $f_D = 0,5$ . . . . .	37
2.13	Relação de dispersão de ondas de spin no regime magnetostático para um nanofio com $N = 37$ , campo aplicado $h = 6,0$ , $f_D = 0,5$ e $J = 0,001$ . . . . .	38
2.14	Variação da frequência de ondas de spin em função do campo aplicado para um nanofio com $N = 7$ , vetor de onda $q = 0$ e $f_D = 1,0$ . . . . .	38
3.1	Estado fundamental de Néel clássico para uma rede planar. . . . .	40
3.2	Representação de um nanofio antiferromagnético com $N = 7$ , submetido à presença de um campo magnético uniforme externo longitudinal ( $H_0$ ), onde $a$ é o parâmetro de rede. . . . .	41
3.3	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 7$ , $K = 0,75$ na ausência de campo magnético aplicado. . . . .	52
3.4	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 7$ , $h = 0,25$ e $K = 0,75$ . . . . .	53
3.5	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 37$ , $h = 0,25$ e $K = 0,75$ . . . . .	54
3.6	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 91$ , $h = 0,25$ e $K = 0,75$ . . . . .	54
3.7	Frequência de ondas de spin (em $q = 0$ ) versus campo longitudinal aplicado para um nanofio com $N = 7$ e $K = 0,75$ . . . . .	55
3.8	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 7$ , $K = 0,75$ , $h = 0$ , $f_D = 0,1$ . . . . .	56
3.9	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 7$ , $h = 1,0$ , $K = 2,0$ , $f_D = 0,25$ . . . . .	56
3.10	Frequência de ondas de spin versus vetor de onda $qa$ para um nanofio com $N = 37$ , $h = 0,25$ , $K = 2,0$ , $f_D = 0,1$ . . . . .	57
3.11	Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com $N = 91$ , $h = 0,25$ , $K = 2,0$ , $f_D = 0,1$ . . . . .	57

3.12	Varição da frequência de ondas de spin em função do campo aplicado para um nanofio com $N = 7$ , vetor de onda $q = 0$ , $K = 2,0$ e $f_D = 0,25$ . . . .	58
------	---	----

# *Introdução*

O magnetismo é um dos fenômenos físicos que desperta atenção da humanidade desde os tempos mais remotos. Os primeiros relatos sobre esse fenômeno remontam da Grécia antiga, por volta de 800 a.C.. Diz a lenda que um pastor de nome Magnus relatara sobre propriedades “maravilhosas” de uma pedra que tinha “alma”. Esta região tornou-se conhecida mais tarde como Magnesia (Asia Menor, hoje Turquia). Origens à parte, o que sabemos é que todo o conhecimento deste tema nos vinte e três séculos seguintes foi dominado pelo pensamento e pela filosofia grega através de duas escolas filosóficas. Primeiramente, os filósofos animistas, como Tales de Mileto e Anaxágoras, deram uma origem divina às propriedades da magnetita, supondo que esta pedra tinha alma, ou seja, possuía vontade própria. Posteriormente, os filósofos mecanicistas ou atomistas, tentaram através de deduções de várias concepções metafísicas compreender estes e outros fenômenos naturais. Eles atribuíram a existência de umidade no ferro da qual a secura da magnetita se alimentava. Curiosamente, esta idéia apesar de ser também uma superstição, relacionava dois elementos opostos (secura e umidade) que se complementarizam, como os pólos norte e sul de um imã. Dentre os atomistas, Platão e Lucrecio provavelmente foram os primeiros a notar que estes materiais poderiam também se repelir. Porém, a filosofia grega por tentar compreender as maravilhas da natureza apenas no campo das idéias, não procurou testá-las e predizê-las [1].

A primeira aplicação tecnológica direta dos materiais magnéticos foi a bússola, pois além de se atraírem ou se repelirem, percebeu-se que estes materiais eram capazes de nos dar orientação na Terra. Isto proporcionou o avanço das grandes viagens marítimas. O período e o lugar de seu surgimento é assunto de disputa entre os historiadores e isto está fora do objetivo desta dissertação [2, 3].

Pierre Pélerin de Maricourt, também conhecido como Petrus Peregrinus, fez a mais importante tentativa experimental de entender o magnetismo até então, escrevendo um dos mais antigos tratados de Física experimental, em 1269. Ele fez experiências com uma magnetita esférica espalhando pedaços de imã ao redor, conseguindo com isto traçar as linhas de campo magnético que se interceptavam em dois pontos os quais chamou de pólos [2].

Em 1600, o filósofo natural William Gilbert de Colchester, em Londres, publicou

sua obra prima “*De magneticisque corporibus et de magno magnete tellure physiologia nova*” (Sobre o imã e os corpos magnéticos, e sobre o grande imã, a Terra), fazendo uma revisão crítica de todos os escritos anteriores sobre o assunto e os que relacionava com mitos e lendas, refutando-os. Este livro inaugura uma nova metodologia no estudo do magnetismo ao realizar um tratamento sistemático desses fenômenos. Gilbert utiliza em muitos experimentos uma pedra-imã (imã natural) no formato esférico para representar a Terra, e por isso a chama de *terella* ou pequena Terra, sendo um dos primeiros exemplos de modelo experimental em escala já feito. Outro ponto relevante é quando ele escreve “*Magnus magnes ipse est globus terrestris*”, ou seja, o próprio globo terrestre é um imã. Com esta afirmação passamos a conhecer a segunda qualidade global do nosso planeta - a primeira foi sua forma redonda. Devido às suas contribuições nesta área, Gilbert é considerado o “Pai do Magnetismo”, além de seu nome estar associado a unidade de medida de força magnetomotriz [4].

Com o surgimento do método científico e a substituição da metafísica pela matemática no século XVII através de Galileu, Descartes, Newton e outros, houve um crescimento significativo das descobertas científicas. Em Magnetismo, para citar alguns exemplos, temos: em 1820, Hans Christian Oersted descobre que uma corrente elétrica ao percorrer um fio, era capaz de mover a agulha de uma bússola em sua vizinhança; posteriormente, Ampère formula a lei que relaciona o campo magnético gerado com a intensidade de corrente no fio, proporcionando a invenção do motor elétrico e Jean Baptiste Biot e Felix Savart mostram que a força magnética exercida sobre um polo magnético por um fio cai com  $1/r$  e é orientada perpendicular ao fio; em 1831, Michael Faraday descobre que um campo magnético variável induz uma corrente elétrica em um circuito, o que possibilitou a invenção do gerador elétrico; em 1873, James Clerk Maxwell faz o que Newton realizou na Mecânica, sintetiza as equações do eletromagnetismo em seu livro “*Treatise on Electricity and Magnetism*” [5, 3]. Estas e muitas outras descobertas propiciaram a criação de empresas de geração e distribuição de energia elétrica, o que provocou uma revolução na indústria. O próprio surgimento das telecomunicações deve-se a estas descobertas, pois os relés foram empregados nos telégrafos e nos fones e microfones usados na telefonia [3, 2].

O estudo de magnetismo como um fenômeno coletivo entre entidades magnéticas foi responsável pelo mais significativo avanço na teoria de transições de fase termodinâmicas [6]. Isso transformou a mecânica estatística em uma das ferramentas mais bem sucedidas e significantes para o estudo do estado sólido [7]. O passo inicial foi dado por Pierre Weiss, em 1907, ao propor a primeira teoria moderna de magnetismo [8]. Ele simplesmente supôs que as interações entre moléculas magnéticas poderiam ser descritas por

um “campo molecular”, também chamado de campo efetivo ou campo interno, que seria proporcional à magnetização. Anteriormente, Pierre Curie investigou sistematicamente propriedades termodinâmicas de substâncias magnéticas e descobriu que a magnetização era proporcional ao campo aplicado (lei de Curie-Weiss) [3].

Apesar dos avanços no conhecimento científico e tecnológico, foi apenas no século XX que muitas das questões em magnetismo tiveram suas devidas explicações, com o surgimento de uma nova forma de descrever a natureza: a Mecânica Quântica. Isto foi justificado através do teorema de Bohr-van Leeuwen: “*Classicamente a qualquer temperatura finita, e em todos os campos magnéticos e elétricos finitos, a magnetização total de um conjunto de elétrons em equilíbrio térmico é identicamente nula*”. Em outras palavras, o magnetismo não pode ser explicado pela física clássica, ele é intrinsecamente quântico [1]. A velha mecânica quântica (1913-1925) explicou a origem dos momentos magnéticos atômicos com o modelo de Bohr estabelecendo a unidade fundamental do momento magnético, conhecido como magneton de Bohr ( $\mu_B$ ). Compton então, em 1921, propôs que o elétron possuía um momento magnético intrínseco, o spin, sendo demonstrado mais tarde por Goudsmit e Uhlenbeck, em 1925. A partir de então, foram propostas novas formulações para a mecânica quântica: a matricial (Heisenberg), a ondulatória (Schrödinger) e a relativística (Dirac). Com isso pode-se finalmente descrever o spin do elétron, o ferromagnetismo e a origem do campo de Weiss através da chamada interação de troca, que é uma consequência da repulsão coulombiana, quando se faz a combinação linear dos orbitais atômicos localizados em átomos vizinhos, levando-se em conta o princípio de exclusão de Pauli [1].

A partir de 1925 até meados da década de 1930, vários cientistas como Hartree, Fock, Heitler, London, Slater, Van Vleck e outros, fizeram cálculos a nível atômico e molecular resolvendo muitos problemas pendentes com dados espectroscópicos, regras de Hund, os momentos magnéticos dos átomos e dos íons, o efeito Zeeman, etc [1]. Desde então, houve um rápido crescimento de trabalhos publicados em magnetismo que se vê até hoje, sendo impossível de ser resumido aqui, alimentado em parte pela importância estratégica e econômica que esta área passou a ter. Aplicações tecnológicas e industriais não pararam de surgir nas últimas décadas, de tal modo que hoje estamos circundados por fenômenos e aplicações do magnetismo [9]. Vale ressaltar que quase todas as aplicações envolvem materiais magnéticos: sistemas de geração e distribuição de energia; conversão eletromecânica (eletrodomésticos, automóveis, aviões); eletrônica, informática, telecomunicações; transdutores, sensoriamento e prospecção geológica; medicina e engenharia biomédica; automação industrial; etc [10].

Em magnetismo existem duas formas de abordagem para se estudar as propriedades físicas de materiais magnéticos do ponto de vista teórico. Uma delas é a visão macroscópica onde utilizamos as equações de Maxwell, a outra, que será utilizada neste trabalho, é a visão microscópica onde relações de comutação e operadores de spin descrevem a natureza quântica do magnetismo. Em particular, um dos modelos microscópicos mais utilizados para estudar o magnetismo em sistemas de baixa dimensionalidade é o modelo de Heisenberg. Esse modelo leva em consideração a interação dos momentos magnéticos localizados dos materiais isolantes com os momentos vizinhos, bem como a interação desses spins com campos magnéticos externos aplicados. Termos dipolares e anisotrópicos também são adicionados ao formalismo, a fim de se obter uma melhor descrição dos fenômenos e das propriedades magnéticas.

O objetivo deste trabalho é apresentar uma teoria microscópica para a propagação das ondas de spin em nanofios magnéticos. No capítulo 1 fazemos uma rápida revisão da teoria do magnetismo, apresentando o formalismo hamiltoniano através do modelo de spins localizados de Heisenberg, onde consideramos as interações magnéticas de curto alcance como a interação de troca, e de longo alcance como a interação Zeeman e dipolar, além de interações fenomenológicas como o termo anisotrópico. Para isto usamos uma poderosa técnica, a chamada segunda quantização, que consiste em considerar o sistema magnético sendo constituído por um conjunto de osciladores quânticos acoplados. No capítulo 2 aplicamos esta teoria a um nanofio ferromagnético, onde também realizamos a transformada de Fourier desses operadores na direção da simetria translacional, para podermos obter um sistema de equações matriciais. Com estas equações, obtemos resultados numéricos para nanofios de diferentes raios. Entre os resultados, mostramos a variação da frequência de propagação de ondas de spin em função do vetor de onda. Também a variação da frequência com relação ao campo externo aplicado é mostrado. O estudo de nanofios antiferromagnéticos com abordagem microscópica realizamos no capítulo 3. O fato de existir spins *up* e *down* no sistema com essa geometria, interessantes resultados são observados, como a quebra de degenerescência de modos com a aplicação de campo externo. Além também, de observar o efeito do termo dipolar nos modos das relações de dispersão. Apresentamos as conclusões gerais sobre o trabalho realizado no final da dissertação, onde fazemos uma discussão sobre os resultados e as contribuições das interações no comportamento dinâmico de spins em nanofios magnéticos. Perspectivas de trabalhos futuros neste tema são feitas também no final.



# 1 Teoria Microscópica das Ondas de Spin

## 1.1 Introdução

O spin do elétron foi descoberto em um experimento realizado por Otto Stern e Walter Gerlach, em Frankfurt, na Alemanha, em 1920. Neste experimento, átomos neutros de um feixe de átomos de prata eram espalhados por um gradiente de campo magnético. A deflexão do feixe implicava na existência de um momento magnético dos átomos neutros, e conseqüentemente de um momento angular intrínseco, batizado de *spin*. O spin corresponde a um grau de liberdade interno do elétron, e embora às vezes seja descrito de forma aproximada como o movimento do elétron em torno do seu próprio eixo, é uma propriedade intrínseca da partícula (assim como sua massa e sua carga). Assim, o spin introduz mais uma propriedade (ou qualidade) ao elétron, podendo a sua componente  $z$ , assumir valores iguais a  $\pm\hbar/2$  [11, 12], onde  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

Em um átomo com muitos elétrons, os momentos angulares orbital ( $\mathbf{L}$ ) e de spin ( $\mathbf{S}$ ) de cada elétron se combinam de modo a formar o momento total do átomo ( $\mathbf{J}$ ):

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (1.1)$$

onde

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i \quad (1.2)$$

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i \quad (1.3)$$

Para sabermos o valor de  $J$  de um átomo no estado fundamental, aplicamos as *regras de Hund* [13]:

*i)* O spin total do átomo deve ser maximizado e consistente com o princípio de exclusão de Pauli (dois elétrons não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos, orbitais e de spin);

- ii) O momento angular total deve ser maximizado e consistente com a primeira regra;
- iii) Se a camada eletrônica estiver mais da metade cheia,  $J = L + S$ , caso contrário,  $J = |L - S|$ .

Podemos dizer que os momentos magnéticos aparecem em átomos que possuem camadas eletrônicas incompletas. Microscopicamente, a magnetização surge da ordenação dos momentos magnéticos atômicos. Ela é definida como a quantidade de momentos magnéticos ( $\boldsymbol{\mu}$ ) por unidade de volume do material:

$$\mathbf{M} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_i \boldsymbol{\mu}_i. \quad (1.4)$$

Da definição de  $\mathbf{M}$  acima, podemos ver que para que haja magnetização, esta condição é necessária, mas não suficiente. É preciso também que a soma sobre  $\boldsymbol{\mu}_i$  seja diferente de zero. Como esta é uma quantidade vetorial, a soma será zero se os momentos apontarem em direções aleatórias. Em outras palavras, para que exista magnetização, é preciso que haja momentos magnéticos e que estes, na média, apontem na mesma direção. Isso ocorre sempre que houver um campo magnético atuando no sistema e/ou a temperatura for suficientemente baixa. Este campo pode tanto ser aplicado externamente, quanto produzido por mecanismos de interação entre os próprios momentos magnéticos. Neste último caso, dizemos que o material apresenta *ordem magnética espontânea*.

Uma visão simplificada da natureza microscópica dos materiais magnéticos é considerar uma rede com os íons fixos, em que cada íon tem um certo número de elétrons desemparelhados, resultando em um spin total da rede não nulo e momentos magnéticos para os sítios da rede. Alguns tipos de ordenamento magnético são mostrados na figura 1.1.

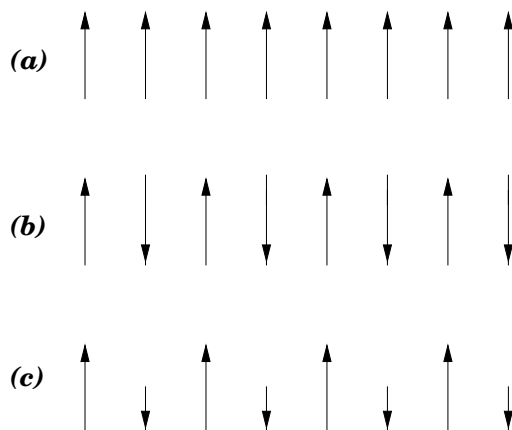


Figura 1.1: Três tipos de ordenamento magnético (colinear): (a) ferromagnético, (b) antiferromagnético e (c) ferrimagnético.

Materiais ferromagnéticos são aqueles que no regime de baixas temperaturas apresentam uma magnetização espontânea (os spins têm um alinhamento espontâneo) na ausência de um campo externo aplicado, e no regime de temperaturas mais altas o alinhamento é perdido. Esta perda ocorre a partir de uma temperatura característica de cada material ferromagnético denominada de *temperatura de Curie* ( $T_c$ ). Exemplos desses materiais são: o ferro ( $T_c = 1043\text{ K}$ ), o cobalto ( $T_c = 1404\text{ K}$ ) e o níquel ( $T_c = 631\text{ K}$ ) [14]. Materiais antiferromagnéticos são aqueles cujo spins tem orientação antiparalela com os spins vizinhos, apresentando magnetização nula na ausência de campo aplicado em baixas temperaturas. Acima de uma temperatura crítica, conhecida como *temperatura de Néel* ( $T_N$ ), esta simetria é quebrada. O antiferromagnetismo é muito comum, por exemplo, em óxidos metálicos de transição: MnO ( $T_N = 122\text{ K}$ ), FeO ( $T_N = 198\text{ K}$ ), CoO ( $T_N = 291\text{ K}$ ) e NiO ( $T_N = 523\text{ K}$ ). Um outro tipo de ordenamento magnético parecido com o antiferromagnetismo é o ferrimagnetismo, que se caracteriza por possuir dois (os mais) tipos diferentes de íons magnéticos, que também se orientam antiparalelamente, mas como suas magnitudes são diferentes, estes materiais apresentam uma magnetização resultante não nula. A magnetização resultante é naturalmente inferior à do ferromagnetismo, mas ainda assim, encontram-se aplicações práticas para estes materiais chamados *ferrites*. Outra diferença entre os materiais ferromagnéticos e ferrimagnéticos está na condutividade elétrica, que é muito pequena nestes últimos e faz com que eles sejam vantajosos em certas aplicações específicas. Exemplos de materiais ferrimagnéticos são:  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{R}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  (R= terra rara) e  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ .

Materiais ferromagnéticos podem existir tanto no estado magnetizado, quanto no estado desmagnetizado, isto se deve ao arranjo (alinhamento) dos momentos magnéticos atômicos no material. Cada átomo se comporta como um minúsculo imã permanente e, espontaneamente, se alinha paralelamente a seus vizinhos em regiões dentro do material. Estas regiões nas quais predomina um só alinhamento magnético são chamadas *domínios magnéticos* (fig. 1.2). Estes ocupam um volume que pode variar entre  $10^{-18}$  e  $10^{-9}$   $\text{m}^3$ , ou seja, com dimensões da ordem de  $10^{-6}$  a  $10^{-3}$  m. O que delimita o contorno do domínio são os próprios átomos e, portanto, este pode mudar de forma e tamanho quando submetido a um campo magnético externo. Assim, as *paredes dos domínios* com espessuras variando entre 100 e 1000 Å são livres para se movimentar dentro do material e o fazem quando submetidas a ação de um campo magnético externo [15].

A transição entre dois domínios magnéticos com orientações opostas não se dá abruptamente como mostra a figura (1.3.a), pois esta configuração drástica envolve uma energia de troca muito alta. Assim, para minimizar a energia, a transição entre dois domínios

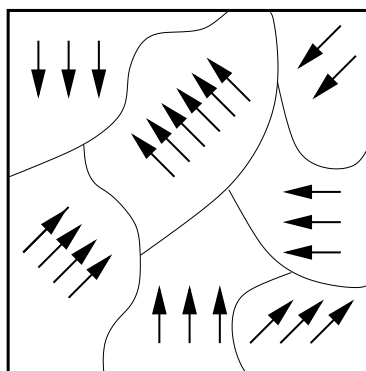


Figura 1.2: Representação da estrutura dos domínios magnéticos dispostos aleatoriamente em um material policristalino. Neste caso cada grão monocristalino contém um único domínio magnético. Assim, o material está desmagnetizado, ou seja, não produz um campo magnético externo.

polarizados contrariamente ocorre com uma mudança gradual de direção dos momentos magnéticos como ilustra a figura (1.3.b). Este tipo de interface entre dipolos magnéticos é chamado *parede de Bloch de 180°* [16]. Os domínios magnéticos podem ser perfeitamente observados em um microscópio usando um líquido contendo um pó magnético muito fino (ferrofluido), geralmente  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Estas partículas magnéticas se acumulam nas regiões nas quais o campo possui um alto gradiente magnético, ou seja, nas intersecções das paredes de domínios com a superfície da amostra.

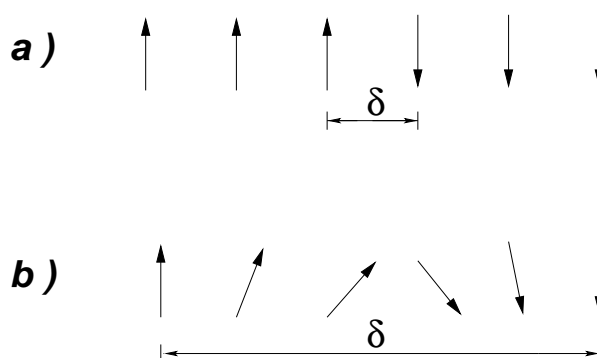


Figura 1.3: Representação da transição dos momentos magnéticos na interface entre dois domínios com polarização oposta: (a) transição abrupta dos dipolos magnéticos e (b) transição suave com um comprimento  $\delta$  maior.

## 1.2 As Interações

Um material ferromagnético após ser aquecido acima da temperatura de Curie e resfriado, se divide espontaneamente, em domínios magnéticos nos quais os momentos

magnéticos estão alinhados paralelamente. Por outro lado, o material não apresenta um campo magnético externo, uma vez que, os domínios magnéticos estão dispostos aleatoriamente de maneira que a resultante externa é nula. A razão para que isto ocorra é encontrada no balanço das energias envolvidas neste processo. Aqui levaremos em consideração três energias fundamentais: a de troca, a anisotrópica e a dipolar. Além da interação que podemos ter dos momentos magnéticos com um campo magnético externo aplicado (termo Zeeman).

### 1.2.1 A Interação de Troca

O princípio da exclusão de Pauli estabelece que dois elétrons não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (orbitais e de spin). Matematicamente, esse princípio é satisfeito exigindo-se que a função de onda total do elétron seja anti-simétrica. Este princípio cria correlações no movimento dos elétrons de um sistema, com importantes consequências para as propriedades magnéticas (e de condução) dos materiais. Para ilustrar esse ponto, consideremos a equação de Schrödinger, independente de spin, para dois elétrons livres [17]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.5)$$

Notemos que não existem termos de interação entre os elétrons, ou termos envolvendo os spins. A solução dessa equação descreve o movimento dos dois elétrons. Quanto ao estado de spin, existem quatro possibilidades, que representaremos da seguinte maneira:

$$|\uparrow\uparrow\rangle \quad |\uparrow\downarrow\rangle \quad |\downarrow\uparrow\rangle \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

A função de onda total é formada pelo produto da parte orbital,  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , pela parte de spin, e, de acordo com o princípio de exclusão, deve ser anti-simétrica. Isso quer dizer que se  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  for simétrica, ou seja, não trocar de sinal mediante uma inversão de coordenadas dos elétrons, a função de spin deve ser anti-simétrica, e vice-versa. Então, das funções de spin acima podemos construir três funções simétricas ( $\chi_S$ ) e uma anti-simétrica ( $\chi_A$ ):

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\chi_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ 1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

Como o spin total é  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ , sua componente  $z$  será  $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ . Portanto:

$$\begin{aligned} S_z \chi_A &= 0 \chi_A \\ S_z \chi_S^{(a)} &= \hbar \chi_S^{(a)} \\ S_z \chi_S^{(b)} &= 0 \chi_S^{(b)} \\ S_z \chi_S^{(c)} &= -\hbar \chi_S^{(c)} \end{aligned}$$

A primeira dessas equações corresponde a um estado em que os dois spins estão antiparalelos, ou seja,  $S = 0$ . Esse estado é chamado de *singlete de spins*. As outras equações correspondem a um estado em que os dois spins estão paralelos, ou seja,  $S = 1$ , e portanto,  $m_S = 1, 0, -1$ . Este estado é chamado de *triplete de spins*.

Podemos construir funções espaciais simétricas e anti-simétricas a partir das funções a 1 partícula, que representaremos por  $\phi$ . Se  $\alpha$  e  $\beta$  representam dois estados orbitais, teremos:

$$\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) + \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)] \quad (1.6)$$

$$\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) - \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)] \quad (1.7)$$

Se fizermos as partículas se aproximarem uma da outra, ou seja,  $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$ , teremos  $\psi_S \rightarrow 2\phi_\alpha\phi_\beta$ , enquanto que  $\psi_A \rightarrow 0$ , o que significa que é improvável que partículas no estado anti-simétrico sejam encontradas próximas uma da outra. O mesmo ocorre se fizermos um estado tender para o outro:  $\alpha \rightarrow \beta$ . Assim, as funções de onda totais possíveis serão:

$$\Psi = \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \chi_A \quad (1.8)$$

ou

$$\Psi = \psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \chi_S \quad (1.9)$$

Notemos que spins antiparalelos tendem a se aproximar, enquanto que spins paralelos se afastam. Ou seja, *o estado de spin está correlacionado com o movimento orbital*. A correlação é introduzida pura e simplesmente pelo princípio de exclusão, ou seja, é independente da existência ou não de uma interação elétron-elétron na equação de Schrödinger.

Agora consideremos uma interação coulombiana entre os dois elétrons

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (1.10)$$

onde  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  é a distância entre os elétrons.

Calculemos a energia média usando as funções de onda espaciais, que são combinações simétrica e anti-simétrica como descritas acima. Como a interação independe do spin, precisamos apenas da parte espacial da função de onda:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (1.11)$$

Substituindo  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1/\sqrt{2} [\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) \pm \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)]$ , obtemos:

$$\langle U \rangle = E \pm J_{troca} \quad (1.12)$$

onde:

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\phi_\beta^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (1.13)$$

e

$$J_{troca} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\phi_\beta^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2 \quad (1.14)$$

Podemos notar que  $E$  representa a energia coulombiana média do sistema. Este seria o único termo presente se o princípio de exclusão não tivesse sido levado em conta. A imposição feita pelo princípio de Pauli sobre a função de onda do par, introduz o outro termo,  $J_{troca}$ , chamado de *energia de troca*.

O sinal “ $\pm$ ” na expressão de  $\langle U \rangle$  dependerá do estado de spin (eq. 1.12), se singleto ou tripleto. Materiais ferromagnéticos possuem coeficiente de troca positivo, exemplo é o ferro. O manganês e o cromo possuem coeficiente de troca negativo e são, portanto, anti-ferromagnéticos. Assim, embora a interação entre os elétrons não dependa explicitamente do spin, a energia média dependerá. É plausível então pensar que a energia do sistema possa ser escrita em termos das variáveis de spin. Podemos ver isso de uma maneira simplificada escrevendo a expressão para  $\langle U \rangle$  da seguinte forma:

$$\langle U \rangle = E \pm 4J_{troca} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \quad (1.15)$$

Quando os dois spins forem paralelos, teremos  $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = +1/4$  e a função espacial será anti-simétrica, e quando forem antiparalelos,  $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = -1/4$  e a função espacial simétrica.

Werner Heisenberg foi o primeiro a notar, em 1928, a importância da energia de troca para explicar a ordem magnética nos materiais [18]. Ele escreveu o hamiltoniano de troca como:

$$\mathcal{H}_{troca} = -2J_{troca} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \quad (1.16)$$

Este é o chamado *Hamiltoniano de Heisenberg*, base dos modelos de magnetismo nos sólidos. Para íons em cristais, isto é, com muitos momentos magnéticos, o hamiltoniano acima é escrito como um somatório:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.17)$$

Como  $J_{ij}$  é de curto alcance, a soma é frequentemente tomada sobre os vizinhos mais próximos. A soma aqui é feita sobre todos os pares de sítios onde  $i$  e  $j$  são primeiros vizinhos ( $\langle i,j \rangle$ ). Em um cristal anisotrópico (de pouca simetria), as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  não são equivalentes. O hamiltoniano de troca neste caso assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (\epsilon_x S_i^x S_j^x + \epsilon_y S_i^y S_j^y + \epsilon_z S_i^z S_j^z) \quad (1.18)$$

A equação acima é conhecida como *Hamiltoniano de Heisenberg Anisotrópico*. Quando  $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_z$ , recuperamos o Hamiltoniano de Heisenberg Isotrópico. No caso em que  $\epsilon_x = \epsilon_y = 0$  e  $\epsilon_z = 1$ , temos o chamado Hamiltoniano de Ising

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} S_i^z \cdot S_j^z \quad (1.19)$$

onde podemos encontrar muitos trabalhos com este modelo na literatura.

Deixamos claro aqui, que o modelo para momentos magnéticos localizados, isto é, os momentos magnéticos são considerados fixos nos sítios da rede, só é apropriado para sistemas isolantes como o  $\text{FeF}_2$ ,  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ , ou para metais onde os momentos surgem de camadas atômicas internas que não formam bandas, como é o caso da camada  $4f$  nos lantanídeos. Nos metais do tipo terra-rara como o Dy, Eu, Sm, etc, os orbitais  $4f$  são fortemente localizados. Por outro lado, elétrons em uma banda de condução de um metal podem viajar por todo o cristal. Em materiais com essas características, a visão localizada do magnetismo não é apropriada. Falamos então de *magnetismo de banda* ou *magnetismo itinerante*.

A integral de troca pode ser medida através de vários experimentos:

- diretamente do espectro de ressonância paramagnética e/ou espectro óptico de pares de íons em cristais diamagnéticos;
- das relações de dispersão de magnons (ondas de spin) por espalhamento de nêutrons;
- da análise dos dados magnéticos, particularmente a dependência com a temperatura da magnetização total e/ou magnetização de sub-redes.



## 1.2.2 A Interação Dipolar

Junto as interações isotrópicas que são consideradas no balanço de energia, nós podemos também considerar interações anisotrópicas de várias origens. Essas interações de ordem mais baixas são de estrutura dipolar, descritas na forma

$$\frac{1}{2}g^2\mu_B^2 \sum_{i,j} \left\{ \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{i,j})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{i,j})}{r_{i,j}^5} \right\} \quad (1.20)$$

que representa a interação dipolo-dipolo magnética, isto é, o potencial magnetostático de cada spin no campo dos outros [19].

Esta interação está presente em todos os sistemas reais, onde o somatório é calculado sobre todos os possíveis pares de sítios na rede e  $\mathbf{r}_{ij}$  é o vetor que conecta o sítio  $i$  ao sítio  $j$ . Apesar de ser de longo alcance ( $1/r^3$ ), sua intensidade é muito fraca para explicar as altas temperaturas de ordenamento. Em muitos estudos teóricos de sistemas magnéticos esta interação é desconsiderada. A razão para isto é a pequena magnitude da interação dipolar relativa a magnitude da interação de troca. Mesmo assim, a muito baixas temperaturas não deve ser desprezada. Em sistemas de baixa dimensionalidade, a interação dipolar pode ter um papel essencial na determinação das propriedades magnéticas. Além disso, a interação dipolar entre qualquer dois spins na rede não apenas decai lentamente com a distância, mas também depende de ambas as orientações relativas dos dois spins e suas orientações relativas ao vetor que liga os dois sítios. Consequentemente, o estado fundamental de um sistema determinado apenas pela interação dipolar difere do estado fundamental de um sistema determinado apenas pela interação de troca.

## 1.2.3 A Interação de Anisotropia

Devido ao fato das funções de onda atômicas dos íons magnéticos muitas vezes não serem esféricas (tipo  $d$  nos metais de transição e principalmente  $f$  nas terras raras), estas procuram se acomodar segundo o campo magnético cristalino no sítio em que se encontram. Como decorrência disto, existem eixos preferenciais ao longo dos quais os momentos magnéticos se alinham chamados de *eixos de fácil magnetização*. Outras direções em que os momentos magnéticos atômicos não “gostam” de apontar, pois custa muita energia, são chamados de *eixos de difícil magnetização* ou *eixos duros*. Os spins eletrônicos sentem esta *anisotropia* através da *interação spin-órbita* [14]. Dependendo da simetria cristalina, pode-se ter um ou mais eixos de anisotropia (ou fácil magnetização). Em cristais com simetrias hexagonais, tetragonais e trigonais, há um eixo fácil, *anisotropia uniaxial*, cuja

energia anisotrópica pode ser descrita em série de potências [14]:

$$E_A = -K_1 \cos^2 \theta - K_2 \cos^4 \theta - \dots \quad (1.21)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre o eixo fácil e o momento magnético e,  $K_1$  e  $K_2$  são as constantes de anisotropia uniaxial de primeira e segunda ordem. Veja que se  $K_1$  e  $K_2$  forem positivas, a energia é mínima quando o momento magnético estiver na direção  $\theta = 0, \pi$  (eixo fácil). Por outro lado, se  $K_1$  e  $K_2$  forem negativas, a energia será mínima quando  $\theta = \pi/2$ , caracterizando o *plano fácil de magnetização*, perpendicular ao eixo de simetria. Geralmente só é necessário considerar o primeiro termo da série ( $K_1$ ). O cobalto, cuja estrutura cristalina é hexagonal, possui anisotropia cristalina  $K_1 = 53 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ . A equação acima é também equivalente a hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_A = -K_1 S_z^2 \quad (1.22)$$

Além da estrutura cristalina, a anisotropia decorre de diversos fatores: forma da amostra, stress interno, temperatura e até mesmo a interação de troca como vimos na equação (1.18).

### 1.2.4 A Interação Zeeman

Além de interagirem entre si, os momentos magnéticos também interagem com campos magnéticos. Por exemplo, se um dipolo de momento  $\boldsymbol{\mu}$  é colocado sob a influência de um campo uniforme  $\mathbf{H}$ , este dipolo está sujeito a um torque  $\boldsymbol{\Gamma}$ , dado por

$$\boldsymbol{\Gamma} = -\boldsymbol{\mu} H \sin \theta \quad (1.23)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\boldsymbol{\mu}$  e  $\mathbf{H}$ . Em vetores, pode-se ser escrito como

$$\boldsymbol{\Gamma} = -\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H} \quad (1.24)$$

A ação do campo uniforme é então tender a girar o dipolo até que este fique paralelo ao campo. Em Mecânica Quântica, o momento magnético  $\boldsymbol{\mu}$  de um átomo está diretamente relacionado ao seu momento angular  $\mathbf{J}$ :

$$\boldsymbol{\mu} = g\mu_B \mathbf{J} \quad (1.25)$$

onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $g$  é o fator de Landé dados por:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9,274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

sendo  $m_e$  e  $e$ , a massa e a carga do elétron, respectivamente.

O valor de  $g$  varia de acordo com as contribuições orbitais e intrínsecas para o momento angular total. Se o momento orbital total  $L$  for nulo, como ocorre por exemplo em uma camada atômica semi-cheia, teremos  $g = 2$ .

Para um dado estado de momento angular total  $\mathbf{J}$  do átomo, o hamiltoniano da interação entre o momento magnético  $\boldsymbol{\mu}$ , e um campo magnético  $\mathbf{H}$  é dado por:

$$\mathcal{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} \quad (1.26)$$

Para o caso em que o campo é estático apontando na direção  $z$ ,  $\mathbf{H} = H_0 \mathbf{k}$ , e o momento orbital total for nulo, temos:

$$\mathcal{H} = -g\mu_B H_0 S_z \quad (1.27)$$

### 1.3 As Ondas de Spin

Considerando uma amostra ferromagnética de volume unitário a temperatura 0 K, e assumindo que um eixo de quantização é estabelecido por um campo magnético pequeno aplicado ao longo da direção  $z$ , a terceira lei da termodinâmica requer que os momentos magnéticos de um sistema estejam completamente ordenados. Por causa disto, o sistema deve também estar em seu estado fundamental. Segue-se que o número quântico de spin de cada átomo terá seu valor máximo. Para  $S = 1/2$  e  $g = 2$ , o momento magnético total é então dado por  $\mathbf{M} = N\boldsymbol{\mu}_B$ , onde  $N$  é o número de átomos por unidade de volume. Agora, supondo que a temperatura é aumentada levemente, de modo que um spin é desviado (isto presumidamente é o estado excitado mais baixo do sistema), então cada átomo tem uma probabilidade igual de ser o átomo de quem o spin está desviado. Isto sugere que o spin desviado não ficará localizado em um único átomo. A interação de troca tenderá a alinhar o spin desviado. Uma possibilidade é uma transição de volta ao estado fundamental; isto é relativamente improvável. Em vez disso, ocorre que o spin desviado viaja de um átomo a outro, pois a troca sempre ocorre entre vizinhos. Esta propagação do desvio do spin através do cristal é chamado de *onda de spin* [20, 21]. Basicamente, ondas de spin são excitações magnéticas elementares do tipo onda; um movimento coletivo do desvio dos spins. Levando em conta a natureza quântica dos spins, temos o *magnon* que é o quantum do desvio do spin. Classicamente, essas excitações correspondem a uma precessão dos spins em que a fase de um spin relativo ao outro é determinado pelo vetor

de onda  $\mathbf{q}$  (fig. 1.4).

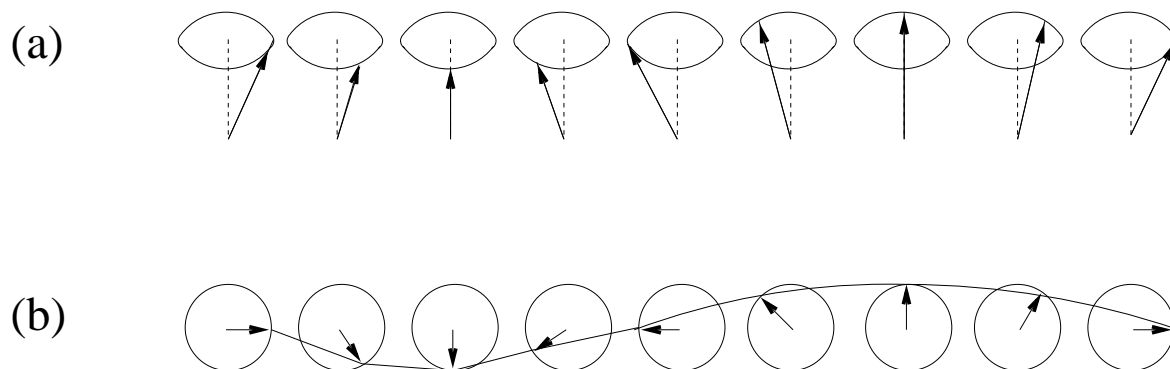


Figura 1.4: Ilustração de uma onda de spin na visão semi-clássica propagando-se em uma cadeia ferromagnética. Os spins precessionados em um dado tempo são mostrados em perspectivas em (a) e, em (b) temos a vista de cima mostrando o seu comprimento de onda.

Agora supondo que como resultado de um aumento maior na temperatura o cristal tenha dois spins desviados, duas complicações adicionais ocorrem. Primeiro, os dois spins desviados, ou ondas de spin, em geral, estarão viajando com diferentes velocidades e eles se encontrarão em algum tempo. O resultado é um espalhamento. Segundo, existe uma possibilidade que os spins desviados estejam ligados juntos em átomos adjacentes. Este estado tem uma energia de troca menor do que quando os dois spins desviados estão separados. Se mais que dois spins são desviados no cristal, o mesmo tipo de complicação ocorre, embora existam mais colisões. A aproximação usual em teoria de onda de spin é para desprezar estas complicações e para assumir que as ondas de spin são independentes umas das outras. Então a energia total de um número de ondas de spin é a soma das energias das ondas de spin individuais. Esta consideração só é válida apenas quando o número de spins desviados é pequeno, isto é, para temperaturas bem abaixo da temperatura de Curie. O erro no cálculo da magnetização quando as interações de onda de spin são desprezadas é menor que 5% [22].

O interesse pelo estudo das ondas de spins reside em pelo menos dois fatores. Primeiro, como as outras excitações da matéria, os magnons desempenham um papel importante para se determinar as propriedades termodinâmicas de um sistema, desde que magnons são excitações de spin a partir do estado fundamental, eles são termicamente excitados quando o sistema se encontra a uma temperatura finita. A quantidade de magnons excitados determina o comportamento de várias quantidades termodinâmicas, tais como a

magnetização e o calor específico. Podemos afirmar portanto que, se de um lado o conhecimento das propriedades de magnons a temperaturas nas quais eles não estão muito densamente povoados nos permite prever as propriedades termodinâmicas, de outro lado, a medida das quantidades termodinâmicas fornece informações gerais sobre as propriedades dos magnons. Segundo, as ondas de spin são afetadas por estímulos externos de diferentes tipos, tal como a radiação eletromagnética. Então elas têm uma influência direta na resposta dinâmica de um sistema magnético. Os magnons têm sido excitados e detectados em um grande número de materiais sob diferentes circunstâncias por várias técnicas, tais como: rádio-frequência, microondas, espectroscopia infravermelha e óptica, espalhamento inelástico de nêutrons e da luz.

Para se estudar um sistema de spins sob estas considerações, faz-se necessário o uso de uma técnica refinada, que valha tanto para um sistema de muitos *quanta*, quanto para hamiltonianos mais complexos. Uma técnica poderosa, é a chamada *segunda quantização*, que consiste basicamente em obter o hamiltoniano na forma diagonal, em termos dos operadores de criação e destruição de magnons. Existem muitas formas de se fazer isto. Neste trabalho usaremos a *Representação Holstein-Primakoff* [23]. A razão para isto, é que esta transformação introduz os operadores de desvio do spin localizado. Se tomarmos o hamiltoniano da equação (1.17), veremos que envolve as três componentes  $S_i^x$ ,  $S_i^y$  e  $S_i^z$  de cada spin  $\mathbf{S}_i$ . As componentes não são independentes, pois estão conectadas pela identidade  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = S(S+1)$ . É mais conveniente trabalhar com dois operadores que são independentes ( $a^\dagger$ ,  $a$ ). O operador para o número de desvios do spin em um sítio  $i$  é

$$n_i = S - S_i^z \quad (1.28)$$

onde os autoestados deste operador são os estados  $|S_i^z\rangle$ . O operador criação de desvios do spin  $a_i^\dagger$  é o operador que cria um quantum de desvio do spin, isto é, aquele que reduz  $S_i^z$  de uma unidade. Analogamente, o operador destruição de desvios do spin  $a_i$  é o operador que destrói um quantum de desvio do spin. Outro fato importante, é esta transformação permitir “atacar” sistematicamente o problema de grandes flutuações quânticas usando uma expansão com respeito a potência de  $1/2S$  do limite clássico, onde  $S$  é o módulo dos spins [24].

## 2 *O Nanofio Ferromagnético*

### 2.1 Introdução

Existe muito interesse pelo estudo de sistemas de baixa dimensionalidade, porque as propriedades magnéticas dos materiais dependem da sua dimensão, isto é, se estes se apresentam como um sólido de três dimensões, ou se, apresentam como um filme fino (bidimensional). Nas amostras não volumosas, uma ou mais das suas dimensões podem ter grandeza nanoscópica. A dependência com dimensionalidade é especialmente importante quando as dimensões menores se aproximam das dimensões dos domínios, ou mais além, quando são da ordem das dimensões atômicas. Segundo a dimensionalidade, os materiais são classificados em: granulares (quase zero-dimensionais), nanofios (unidimensionais), filmes finos (bidimensionais), ou volumosos ou massivos (tridimensionais). Abaixo mostramos uma tabela onde a dimensionalidade de um material muda os valores dos momentos magnéticos dados em unidade de magneton de Bohr ( $\mu_B$ ).

Dim	Ni	Fe
0	2,0	4,0
1	1,1	3,3
2	0,68	2,96
3	0,56	2,27

Outra questão fundamental é que as propriedades magnéticas de sistemas de baixa dimensionalidade permitem uma modelagem teórica [25], que faz com que as medições experimentais possam ser interpretadas com facilidade, dando subsídios para o aperfeiçoamento das teorias, principalmente no entendimento de transições de fase e fenômenos críticos [26, 27, 28]. Além disso, há um grande potencial de aplicação desses materiais em

dispositivos magneto-eletrônicos, tais como nanosensores e gravadores magnéticos de alta densidade [29]. Neste último caso, uma densidade de 1 Tbit/pol<sup>2</sup> foi alcançada [30].

Várias técnicas como a de moldagem litográfica, litografia de feixes de elétrons e eletrodeposição em modelos porosos são usados para a fabricação de estruturas de baixas dimensionalidades [31, 32, 33]. Para citar exemplos de trabalhos realizados nesses sistemas, em especial nanofios magnéticos, temos:

- O estudo de sistemas intermetálicos de Terra Raras e Metais de Transição - estes compostos apresentam excelentes propriedades para a fabricação de ímãs permanentes. Entre estes compostos estão os de simetria hexagonal, pois formam os sistemas uniaxiais de mais alta simetria e esta uniaxialidade é fundamental para a obtenção de ímãs permanentes. A alta simetria cristalina reduz o número de parâmetros necessários à descrição das propriedades magnéticas, facilitando assim a determinação quantitativa dessas propriedades. Neste contexto, os compostos RNi<sub>5</sub> e seus isomorfos RCu<sub>5</sub> (R = Terra Rara) estão entre os mais apropriados a tais estudos. Os compostos intermetálicos RNi<sub>5</sub> e RCu<sub>5</sub> cristalizam-se na estrutura hexagonal do tipo CaCu<sub>5</sub> [34]. Na fase ordenada, o RNi<sub>5</sub> apresenta um comportamento ferromagnético colinear [35], enquanto que o RCu<sub>5</sub>, dependendo da terra rara, apresenta comportamento ferro, ferri ou metamagnético [35, 36].

- O estudo da interação de troca em aminoácidos de cobre - os momentos magnéticos do cobre nestas estruturas ficam situados numa rede cristalina arranjados em planos ou em cadeias lineares. Estas estruturas bidimensionais ou unidimensionais, havendo interações magnéticas entre eles, produzem sistemas magnéticos (modelos de baixa dimensionalidade) cujo o comportamento é previsto por modelos estatísticos [37, 38, 39]. Através de medidas de calor específico e/ou magnetização, pode-se comparar com diversos modelos teóricos, pelos quais obtém-se os parâmetros das interações de troca entre os momentos magnéticos. Medidas de magnetização em altos campos magnéticos e temperaturas muito baixas fornecem de maneira mais direta os valores das interações de troca e permitem a determinação das constantes de anisotropia nestes sistemas.

Podemos modelar os nanofios ferromagnéticos cilíndricos escolhendo (arbitrariamente) a geometria e o tamanho da camada da seção transversal, e em seguida, empilhando estas camadas atômicas verticalmente uma sobre a outra para formar um nanofio longo com simetria translacional ao longo da direção de empilhamento. Neste trabalho, nós consideramos nanofios com seção transversal hexagonal (no plano  $xy$ ), cuja direção de empilhamento (eixo- $z$ ) se estende de  $-\infty$  a  $+\infty$  (fig. 2.1). Cada camada tem um número finito  $N$  de spins que obedece a lei de formação  $N = 3r(r + 1) + 1 = 7, 19, 37, \dots$ ,

organizados em uma rede triangular de parâmetro  $a$  (fig. 2.2), onde  $r$  é o raio do nanofio [40, 41].

Desenvolvemos para os nanofios uma teoria microscópica para ondas de spin no regime onde tanto a interação de troca como dipolar possam fornecer contribuições comparáveis para os processos dinâmicos. O método que empregamos aqui é análogo ao de trabalhos recentes em filmes finos ferromagnéticos [42, 43].

## 2.2 O Hamiltoniano

Escrevamos o hamiltoniano do nanofio ferromagnético adotando  $n, m$  como os índices da camada e  $i, j$  indexando a posição dos spins em uma camada particular.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{\langle in, jm \rangle} J_{in, jm} \mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{jm} - g\mu_B H_0 \sum_{in} S_{in}^z \\ & + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 \sum_{in, jm} \left\{ \frac{\mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{jm}}{r_{in, jm}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{r}_{in, jm})(\mathbf{S}_{jm} \cdot \mathbf{r}_{in, jm})}{r_{in, jm}^5} \right\} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Onde o primeiro somatório representa a interação de troca ferromagnética, e a notação  $\langle in, jm \rangle$  significa que ocorre apenas entre primeiros vizinhos. O segundo somatório corresponde a interação com o campo magnético uniforme externo aplicado na direção e sentido de magnetização dos spins (longitudinal). A última parcela denota a contribuição da interação dipolar, sendo que o somatório em  $in, jm$  corre sobre todos os sítios, o que mostra sua natureza de longo-alcance, onde o vetor  $\mathbf{r}_{in, jm} = (\mathbf{r}_{jm} - \mathbf{r}_{in})$  conecta os sítios magnéticos na rede. O fator  $1/2$  evita a dupla contagem nas somas.

## 2.3 A Representação Holstein-Primakoff

Podemos escrever em termos de operadores escadas as componentes dos operadores de spin conforme as definições [11, 12]:

$$\begin{aligned} S_i^\pm &= S_i^x \pm iS_i^y \\ S_j^\pm &= S_j^x \pm iS_j^y \end{aligned} \quad (2.2)$$

Estes operadores obedecem as regras de comutação abaixo ( $\hbar = 1$ ):

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^z \delta_{ij} \\ [S_i^z, S_j^\pm] &= S_i^\pm \delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Escrevendo os operadores  $S^\pm$  em função dos operadores bosônicos de criação e ani-



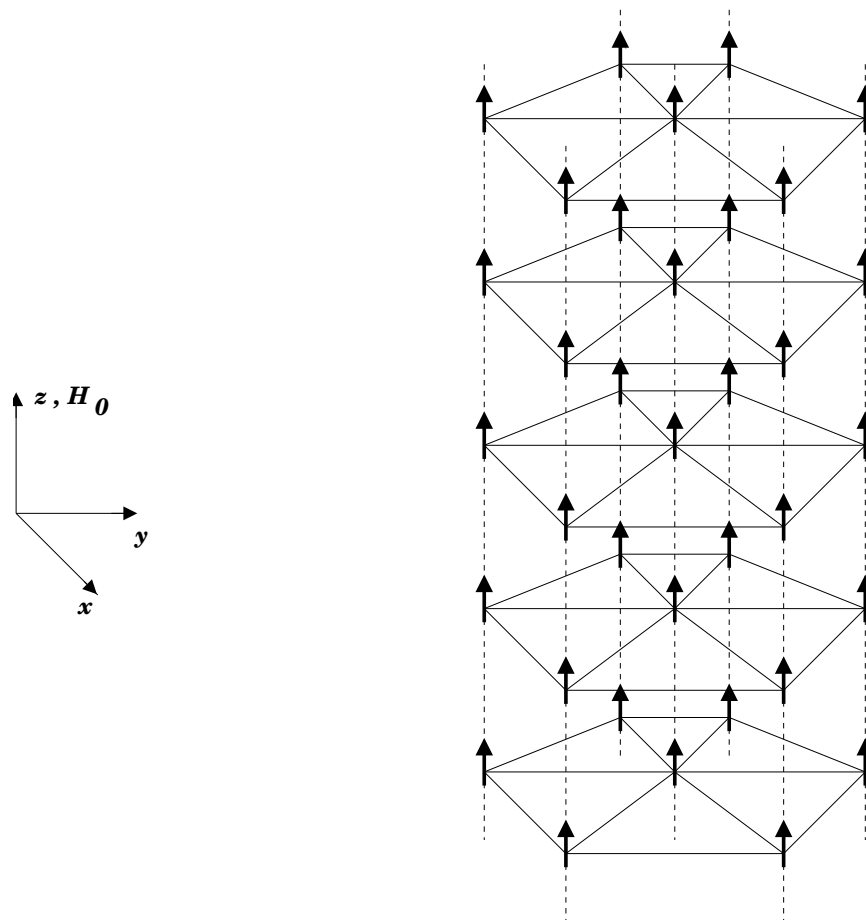


Figura 2.1: Representação de um nanofio ferromagnético com  $N = 7$ , submetido à presença de um campo magnético uniforme externo longitudinal ( $H_0$ ), onde  $a$  é o parâmetro de rede.

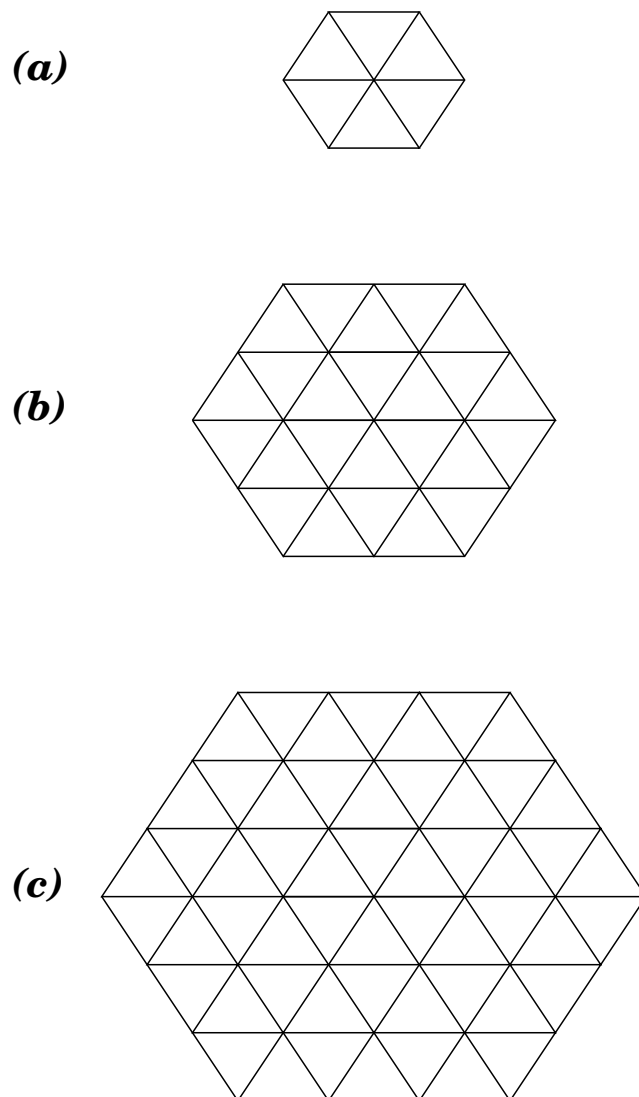


Figura 2.2: Seções transversais de nanofios magnéticos para: (a)  $N = 7$ , (b)  $N = 19$  e (c)  $N = 37$ .

quiação através da representação Holstein-Primakoff [23], associaremos aos spins: um operador criação (dos desvios do spin) para  $S_i^-$ ; um operador aniquiação (dos desvios do spin) para  $S_i^+$  e um operador número (número de desvios do spin) para  $S_i^z$ .

$$S_{in}^+ = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}}{2S} \right)^{1/2} a_{in} \quad (2.4)$$

$$S_{in}^- = \sqrt{2S} a_{in}^\dagger \left( 1 - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}}{2S} \right)^{1/2} \quad (2.5)$$

$$S_{in}^z = S - a_{in}^\dagger a_{in} \quad (2.6)$$

Os operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  satisfazem as relações de comutação para bosons [11, 12]

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{i,j} \\ [a_i, a_j] &= 0 \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

O valor esperado do número de desvios do spin ( $a_i^\dagger a_i = S - S_i^z$ ) é pequeno, no regime de baixas temperaturas. Assim,  $S_i^z \approx S$  e  $a_i^\dagger a_i / 2S \ll 1$ , o que nos possibilita expandir os radicais das equações (2.4) e (2.5)

$$S_{in}^+ \approx \sqrt{2S} \left( a_{in} - \frac{a_{in}^\dagger a_{in} a_{in}}{4S} + \dots \right) \quad (2.8)$$

$$S_{in}^- \approx \sqrt{2S} \left( a_{in}^\dagger - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}^\dagger a_{in}}{4S} + \dots \right) \quad (2.9)$$

e, com boa aproximação, desprezar os termos de ordem acima de dois operadores na expansão. Assim,

$$S_{in}^+ = \sqrt{2S} a_{in} \quad (2.10)$$

$$S_{in}^- = \sqrt{2S} a_{in}^\dagger \quad (2.11)$$

Aplicando as considerações feitas acima, o hamiltoniano torna-se

$$\mathcal{H} = -g\mu_B H_0 \sum_{in} S + g\mu_B H_0 \sum_{in} a_{in}^\dagger a_{in} - \frac{1}{2} \sum_{\langle in, jm \rangle} J_{in, jm} S^2$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\langle in,jm \rangle} J_{in,jm} S (a_{in}^\dagger a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{in}) + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 \\
& \times \sum_{in,jm} \left\{ \frac{S^2}{r_{in,jm}^3} + \frac{2S}{r_{in,jm}^3} (a_{in}^\dagger a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{in}) - \frac{3}{r_{in,jm}^5} \left[ \frac{r_{in}^x r_{jm}^x S}{2} \right. \right. \\
& \left. \left. (a_{in} a_{jm} + a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger + 2a_{in}^\dagger a_{jm}) - \frac{r_{in}^y r_{jm}^y S}{2} (a_{in} a_{jm} + a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger - 2a_{in}^\dagger a_{jm}) \right. \right. \\
& \left. \left. + r_{in}^z r_{jm}^z (S^2 - 2S a_{in}^\dagger a_{in}) - i r_{in}^x r_{jm}^y S (a_{in} a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger) \right. \right. \\
& \left. \left. + r_{in}^x r_{jm}^z S \sqrt{2S} (a_{in} + a_{in}^\dagger) - r_{in}^y r_{jm}^z i S \sqrt{2S} (a_{in} - a_{in}^\dagger) \right] \right\} \quad (2.12)
\end{aligned}$$

O hamiltoniano nesta representação pode ser expandido como  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(2)} + \mathcal{H}^{(3)} + \dots$ , onde  $\mathcal{H}^{(p)}$  denota um termo com  $p$  operadores bosons. O termo  $\mathcal{H}^{(0)}$

$$\mathcal{H}^{(0)} = -g\mu_B H_0 \sum_{in} S - \frac{1}{2} \sum_{\langle in,jm \rangle} J_{in,jm} S^2 + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S^2 \sum_{in,jm} \left[ \frac{1}{r_{in,jm}^3} - \frac{3r_{in}^z r_{jm}^z}{r_{in,jm}^5} \right] \quad (2.13)$$

não depende de nenhum dos operadores, representando a energia do sistema no estado fundamental, o que não nos importa neste trabalho, pois estamos interessados nas excitações do sistema. O termo  $\mathcal{H}^{(1)}$

$$\mathcal{H}^{(1)} = \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sqrt{2S} \sum_{in,jm} \frac{3}{r_{in,jm}^5} \left[ r_{in}^x r_{jm}^z (a_{in} + a_{in}^\dagger) - i r_{in}^y r_{jm}^z (a_{in} - a_{in}^\dagger) \right] \quad (2.14)$$

desaparece por simetria no somatório em  $i$ , no caso do campo longitudinal. O termo  $\mathcal{H}^{(2)}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(2)} & = g\mu_B H_0 \sum_{in} a_{in}^\dagger a_{in} - S \sum_{\langle in,jm \rangle} J_{in,jm} (a_{in}^\dagger a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{in}) \\
& + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sum_{in,jm} \left\{ \frac{2}{r_{in,jm}^3} (a_{in}^\dagger a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{in}) - \frac{3}{r_{in,jm}^5} \left[ \frac{r_{in}^x r_{jm}^x}{2} \right. \right. \\
& \times (a_{in} a_{jm} + a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger + 2a_{in}^\dagger a_{jm}) - \frac{r_{in}^y r_{jm}^y}{2} (a_{in} a_{jm} + a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger - 2a_{in}^\dagger a_{jm}) \\
& \left. \left. - 2r_{in}^z r_{jm}^z (a_{in}^\dagger a_{in}) - i r_{in}^x r_{jm}^y (a_{in} a_{jm} - a_{in}^\dagger a_{jm}^\dagger) \right] \right\} \quad (2.15)
\end{aligned}$$

corresponde ao hamiltoniano quadrático total, sendo responsável pelas excitações do sistema, pois dependem do par de operadores criação e/ou destruição de estados. Os termos acima de dois operadores não consideraremos aqui, pois eles causam efeitos não lineares nos espectros do sistema, ficando para trabalhos futuros.

Como há simetria translacional em uma direção, podemos realizar as transformadas

de Fourier unidimensionais dos operadores  $a_{in}^\dagger$  e  $a_{in}$  dados em função das coordenadas dos sítios da rede, para os operadores de magnons,  $a_{q,n}^\dagger$  e  $a_{q,n}$ , escritos em função do vetor de onda ao longo do eixo do fio, através das definições abaixo,

$$a_{in} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q},n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{q},n} \quad (2.16)$$

$$a_{in}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q},n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{q},n}^\dagger \quad (2.17)$$

onde  $\mathbf{q} = (q_z)$  é o vetor de onda,  $\mathbf{r}_i = (z_i)$  é a posição do sítio  $i$ ,  $N_0$  é o número de sítios em cada linha atômica, e  $n = 1, 2, \dots, N$  é o índice de cada linha atômica, sendo  $N$  o número total de linhas atômicas no fio. A transformada de Fourier 1D para o termo de troca definimos como:

$$u_n(q) = \sum_{\mathbf{d}_1} J_{in,jm} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}_1} \quad (2.18)$$

$$v_{n,n\pm 1}(q) = \sum_{\mathbf{d}_2} J_{in,jm} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}_2} \quad (2.19)$$

onde  $\mathbf{d}_1$  e  $\mathbf{d}_2$  correspondem as distâncias entre um sítio e seus primeiros vizinhos na mesma camada e nas camadas adjacentes, respectivamente. Os termos que dependem da posição podem ser reescritos na equação (2.15) na forma

$$D_{in,jm}^{\alpha\beta} = \frac{|\mathbf{r}_{in,jm}|^2 \delta_{\alpha\beta} - 3r_{in,jm}^\alpha r_{in,jm}^\beta}{|\mathbf{r}_{in,jm}|^5} \quad (2.20)$$

cuja a transformada é definida como:

$$D_{n,m}^{\alpha\beta}(q) = \sum_z e^{iq_z z} D_{in,jm}^{\alpha\beta} \quad (2.21)$$

com os índices  $\alpha$  e  $\beta$  denotando as componentes cartesianas  $x$ ,  $y$  ou  $z$ . Estas transformações mudam a representação do hamiltoniano do espaço das posições para o espaço dos vetores de onda.

O hamiltoniano transformado torna-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} &= \sum_{q,n} \left\{ g\mu_B H_0 + S \left[ u_n(0) + v_{n,n+1}(0) + v_{n,n-1}(0) \right] \right\} a_{qn}^\dagger a_{qn} \\ &- S \sum_{q,n,m} \left\{ v_{n,n+1}(q) + v_{n,n-1}(q) \right\} a_{qn}^\dagger a_{qm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{2}g^2\mu_B^2S \sum_{q,n,m} \left\{ 2 \left[ D_{n,m}^{zz}(0)a_{qn}^\dagger a_{qm} + D_{n,m}^{zz}(q)a_{qn}^\dagger a_{qm} \right] \right. \\
& - \frac{1}{2} \left[ D_{n,m}^{xx}(q) - D_{n,m}^{yy}(q) - 2iD_{n,m}^{xy}(q) \right] a_{qn} a_{-qm} \\
& \left. - \frac{1}{2} \left[ D_{n,m}^{xx}(-q) - D_{n,m}^{yy}(-q) + 2iD_{n,m}^{xy}(-q) \right] a_{qn}^\dagger a_{-qm}^\dagger \right\} \quad (2.22)
\end{aligned}$$

Fazendo

$$\begin{aligned}
A_{n,m}^{(2)}(q) & = \left\{ g\mu_B H_0 + S \left[ u_n(0) + v_{n,n+1}(0) + v_{n,n-1}(0) \right. \right. \\
& \left. \left. - g^2\mu_B^2 \sum_l D_{n,l}^{zz}(0) \right] \right\} \delta_{nm} - S \left[ v_{n,n+1}(q)\delta_{m,n+1} \right. \\
& \left. + v_{n,n-1}(q)\delta_{m,n-1} + g^2\mu_B^2 D_{n,m}^{zz}(q) \right] \quad (2.23)
\end{aligned}$$

$$B_{n,m}^{(2)}(q) = \frac{1}{4}g^2\mu_B^2S \left\{ D_{n,m}^{xx}(q) - D_{n,m}^{yy}(q) - 2iD_{n,m}^{xy}(q) \right\} \quad (2.24)$$

$$B_{n,m}^{(2)*}(q) = \frac{1}{4}g^2\mu_B^2S \left\{ D_{n,m}^{xx}(-q) - D_{n,m}^{yy}(-q) + 2iD_{n,m}^{xy}(-q) \right\} \quad (2.25)$$

podemos reescrevê-lo como

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_{q,n,m} \left\{ A_{n,m}^{(2)}(q)a_{q,n}^\dagger a_{q,m} + B_{n,m}^{(2)}(q)a_{q,n} a_{-q,m} + B_{n,m}^{(2)*}(q)a_{q,n}^\dagger a_{-q,m}^\dagger \right\} \quad (2.26)$$

No caso do acoplamento de primeiros vizinhos as funções  $u_n(q)$ ,  $v_{n,n+1}(q)$  e  $v_{n,n-1}(q)$  são:

$$u_n(q) = \sigma J \quad (2.27)$$

$$v_{n,n+1}(q) = v_{n,n-1}(q) = J \cos(q) \quad (2.28)$$

onde  $\sigma$  é o número de primeiros vizinhos de um sítio na mesma camada, podendo assumir valores iguais a 3 (nos vértices), 4 (nas faces) ou 6 (no interior do nanofio) (ver fig. 2.2).

Para obtermos o espectro linear de ondas de spin usaremos a descrição usual empregada em mecânica quântica elementar: a Representação de Heisenberg [12, 11]. Basicamente, esta representação descreve a evolução temporal dos operadores, isto é, considera

os operadores serem dependentes do tempo, enquanto que as funções de onda são independentes do tempo. Então, aplicando a equação de movimento nesta representação para os operadores bosons na linha atômica  $n$ ,

$$i\hbar \frac{da_{q,n}^\dagger(t)}{dt} = [a_{q,n}^\dagger(t), \mathcal{H}] \quad (2.29)$$

tomando  $\hbar = 1$ , com o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  substituído por  $\mathcal{H}^{(2)}$  e assumindo uma dependência temporal do tipo  $e^{-i\omega t}$ , como

$$a_{q,n}^\dagger(t) = e^{-i\omega t} a_{q,n}^\dagger(0) \quad (2.30)$$

obtemos:

$$\begin{aligned} \omega a_{q,n}^\dagger = & \sum_{q',n',m} \left\{ A_{n',m}^{(2)}(q') [a_{q',n'}^\dagger a_{q',m}, a_{q,n}^\dagger] + B_{n',m}^{(2)}(q') [a_{q',n'} a_{-q',m}, a_{q,n}^\dagger] \right. \\ & \left. + B_{n',m}^{(2)*}(q') [a_{q',n'}^\dagger a_{-q',m}^\dagger, a_{q,n}^\dagger] \right\} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Das regras de comutação para bosons

$$\begin{aligned} [a_{q',n'}^\dagger a_{q',m}, a_{q,n}^\dagger] &= a_{q',n'}^\dagger \delta_{qq'} \delta_{nm} \\ [a_{q',n'}^\dagger a_{-q',m}, a_{q,n}^\dagger] &= a_{q',n'}^\dagger \delta_{-q'q} \delta_{nm} \\ [a_{q',n'} a_{-q',m}, a_{q,n}^\dagger] &= a_{q',n'} \delta_{-q'q} \delta_{nm} + a_{-q',m} \delta_{qq'} \delta_{nn'} \\ [a_{q',n'}^\dagger a_{-q',m}^\dagger, a_{q,n}^\dagger] &= 0 \end{aligned} \quad (2.32)$$

a equação (2.29) torna-se

$$\omega a_{q,n}^\dagger = \sum_{n'} \left\{ A_{n',n}^{(2)}(q) a_{q,n}^\dagger + \left[ B_{n,n'}^{(2)}(q) + B_{n',n}^{(2)}(-q) \right] a_{-q,n'} \right\} \quad (2.33)$$

E com a solução  $a_{-q,n}(t) = e^{-i\omega t} a_{-q,n}(0)$ , na equação de movimento na representação de Heisenberg, seguindo o mesmo procedimento acima, obtemos:

$$-\omega a_{-q,n'} = - \sum_{n'} \left\{ \left[ B_{n,n'}^{(2)*}(-q) + B_{n',n}^{(2)*}(q) \right] a_{q,n}^\dagger + A_{n,n'}^{(2)}(-q) a_{-q,n'} \right\} \quad (2.34)$$

Existem  $2N$  equações acopladas no total, onde  $N$  é o número de linhas atômicas do fio. Usando as propriedades de simetria  $B_{n,n'}^{(2)*}(-q) = B_{n',n}^{(2)*}(q)$ ,  $B_{n,n'}^{(2)}(-q) = B_{n',n}^{(2)}(q)$  que surgem das propriedades das somas de dipolo e a propriedade  $J_{ij} = J_{ji}$  [43], temos

$$\omega a_{q,n}^\dagger = \sum_{n'} \left\{ A_{n',n}^{(2)}(q) a_{q,n}^\dagger + \left[ 2B_{n,n'}^{(2)}(q) \right] a_{-q,n'} \right\} \quad (2.35)$$

$$-\omega a_{-q,n'} = - \sum_{n'} \left\{ \left[ 2B_{n,n'}^{(2)*}(-q) \right] a_{q,n}^\dagger + A_{n,n'}^{(2)}(-q) a_{-q,n'} \right\} \quad (2.36)$$

podemos então montar a seguinte equação matricial de autovalores:

$$\begin{bmatrix} A_{11}^{(2)} - \omega & \dots & A_{1N}^{(2)} & 2B_{11}^{(2)} & \dots & 2B_{1N}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1}^{(2)} & \dots & A_{NN}^{(2)} - \omega & 2B_{N1}^{(2)} & \dots & 2B_{NN}^{(2)} \\ -2B_{11}^{(2)*} & \dots & -2B_{1N}^{(2)*} & -\tilde{A}_{11}^{(2)} + \omega & \dots & -\tilde{A}_{1N}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -2B_{N1}^{(2)*} & \dots & -2B_{NN}^{(2)*} & -\tilde{A}_{N1}^{(2)} & \dots & -\tilde{A}_{NN}^{(2)} + \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{q1}^\dagger \\ \vdots \\ a_{qN}^\dagger \\ a_{-q1} \\ \vdots \\ a_{-qN} \end{bmatrix} = 0 \quad (2.37)$$

Ou mais compactamente:

$$\det \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{q}) - \omega \mathbf{I}_N & 2\mathbf{B}^{(2)}(\mathbf{q}) \\ -2\mathbf{B}^{(2)*}(-\mathbf{q}) & -\tilde{\mathbf{A}}^{(2)}(-\mathbf{q}) + \omega \mathbf{I}_N \end{bmatrix} = 0 \quad (2.38)$$

onde  $\mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{q})$  e  $\mathbf{B}^{(2)}(\mathbf{q})$  são matrizes  $N \times N$  com elementos definidos nas equações (2.23) e (2.24), respectivamente. O sinal de *til* significa que é uma matrix transposta, e  $\mathbf{I}_N$  é a matrix unitária  $N \times N$ .

## 2.4 Resultados Numéricos

Apresentamos nesta seção resultados numéricos para ilustrar o formalismo Hamiltoniano descrito acima em nanofios ferromagnéticos de diversos raios, onde possamos perceber ambas as contribuições das interações de troca e dipolar em toda a primeira zona de Brillouin, na qual  $q$  vai de 0 (centro da zona) a  $2\pi$  (fronteira), no comportamento dinâmico do sistema através de seus espectros, a saber: a variação da frequência (energia) de excitação em relação a variação do vetor de onda e também em relação ao campo magnético externo.

Para os cálculos consideramos a energia de interação dos spins com o campo magnético uniforme externo aplicado na direção e sentido da magnetização dos spins da rede dada por  $h = g\mu_B H_0$  e para as constantes do termo dipolar adotamos  $f_D = g^2 \mu_B^2$ . Estes valores são escolhidos para dar maior ou menor intensidade para as interações supracitadas. Em geral, as interações dipolares têm seus efeitos mais significativos em grandes comprimentos de onda (região magnetostática), em outras palavras, em pequenos vetores de onda. Também optamos, a princípio, por atribuir valores arbitrários para todos os parâmetros, ficando para trabalhos futuros os cálculos com parâmetros realísticos.



### 2.4.1 Sem Interação Dipolar

Primeiramente, nesta sub-seção, não levaremos em conta a influência da interação dipolar na dinâmica do sistema. Estaremos interessados apenas no espectro de excitação dos spins devido a ação da interação de troca, que eventualmente, pode-se ter um campo externo aplicado.

Consideramos de início um nanofio ferromagnético com raio efetivo  $r = 1$ , que corresponde a um número de spins localizados  $N = 7$  nas camadas (seção transversal). O gráfico da figura (2.3) apresenta a sua relação de dispersão, onde não há aplicação de campo magnético externo. Os valores dados aos outros parâmetros são  $S = J = 1, 0$ , que se repetirá em todos os gráficos incluindo o caso antiferromagnético, a menos que seja dito o contrário. Primeiramente, notamos que o espectro não forma um contínuo, isto é, os modos se apresentam discretos, como era de se esperar ao usar teoria microscópica com abordagem quântica. Constatamos a existência de cinco modos discretos, sendo que dois estão degenerados, pois no caso ferromagnético, o número de linhas atômicas do nanofio é igual ao número de modos. As frequências das ondas de spin em  $q = 0$  correspondem a:  $\omega/SJ = 0, 2, 2, 4, 4, 5, 7$ , em ordem crescente (ver [41]).

Para este mesmo nanofio recalculamos a relação de dispersão, só que desta vez, um campo magnético externo longitudinal atua, com valor  $h = 1, 0$  (fig. 2.4). O resultado é o deslocamento (*gap*) vertical dos modos, implicando no aumento da energia de excitação ( $E = \hbar\omega$ ) das ondas de spin do sistema. Pois, quanto maior o campo a ser aplicado, maior a energia de interação Zeeman. É interessante notar que a aplicação de campo magnético longitudinal não é capaz de quebrar a degenerescência dos modos no caso ferromagnético.

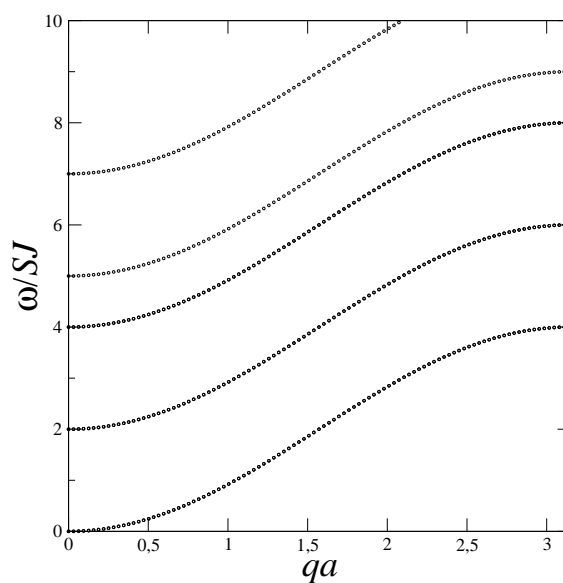


Figura 2.3: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 7$  na ausência de campo magnético aplicado tomando  $S = J = 1, 0$ .

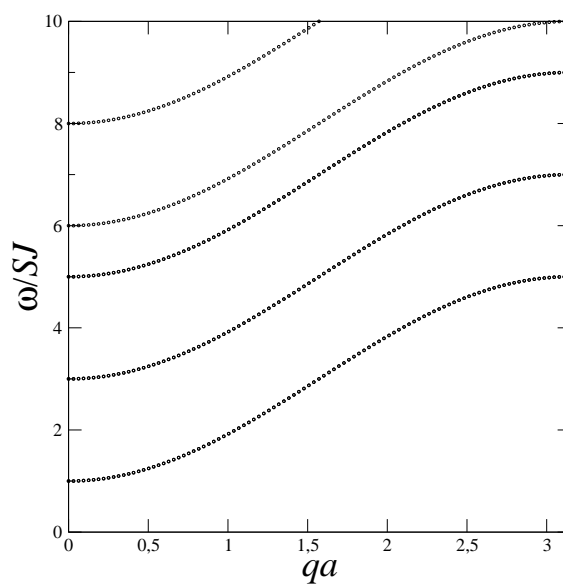


Figura 2.4: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 7$  na presença de campo magnético externo com valor arbitrário  $h = 1, 0$ .

Os dois resultados seguintes também mostram o comportamento da frequência de ondas de spin em função do vetor de onda para nanofios com  $N = 19$  ( $r = 2$ ) e  $N = 91$  ( $r = 5$ ), nos gráficos das figuras (2.5) e (2.6) respectivamente. Fizemos esses cálculos atribuindo valor nulo ( $h = 0$ ) para o campo magnético externo em ambos os casos, onde observamos com estes espectros que o número de modos com degenerescência cresce com o aumento do raio do nanofio. Imaginamos que o fenômeno da degenerescência se deve ao fato do sistema ter uma alta simetria. Podemos notar uma tendência a formação de bandas em regiões localizadas do espectros. Mas para podermos afirmar isso, teríamos de fazer um estudo sistemático da densidade de estados. Deixaremos como perspectivas para trabalhos futuros esse assunto.

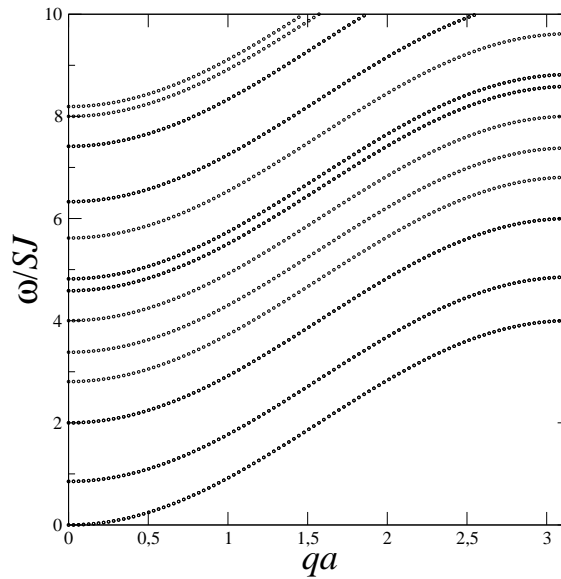


Figura 2.5: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 7$  na ausência de campo magnético externo aplicado.

Outro resultado importante é ver como a variação da energia se comporta em relação a um campo externo quando este atua no sistema, principalmente se for um antiferromagneto como veremos no próximo capítulo. O gráfico da figura (2.7) mostra que há um crescimento linear da energia de ondas de spin com o campo aplicado. Nestes cálculos fixamos o valor do vetor de onda em  $q = 0$  para um nanofio com  $N = 19$  spins nas seções transversais do sistema.

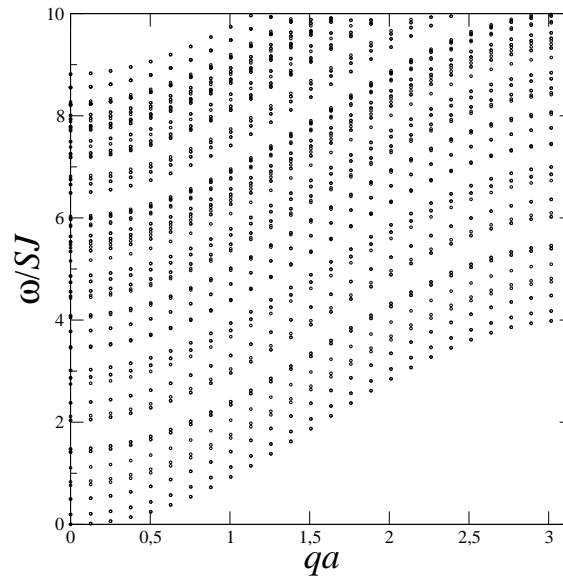


Figura 2.6: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 91$  sem a aplicação de campo externo.

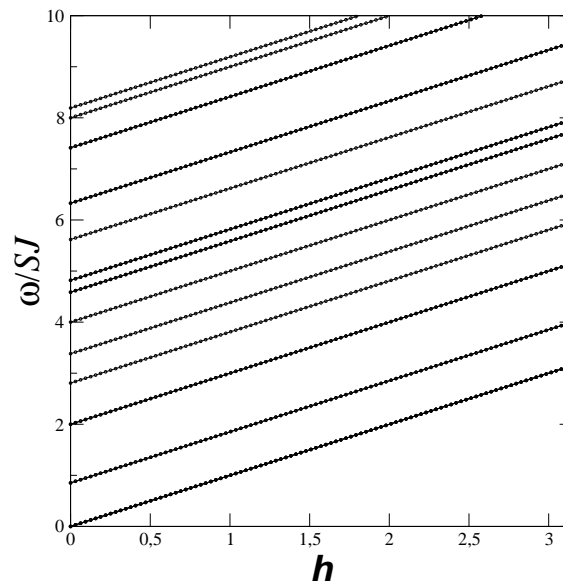


Figura 2.7: Frequência de ondas de spin (em  $q = 0$ ) versus campo longitudinal aplicado para um nanofio com  $N = 19$ .

Em baixas temperaturas onde a aproximação de onda de spin é válida, a diminuição da magnetização com o aumento da temperatura devido à reversão dos spins, pode ser interpretada como resultado da criação de magnons térmicos. Então podemos relacionar

o vetor magnetização as componentes dos operadores de spin através da equação

$$\mathbf{M}(r_i) = \frac{N}{V} 2\mu_B S_i^\alpha \quad (2.39)$$

onde  $N$  e  $V$  são o número de spins e o volume do sistema, respectivamente,  $r_i$  é a posição do sítio e  $S_i^\alpha$  é a componente do operador de spin ( $S_i^x$ ,  $S_i^y$  ou  $S_i^z$ ) [44, 45]. A partir da equação (2.6) podemos aplicar o somatório e dividir por  $N$  em ambos os lados que leva a

$$\langle S^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_q \langle n_q \rangle \quad (2.40)$$

Visto que magnons são bósons, a população em equilíbrio térmico será dada por

$$\langle n_q \rangle = \frac{1}{e^{E_q/k_B T} - 1} \quad (2.41)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Pode-se notar que apenas quando a interação dipolar é desprezada, o  $\sum_q a_q^\dagger a_q$  é o número total de magnons no sistema. Para o caso do nanofio ferromagnético, a figura (2.8) mostra o comportamento linear da magnetização média com o aumento da temperatura, onde atinge valor zero quando a temperatura chega a aproximadamente 0,21 (para  $k_B = 1$ ).

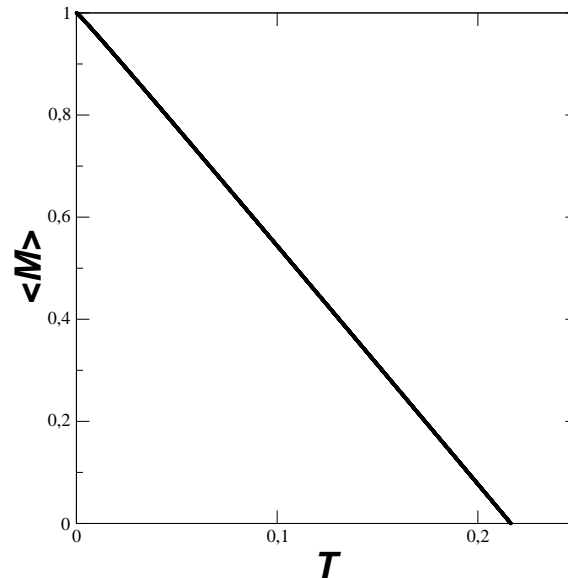


Figura 2.8: Variação da magnetização média de um nanofio ferromagnético com  $N = 7$  em relação a temperatura ( $k_B = 1$ ).

## 2.4.2 Com Interação Dipolar

Nesta sub-seção, além do termo de troca, incluímos a interação dipolar por esta ser um termo que depende das orientações relativas de dois spins e suas orientações relativas ao vetor que liga os dois sítios, além de ser longo alcance ( $1/r^3$ ). Isso nos permite observar os efeitos no regime onde ambas as interações, dipolar e troca, possam ser comparadas.

O gráfico da figura (2.9) corresponde a relação de dispersão para um nanofio ferromagnético com  $N = 7$ , campo externo  $h = 0,3$  aplicado na direção longitudinal e  $f_D = 0,3$ . Podemos observar que apesar da magnitude desta interação ser pequena comparada a magnitude da interação de troca, ela é capaz de contribuir de forma significativa no espectro de excitação, pois resulta na quebra da degenerescência dos modos (ver fig. 2.4). Para um nanofio com  $N = 19$ ,  $h = 2,0$  e  $f_D = 0,4$  vemos que alguns dos modos apresentam um mínimo em vetor de onda não nulo. Isso surge como uma consequência da ação recíproca das interações de troca e dipolar no sistema. Esta característica foi retratada dentro de um modelo contínuo por Arias and Mills [46] que calcularam a contribuição dipolar para a dispersão em pequenos valores de vetor de onda. Em pequenos valores de  $qa$ , onde o comprimento de onda ou o raio do nanofio é muito maior que o chamado comprimento de troca, a interação dipolar magnética e o confinamento do sistema são grandes comparados a influência da interação de troca. Isso leva ao decréscimo dos modos de frequência mais baixos com o crescimento de  $qa$ . Em valores maiores de  $qa$ , o termo de troca domina e as frequências de ondas de spin cresce (fig. 2.10).

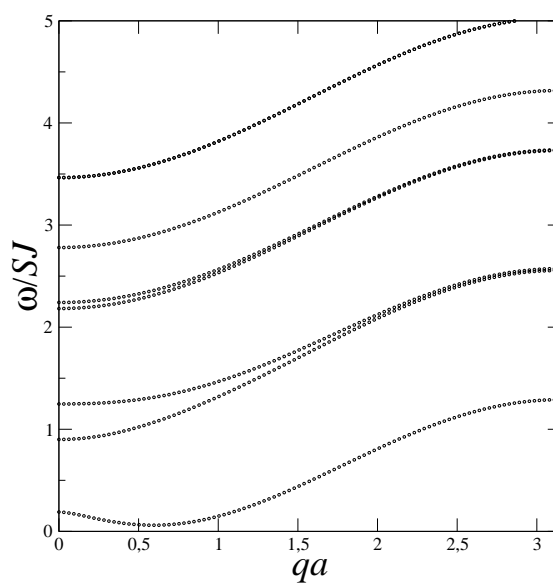


Figura 2.9: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 7$  em um campo aplicado longitudinal, tomando  $h = f_D = 0, 3$ .

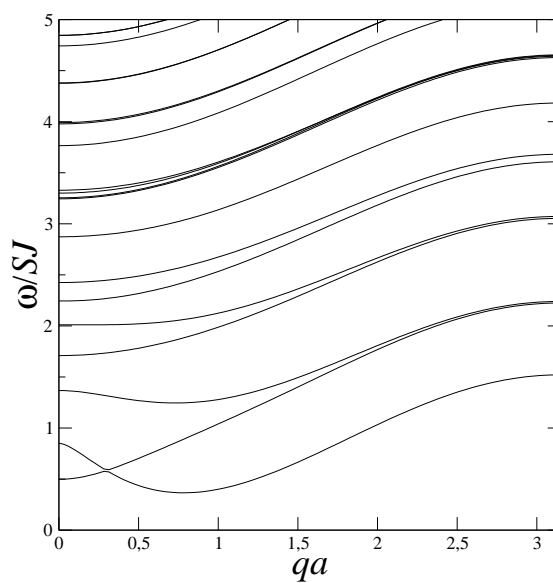


Figura 2.10: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 19$  na presença de campo externo  $h = 2, 0$  e  $f_D = 0, 4$ .

Os resultados seguintes mostram que não apenas um mínimo para as curvas mais baixas em vetor de onda não nulo ocorre como na figura (2.10), mas também há fortes evidências de efeitos de repulsão de modos (*anticrossing*) no regime para pequenos valores de  $qa$  [41]. A repulsão de modos poderia ser interpretado como uma manifestação dos efeitos de confinamento que resulta na mistura dos modos magnetostáticos com os modos de ondas de spin perpendiculares mais baixos. Na figura (2.11) e (2.12) calculamos a dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 37$ ,  $h = 3,0$  e  $f_D = 0,7$  e  $N = 91$ ,  $h = 3,5$  e  $f_D = 0,5$ , respectivamente.

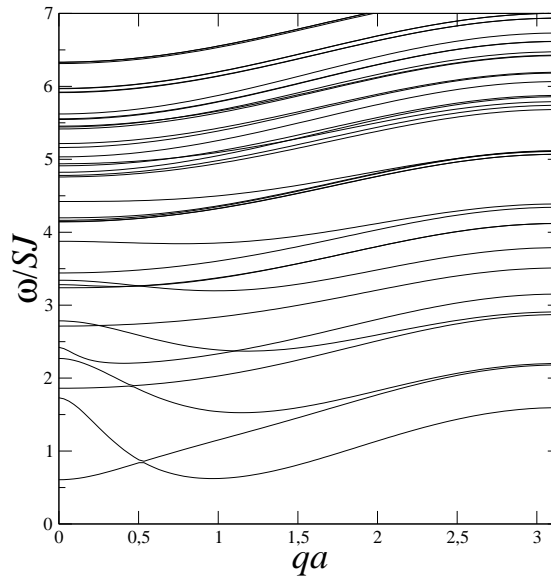


Figura 2.11: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 37$  em um campo aplicado longitudinal, tomando  $h = 3,0$  e  $f_D = 0,7$ .



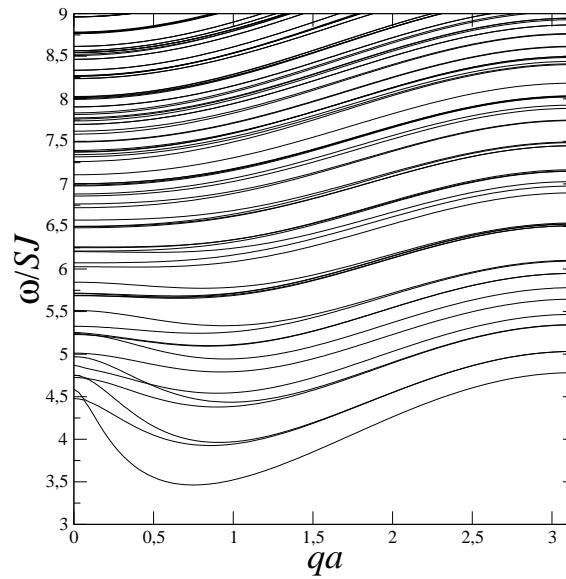


Figura 2.12: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 91$  na presença de campo externo  $h = 3, 5$  e  $f_D = 0, 5$ .

Observamos na figura (2.13) o comportamento das ondas de spin na região magnetostática com a aplicação de um forte campo magnético. Nesta região, a contribuição do termo de troca é desprezado ( $J = 0,001$ ) no espectro, havendo o domínio da interação dipolar. Os valores dos parâmetros dados são:  $N = 37$ ,  $h = 6,0$  e  $f_D = 0,5$ . Notamos que as frequências de todos os ramos decrescem com o crescimento do vetor de onda.

A variação da frequência de ondas de spin em relação ao campo externo longitudinal para um nanofio  $N = 7$ ,  $q = 0$  e  $f_D = 1,0$  é mostrado na figura (2.14). Vemos que o espectro deixa de ser linear com a inclusão da interação dipolar.

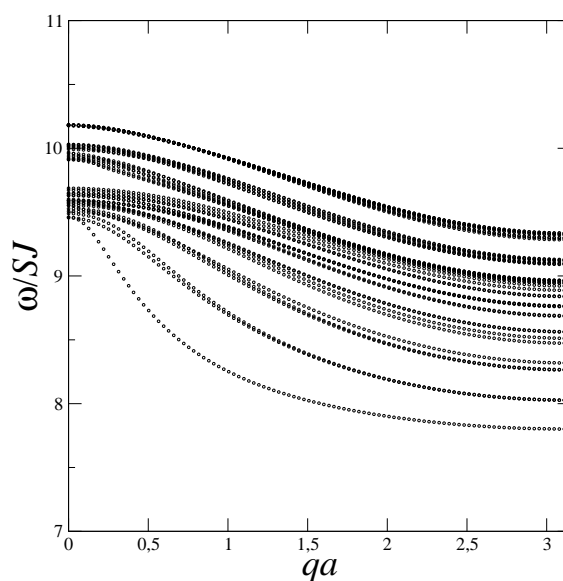


Figura 2.13: Relação de dispersão de ondas de spin no regime magnetostático para um nanofio com  $N = 37$ , campo aplicado  $h = 6,0$ ,  $f_D = 0,5$  e  $J = 0,001$ .

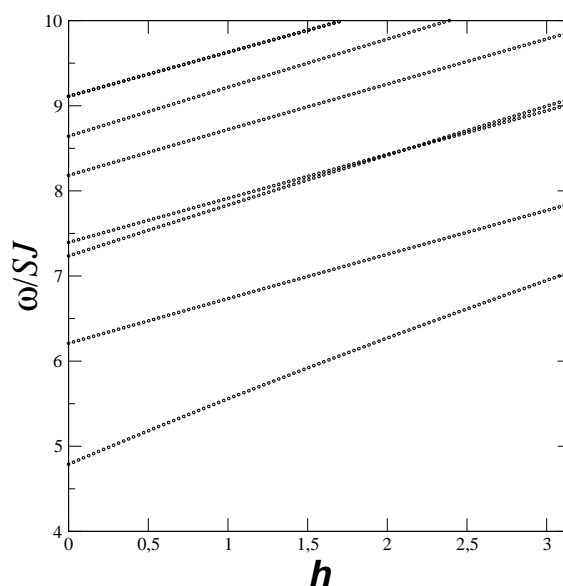


Figura 2.14: Variação da frequência de ondas de spin em função do campo aplicado para um nanofio com  $N = 7$ , vetor de onda  $q = 0$  e  $f_D = 1,0$ .

## 3 *O Nanofio Antiferromagnético*

### 3.1 Introdução

Utilizando a mesma abordagem dada no capítulo anterior, trataremos agora o caso do nanofio antiferromagnético, sendo este mais complexo. Como nos ferromagnetos, a interação de troca em antiferromagnetos dá origem as excitações de spin com características do tipo onda. Inicialmente, um antiferromagneto foi modelado como sendo constituído de duas subredes de spins antiparalelos de mesma magnitude [47]. Uma dificuldade do problema aqui é que o estado fundamental não é conhecido exatamente. Classicamente, quando o campo aplicado é menor que um valor crítico, o estado de mínima energia é chamado de estado fundamental de Néel (fig. 3.1). Isto é fácil de ver se usarmos  $J < 0$  no hamiltoniano de Heisenberg (eq. 1.17) e assumir que  $\mathbf{S}_i$  e  $\mathbf{S}_j$  são vetores clássicos. Já para a Mecânica Quântica, a situação não é tão simples, porque o estado fundamental de um sistema deve ser um autoestado do hamiltoniano além de ter o mínimo de energia. Se operarmos com o hamiltoniano de Heisenberg no estado de Néel, claramente não obteremos o mesmo estado, porque o termo  $S_i^- S_j^+$  muda  $\mathbf{S}_j$  para cima e  $\mathbf{S}_i$  para baixo. A dificuldade do estado fundamental em antiferromagnetos é contornado com a suposição que o estado de Néel é um autoestado do hamiltoniano [44]. Ondas de spin são então geradas pela mudança dos spins fora deste estado ordenado.

Construiremos o nanofio antiferromagnético cilíndrico com seção (camada) transversal hexagonal empilhando-se as camadas de spins verticalmente uma sobre a outra, para formar um nanofio longo com simetria translacional ao longo da direção de empilhamento (eixo  $z$ ), onde alternam-se a orientação dos spins, para cima (*up*) e para baixo (*down*), camada a camada (fig. 3.2) [48, 49, 45]. Especificamente, as seções transversais do nanofio encontram-se no plano  $xy$  constituídas por um número finito  $N$  de spins arranjados em uma rede triangular de espaçamento  $a$  que obedecem a mesma lei de formação apresentada no capítulo anterior:  $N = 3r(r + 1) + 1 = 7, 19, 37, \dots$  (fig. 2.2). Onde  $r$  é o raio do nanofio ( $r = 1, 2, 3, \dots$ ).

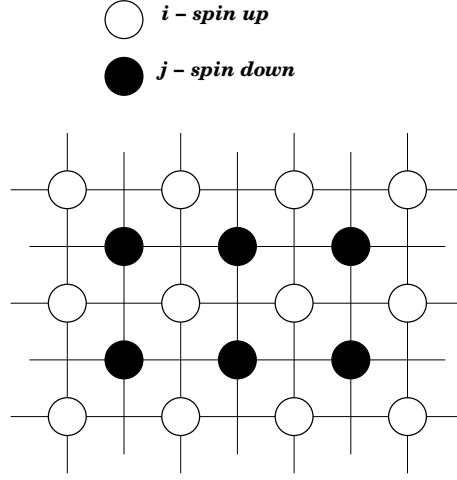


Figura 3.1: Estado fundamental de Néel clássico para uma rede planar.

## 3.2 O Hamiltoniano

Para escrever o hamiltoniano do nanofio antiferromagnético, também adotaremos  $n, m$  como os índices da camada e  $i, j$  indexam a posição dos spins em uma camada específica.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \left\{ \sum_{\langle in, jm \rangle} J_{in, jm} \mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{jm} + \sum_{\langle in, i'n \rangle} J_{in, i'n} \mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{i'n} + \sum_{\langle jm, j'm \rangle} J_{jm, j'm} \mathbf{S}_{jm} \cdot \mathbf{S}_{j'm} \right\} \\
 & - g \mu_B H_0 \left\{ \sum_{in} S_{in}^z - \sum_{jm} S_{jm}^z \right\} - K \left\{ \left[ \sum_{in} S_{in}^z \right]^2 + \left[ \sum_{jm} S_{jm}^z \right]^2 \right\} \\
 & + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 \sum_{in, jm} \sum_{\alpha\beta} \left\{ D_{in, jm}^{\alpha\beta} S_{in}^\alpha S_{jm}^\beta + D_{in, i'n}^{\alpha\beta} S_{in}^\alpha S_{i'n}^\beta + D_{jm, j'm}^{\alpha\beta} S_{jm}^\alpha S_{j'm}^\beta \right\} \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

Onde o primeiro, segundo e terceiro somatórios representam as interações de troca. O primeiro é corresponde a interação antiferromagnética ( $J_{in, jm} < 0$ ), isto é, a interação se dá entre os primeiros vizinhos das camadas adjacentes (ver fig 3.2). O segundo e terceiro somatórios denotam as interações ferromagnéticas ( $J_{in, i'n}, J_{jm, j'm} > 0$ ), ou seja, se dão entre primeiros vizinhos da mesma camada. O quarto e quinto somatórios correspondem as interações com o campo magnético uniforme externo aplicado na direção de magnetização dos spins, sendo que o campo é paralelo em relação aos spins *up* e antiparalelo aos spins *down*, daí a razão dos sinais positivo e negativo, respectivamente. O sexto e sétimo somatórios denotam o termo de anisotropia de natureza uniaxial, indicando a preferência do sistema pela configuração antiferromagnética, em que  $K$  é a constante de anisotropia. Os dois últimos somatórios configuram o termo de interação dipolar, onde podemos notar três parcelas que correspondem as contribuições dos pares de spins *up-down*, *up-up* e

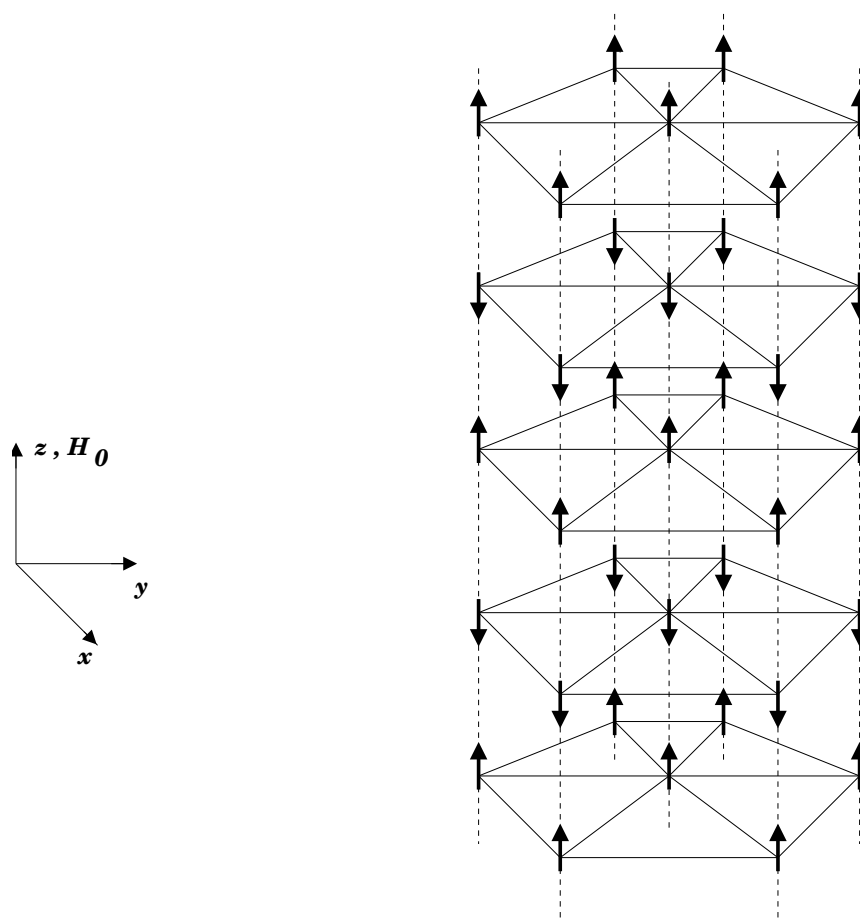


Figura 3.2: Representação de um nanofio antiferromagnético com  $N = 7$ , submetido à presença de um campo magnético uniforme externo longitudinal ( $H_0$ ), onde  $a$  é o parâmetro de rede.

*down-down* que temos no sistema, em que definimos:

$$D_{in,jm}^{\alpha\beta} = \frac{|\mathbf{r}_{in,jm}|^2 \delta_{\alpha\beta} - 3r_{in,jm}^\alpha r_{in,jm}^\beta}{|\mathbf{r}_{in,jm}|^5} \quad (3.2)$$

$$D_{in,i'n}^{\alpha\beta} = \frac{|\mathbf{r}_{in,i'n}|^2 \delta_{\alpha\beta} - 3r_{in,i'n}^\alpha r_{in,i'n}^\beta}{|\mathbf{r}_{in,i'n}|^5} \quad (3.3)$$

$$D_{jm,j'm}^{\alpha\beta} = \frac{|\mathbf{r}_{jm,j'm}|^2 \delta_{\alpha\beta} - 3r_{jm,j'm}^\alpha r_{jm,j'm}^\beta}{|\mathbf{r}_{jm,j'm}|^5} \quad (3.4)$$

### 3.3 A Representação Holstein-Primakoff

Como no caso ferromagnético, as componentes dos operadores de spin do hamiltoniano da equação (3.1) escritos em termos dos operadores escadas ( $S_i^\pm$ ) são definidos conforme abaixo:

$$\begin{aligned} S_i^\pm &= S_i^x \pm iS_i^y \\ S_j^\pm &= S_j^x \pm iS_j^y \end{aligned} \quad (3.5)$$

que obedecem as regras de comutação

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^z \delta_{ij} \\ [S_i^z, S_j^\pm] &= S_i^\pm \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Fazendo uso da representação Holstein-Primakoff podemos escrever os operadores  $S^\pm$  em função dos operadores bosônicos de criação e aniquilação. Devido a existência de dois tipos de spin na célula unitária magnética, associaremos aos spins *up*: um operador criação (dos desvios do spin) para  $S_i^-$ ; um operador aniquilação (dos desvios do spin) para  $S_i^+$  e um operador número (número de desvios do spin) para  $S_i^z$ .

$$S_{in}^+ = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}}{2S} \right)^{1/2} a_{in} \quad (3.7)$$

$$S_{in}^- = \sqrt{2S} a_{in}^\dagger \left( 1 - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}}{2S} \right)^{1/2} \quad (3.8)$$

$$S_{in}^z = S - a_{in}^\dagger a_{in} \quad (3.9)$$

E aos spins *down* associaremos: um operador criação (dos desvios do spin) para  $S_j^+$ ; um operador aniquilação (dos desvios do spin) para  $S_j^-$  e um operador número (número de desvios do spin) para  $S_j^z$ .

$$S_{jm}^+ = \sqrt{2S} b_{jm}^\dagger \left( 1 - \frac{b_{jm}^\dagger b_{jm}}{2S} \right)^{1/2} \quad (3.10)$$

$$S_{jm}^- = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{b_{jm}^\dagger b_{jm}}{2S} \right)^{1/2} b_{jm} \quad (3.11)$$

$$S_{jm}^z = -S + b_{jm}^\dagger b_{jm} \quad (3.12)$$

Os operadores  $a_i$  e  $b_j$  obedecem as relações de comutação [11, 12]

$$\begin{aligned} [a_i, a_i^\dagger] &= \delta_{i,i} \\ [b_j, b_j^\dagger] &= \delta_{j,j} \\ [a_i, a_i] &= 0 \\ [a_i^\dagger, a_i^\dagger] &= 0 \\ [b_j, b_j] &= 0 \\ [b_j^\dagger, b_j^\dagger] &= 0 \\ [a_i, b_j^\dagger] &= 0 \\ [b_j, a_i^\dagger] &= 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Considerando o regime de baixas temperaturas ( $T \ll T_N$ ), o valor esperado do número de desvios do spin do sítio  $i$  ( $a_i^\dagger a_i = S - S_i^z$ ) é pequeno, assim como para o sítio  $j$  ( $b_j^\dagger b_j = S + S_j^z$ ). Portanto,  $S_i^z \approx S$  ( $S_j^z \approx -S$ ), assim como  $a_i^\dagger a_i / 2S \ll 1$  ( $b_j^\dagger b_j / 2S \ll 1$ ). Sob estas considerações, os radicais das equações (3.7), (3.8), (3.10) e (3.11) podem ser expandidos similarmente no caso do nanofio ferromagnético com respeito a potência  $1/2S$ , conforme mostrado

$$S_{in}^+ \approx \sqrt{2S} \left( a_{in} - \frac{a_{in}^\dagger a_{in} a_{in}}{4S} + \dots \right) \quad (3.14)$$

$$S_{in}^- \approx \sqrt{2S} \left( a_{in}^\dagger - \frac{a_{in}^\dagger a_{in}^\dagger a_{in}}{4S} + \dots \right) \quad (3.15)$$

$$S_{jm}^+ \approx \sqrt{2S} \left( b_{jm}^\dagger - \frac{b_{jm}^\dagger b_{jm}^\dagger b_{jm}}{4S} + \dots \right) \quad (3.16)$$

$$S_{jm}^- \approx \sqrt{2S} \left( b_{jm} - \frac{b_{jm}^\dagger b_{jm} b_{jm}}{4S} + \dots \right) \quad (3.17)$$

e desprezar os termos de ordem acima de dois operadores, obtendo assim uma boa aproximação. Então

$$S_{in}^+ = \sqrt{2S} a_{in} \quad (3.18)$$

$$S_{in}^- = \sqrt{2S} a_{in}^\dagger \quad (3.19)$$

$$S_{jm}^+ = \sqrt{2S} b_{jm}^\dagger \quad (3.20)$$

$$S_{jm}^- = \sqrt{2S} b_{jm} \quad (3.21)$$

Com base no que foi exposto, o hamiltoniano da equação (3.1) escrito em termos de operadores bosônicos de criação e aniquilação torna-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -g\mu_B H_0 \left\{ \sum_{in} S - \sum_{in} a_{in}^\dagger a_{in} - \sum_{jm} S + \sum_{jm} b_{jm}^\dagger b_{jm} \right\} \\ & - K \left\{ \sum_{in} S^2 - 2S \sum_{in} a_{in}^\dagger a_{in} + \sum_{jm} S^2 - 2S \sum_{jm} b_{jm}^\dagger b_{jm} \right\} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{in,i'n} J_{in,i'n} S^2 - \sum_{\langle in,i'n \rangle} J_{in,i'n} \left[ a_{in}^\dagger a_{i'n} - a_{in}^\dagger a_{in} \right] \\ & - \frac{1}{2} \sum_{jm,j'm} J_{jm,j'm} S^2 - \sum_{\langle jm,j'm \rangle} J_{jm,j'm} \left[ b_{jm}^\dagger b_{j'm} - b_{jm}^\dagger b_{jm} \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{in,jm} J_{in,jm} S^2 - \frac{1}{2} S \sum_{\langle in,jm \rangle} J_{in,jm} \left[ a_{in} b_{jm} + a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger a_{in} + b_{jm}^\dagger b_{jm} \right] \\ & + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sum_{in,i'n} \left\{ \frac{1}{2} D_{in,i'n}^{xx} (a_{in} a_{i'n} + a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger + 2a_{in}^\dagger a_{i'n}) \right. \\ & - \frac{1}{2} D_{in,i'n}^{yy} (a_{in} a_{i'n} + a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger - 2a_{in}^\dagger a_{i'n}) + D_{in,i'n}^{zz} (S - 2a_{in}^\dagger a_{in}) \\ & \left. - iD_{in,i'n}^{xy} (a_{in} a_{i'n} - a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger) + \sqrt{2S} D_{in,i'n}^{xz} (a_{in} + a_{in}^\dagger) \right\} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& - i\sqrt{2S}D_{in,i'n}^{yz}(a_{in} - a_{in}^\dagger) \Big\} + \frac{1}{2}g^2\mu_B^2S \sum_{jm,j'm} \left\{ \frac{1}{2}D_{jm,j'm}^{xx} \right. \\
& \times (b_{jm}b_{j'm} + b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger + 2b_{jm}^\dagger b_{j'm}) - \frac{1}{2}D_{jm,j'm}^{yy}(b_{jm}b_{j'm} \\
& + b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger - 2b_{jm}^\dagger a_{j'm}) + D_{jm,j'm}^{zz}(S - 2b_{jm}^\dagger b_{jm}) - iD_{jm,j'm}^{xy} \\
& \times (b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger - b_{jm}b_{j'm}) - \sqrt{2S}D_{jm,j'm}^{xz}(b_{jm}^\dagger + b_{jm}) \\
& - i\sqrt{2S}D_{jm,j'm}^{yz}(b_{jm} - b_{jm}^\dagger) \Big\} + \frac{1}{2}g^2\mu_B^2S \sum_{in,jm} \left\{ \frac{1}{2}D_{in,jm}^{xx} \right. \\
& \times (a_{in}b_{jm}^\dagger + a_{in}b_{jm} + a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger b_{jm}) - D_{in,jm}^{yy}(a_{in}b_{jm}^\dagger \\
& - a_{in}b_{jm} - a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger b_{jm}) - D_{in,jm}^{zz}(S - a_{in}^\dagger a_{in} - b_{jm}^\dagger b_{jm}) \\
& - iD_{in,jm}^{xy}(a_{in}b_{jm}^\dagger - a_{in}^\dagger b_{jm}) - \frac{1}{2}\sqrt{2S}D_{in,jm}^{xz}(a_{in} + a_{in}^\dagger \\
& - b_{jm}^\dagger - b_{jm}) - \frac{1}{2}i\sqrt{2S}D_{in,jm}^{yz}(a_{in}^\dagger - a_{in} + b_{jm}^\dagger - b_{jm}) \Big\} \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Da mesma forma do caso ferromagnético, temos o termo que não depende dos operadores,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(0)} & = -\frac{1}{2} \left\{ \sum_{\langle in,i'n \rangle} J_{in,i'n} S^2 + \sum_{\langle jm,j'm \rangle} J_{jm,j'm} S^2 - \sum_{\langle in,jm \rangle} J_{in,jm} S^2 \right\} \\
& - g\mu_B H_0 \left\{ \sum_{in} S - \sum_{jm} S \right\} - K \left[ \sum_{in} S^2 + \sum_{jm} S^2 \right] \\
& + \frac{1}{2}g^2\mu_B^2S^2 \left\{ \sum_{in,i'n} D_{in,i'n}^{zz} + \sum_{jm,j'm} D_{jm,j'm}^{zz} - \sum_{in,jm} D_{in,jm}^{zz} \right\} \quad (3.23)
\end{aligned}$$

o termo que depende de um só operador,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(1)} & = \frac{1}{2}g^2\mu_B^2S\sqrt{2S} \left\{ \left[ D_{in,i'n}^{xz}(a_{in} + a_{in}^\dagger) - iD_{in,i'n}^{yz}(a_{in} - a_{in}^\dagger) \right] \right. \\
& - \left[ D_{jm,j'm}^{xz}(b_{jm}^\dagger + b_{jm}) - iD_{jm,j'm}^{yz}(b_{jm}^\dagger - b_{jm}) \right] \\
& - \left. \frac{1}{2} \left[ D_{in,jm}^{xz}(a_{in}^\dagger + a_{in} - b_{jm}^\dagger - b_{jm}) - iD_{in,jm}^{yz}(a_{in} - a_{in}^\dagger) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\left. \left. + (b_{jm} - b_{jm}^\dagger) \right] \right\} \quad (3.24)$$

e os termos de ordem mais alta. Todos estes termos recebem as mesmas considerações feitas no capítulo anterior. Assim, a forma quadrática do hamiltoniano para o nanofio antiferromagnético é:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} = & g\mu_B H_0 \left\{ \sum_i a_{in}^\dagger a_{in} - \sum_j b_{jm}^\dagger b_{jm} \right\} + 2KS \left\{ \sum_i a_{in}^\dagger a_{in} + \sum_j b_{jm}^\dagger b_{jm} \right\} \\ & - 2 \sum_{\langle in, i'n \rangle} J_{in, i'n} \left[ a_{in}^\dagger a_{i'n} - a_{in}^\dagger a_{in} \right] - 2 \sum_{\langle jm, j'm \rangle} J_{jm, j'm} \left[ b_{jm}^\dagger b_{j'm} - b_{jm}^\dagger b_{jm} \right] \\ & - \frac{1}{2} S \sum_{\langle in, jm \rangle} J_{in, jm} \left[ a_{in} b_{jm} + a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger a_{in} + b_{jm}^\dagger b_{jm} \right] \\ & + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sum_{in, i'n} \left\{ \frac{1}{2} D_{in, i'n}^{xx} (a_{in} a_{i'n} + a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger + 2a_{in}^\dagger a_{i'n}) \right. \\ & - \frac{1}{2} D_{in, i'n}^{yy} (a_{in} a_{i'n} + a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger - 2a_{in}^\dagger a_{i'n}) - 2D_{in, i'n}^{zz} a_{in}^\dagger a_{in} \\ & - \left. iD_{in, i'n}^{xy} (a_{in} a_{i'n} - a_{in}^\dagger a_{i'n}^\dagger) \right\} + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sum_{jm, j'm} \left\{ \frac{1}{2} D_{jm, j'm}^{xx} \right. \\ & \times (b_{jm} b_{j'm} + b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger + 2b_{jm}^\dagger b_{j'm}) - \frac{1}{2} D_{jm, j'm}^{yy} (b_{jm} b_{j'm} \\ & + b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger - 2b_{jm}^\dagger a_{j'm}) - 2D_{jm, j'm}^{zz} b_{jm}^\dagger b_{jm} - iD_{jm, j'm}^{xy} \\ & \times (b_{jm}^\dagger b_{j'm}^\dagger - b_{jm} b_{j'm}) \left. \right\} + \frac{1}{2} g^2 \mu_B^2 S \sum_{in, jm} \left\{ \frac{1}{2} D_{in, jm}^{xx} \right. \\ & \times (a_{in} b_{jm}^\dagger + a_{in} b_{jm} + a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger b_{jm}) - D_{in, jm}^{yy} (a_{in} b_{jm}^\dagger \\ & - a_{in} b_{jm} - a_{in}^\dagger b_{jm}^\dagger + a_{in}^\dagger b_{jm}) + D_{in, jm}^{zz} (a_{in}^\dagger a_{in} + b_{jm}^\dagger b_{jm}) \\ & - \left. iD_{in, jm}^{xy} (a_{in} b_{jm}^\dagger - a_{in}^\dagger b_{jm}) \right\} \quad (3.25) \end{aligned}$$

Aproveitando-se da periodicidade do sistema na direção de magnetização, realizamos a transformada de Fourier nesta direção para os operadores  $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ ,

$$a_{in} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q}, n} e^{-2i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{q}, n} \quad (3.26)$$

$$a_{in}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q},n} e^{2i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{q},n}^\dagger \quad (3.27)$$

$$b_{jm} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q},m} e^{2i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} b_{\mathbf{q},m} \quad (3.28)$$

$$b_{jm}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q},m} e^{-2i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} b_{\mathbf{q},m}^\dagger \quad (3.29)$$

onde  $\mathbf{q} = (q_z)$ ,  $\mathbf{r}_i = (z_i)$ ,  $\mathbf{r}_j = (z_j)$ ,  $N_0$  é o número de sítios em cada linha atômica  $n$ . As transformadas de Fourier 1D para os termos de troca são:

$$u_n(q) = \sum_{\mathbf{d}_1} J_{in,i'n} e^{2iq\cdot\mathbf{d}_1} = \sum_{\mathbf{d}_1} J_{jm,j'm} e^{2iq\cdot\mathbf{d}_1} \quad (3.30)$$

$$v_n(q) = \sum_{\mathbf{d}_2} J_{in,jm} e^{2iq\cdot\mathbf{d}_2} \quad (3.31)$$

onde  $\mathbf{d}_1$  representa as distância entre um sítio e seus primeiros vizinhos na mesma camada e  $\mathbf{d}_2$  nas camadas adjacentes. Para os termos dependentes da posição as transformadas são:

$$D_{n,m}^{\alpha\beta}(q) = \sum_z e^{2iq_z z} D_{in,jm}^{\alpha\beta} \quad (3.32)$$

$$D_{n,n}^{\alpha\beta}(q) = \sum_z e^{2iq_z z} D_{in,i'n}^{\alpha\beta} \quad (3.33)$$

$$D_{m,m}^{\alpha\beta}(q) = \sum_z e^{2iq_z z} D_{jm,j'm}^{\alpha\beta} \quad (3.34)$$

Obtemos assim, a forma quadrática de bósons do hamiltoniano no espaço dos vetores de onda, como mostramos a seguir:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} &= \sum_{qn} \left\{ S \left[ 2K + u_n(0) + v_n(0) \right] + g\mu_B H_0 - g^2 \mu_B^2 \sum_l D_{n,l}^{zz}(0) \right\} a_{qn}^\dagger a_{qn} \\ &+ \sum_{qn} \left\{ S \left[ 2K + u_n(0) + v_n(0) \right] - g\mu_B H_0 - g^2 \mu_B^2 \sum_l D_{n,l}^{zz}(0) \right\} b_{qn}^\dagger b_{qn} \\ &+ \frac{1}{2} S \sum_{q,n} \left\{ v_n(q) - g^2 \mu_B^2 \sum_l D_{n,l}^{zz}(0) \right\} (a_{qn} b_{-qn} + a_{qn}^\dagger b_{-qn}^\dagger) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - S \sum_{q,n,m} \left\{ u_n(q) a_{qn}^\dagger a_{qm} + u_n(q) b_{qn}^\dagger b_{qm} \right\} + \frac{1}{4} g^2 \mu_B^2 S \\
& \times \sum_{q,n,m} \left\{ \left[ 2D_{n,m}^{zz}(-q) \right] (a_{qn} b_{-qm} + a_{qn}^\dagger b_{-qm}^\dagger) - \left[ 2D_{n,m}^{zz}(q) \right] \right. \\
& \times (a_{qn}^\dagger a_{qm} + b_{qn}^\dagger b_{qm}) + \left[ D_{n,m}^{xx}(-q) - D_{n,m}^{yy}(-q) - 2iD_{n,m}^{xy}(-q) \right] (a_{qn} a_{-qm} \\
& + b_{qn}^\dagger b_{-qm}^\dagger) + \left[ D_{n,m}^{xx}(-q) - D_{n,m}^{yy}(-q) + 2iD_{n,m}^{xy}(-q) \right] (a_{qn}^\dagger a_{-qm}^\dagger + b_{qn} b_{-qm}) \\
& + \left[ D_{n,m}^{xx}(q) - D_{n,m}^{yy}(q) - 2iD_{n,m}^{xy}(q) \right] (a_{qn} b_{qm}^\dagger) + \left[ D_{n,m}^{xx}(q) - D_{n,m}^{yy}(q) \right. \\
& \left. + 2iD_{n,m}^{xy}(q) \right] (a_{qn}^\dagger b_{qm}) \left. \right\} \tag{3.35}
\end{aligned}$$

As funções de acoplamento entre primeiros vizinhos são:

$$u_n(q) = \sigma J \tag{3.36}$$

$$v_n(q) = J(1 + e^{-2iq}) \tag{3.37}$$

onde  $\sigma$  representa o número de primeiros vizinhos (3,4 ou 6. Ver fig. 2.2).

O hamiltoniano da equação (3.35) não está na forma desejada, pois existem termos cruzados. Devemos diagonalizá-lo para obtermos o espectro linear na aproximação de ondas de spin. Há pelo menos duas saídas: funções de Green ou transformação Bogolyubov-Tyablikov. Ambos os métodos léva-nos aos mesmos resultados, pois são equivalentes [50]. Optemos pela segunda alternativa. Esta transformação consiste basicamente em escrever os operadores criação e destruição como uma combinação linear de novos operadores bosônicos ( $\alpha^\dagger, \alpha, \beta^\dagger, \beta$ ). Isto significa que as excitações das ondas de spin envolverão a mistura dos desvios do spin de ambas as sub-redes (*up* e *down*). Estes novos operadores também devem satisfazer as relações de comutação. Podemos escrever a equação (3.35) como

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_q \mathcal{H}_q^{(2)} \tag{3.38}$$

onde  $\mathcal{H}_q^{(2)}$  é um produto de matrizes do tipo

$$\mathcal{H}_q^{(2)} = \mathbf{X}^\dagger \bar{\mathcal{H}}^{(2)} \mathbf{X} \tag{3.39}$$

onde  $\mathbf{X}$  é uma matrix coluna com elementos tomados dos operadores que aparecem em

$\mathcal{H}^{(2)}$ , e  $\bar{\mathcal{H}}^{(2)}$  é uma matrix quadrada formada com os coeficientes de  $\mathcal{H}^{(2)}$ .

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} a_{q,1} \\ \vdots \\ a_{q,N} \\ b_{q,1} \\ \vdots \\ b_{q,N} \\ a_{-q,1}^\dagger \\ \vdots \\ a_{-q,N}^\dagger \\ b_{-q,1}^\dagger \\ \vdots \\ b_{-q,N}^\dagger \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

As relações de comutação dos operadores que aparecem em  $\mathbf{X}$  podem ser escritas todas na forma da matrix

$$[\mathbf{X}, \mathbf{X}^\dagger] = \mathbf{X}(\mathbf{X}^*)^T - (\mathbf{X}^* \mathbf{X}^T)^T \equiv \mathbf{g} \quad (3.41)$$

onde  $\mathbf{X}(\mathbf{X}^*)^T = \mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger$  é um produto direto das matrizes,  $\mathbf{X}^T$  é a transposta de  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{g}$  é uma matrix diagonal com elementos  $g_{ij}$ . Em nosso caso,

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} a_{q,1} \\ \vdots \\ a_{q,N} \\ b_{q,1} \\ \vdots \\ b_{q,N} \\ a_{-q,1}^\dagger \\ \vdots \\ a_{-q,N}^\dagger \\ b_{-q,1}^\dagger \\ \vdots \\ b_{-q,N}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{q,1}^\dagger & \cdots & a_{q,N}^\dagger & b_{q,1}^\dagger & \cdots & b_{q,N}^\dagger & a_{-q,1} & \cdots & a_{-q,N} & b_{-q,1} & \cdots & b_{-q,N} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
& - \left[ \begin{array}{c} a_{q,1}^\dagger \\ \vdots \\ a_{q,N}^\dagger \\ b_{q,1}^\dagger \\ \vdots \\ b_{q,N}^\dagger \\ a_{-q,1} \\ \vdots \\ a_{-q,N} \\ b_{-q,1} \\ \vdots \\ b_{-q,N} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cccccccccccc} a_{q,1} & \cdots & a_{q,N} & b_{q,1} & \cdots & b_{q,N} & a_{-q,1}^\dagger & \cdots & a_{-q,N}^\dagger & b_{-q,1}^\dagger & \cdots & b_{-q,N}^\dagger \end{array} \right] \\
& = \left[ \begin{array}{cccccc} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{cc} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{array} \right] = \mathbf{g} \quad (3.42)
\end{aligned}$$

em que  $\mathbf{I}$  é uma matriz identidade de ordem  $2N$ .

Os novos operadores que diagonalizam  $\mathcal{H}_q^{(2)}$  também podem ser escritos na forma de uma matrix  $\mathbf{Y}$  com as relações de comutação definida como

$$[\mathbf{Y}, \mathbf{Y}^\dagger] \equiv \mathbf{g} \quad (3.43)$$

tal que  $\mathcal{H}_q^{(2)}$  torna-se

$$\mathcal{H}_q^{(2)} = \mathbf{Y}^\dagger \Omega_{\bar{\mathcal{H}}(2)} \mathbf{Y} \quad (3.44)$$

onde  $\Omega_{\bar{\mathcal{H}}(2)}$  é diagonal. Fazendo uma transformação canônica dos operadores

$$\mathbf{X} = S\mathbf{Y}$$

$$\mathbf{X}^\dagger = \mathbf{Y}^\dagger S^\dagger \quad (3.45)$$

temos

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_q \mathbf{X}^\dagger \bar{\mathcal{H}}^{(2)} \mathbf{X}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_q \mathbf{Y}^\dagger S^\dagger \bar{\mathcal{H}}^{(2)} S \mathbf{Y} \\
&= \sum_q \mathbf{Y}^\dagger \Omega_{\bar{\mathcal{H}}^{(2)}} \mathbf{Y}^\dagger
\end{aligned} \tag{3.46}$$

portanto

$$\Omega_{\bar{\mathcal{H}}^{(2)}} = S^\dagger \bar{\mathcal{H}}^{(2)} S \tag{3.47}$$

Podemos resolver mais facilmente obtendo uma relação entre  $S^\dagger$  e  $S^{-1}$  a partir da relação de comutação dos operadores.

$$\begin{aligned}
[\mathbf{X}, \mathbf{X}^\dagger] &= [S\mathbf{Y}, \mathbf{Y}^\dagger S^\dagger] \\
&= S\{\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\dagger - (\mathbf{Y}^* \mathbf{Y}^T)^T\} S^\dagger \\
&= SgS^\dagger = g
\end{aligned}$$

portanto

$$SgS^\dagger = g \quad \text{e} \quad S^{-1} = gS^\dagger g^{-1} \tag{3.48}$$

Usando a equação (3.48) em (3.47) obtemos a

$$\mathcal{H}^{(2)} S = g^{-1} Sg \Omega_{\bar{\mathcal{H}}^{(2)}} \tag{3.49}$$

que é um conjunto de equações de autovalores que podem ser resolvidas numericamente para achar  $S$  e  $\Omega_{\bar{\mathcal{H}}^{(2)}}$ . Para maiores detalhes ver [51, 44].

O hamiltoniano escrito em função destes novos operadores assume a forma

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_{q,n} \left\{ \omega_{\alpha,q,n} \left[ \alpha_{qn}^\dagger \alpha_{qn} - \frac{1}{2} \right] + \omega_{\beta,q,n} \left[ \beta_{qn}^\dagger \beta_{qn} - \frac{1}{2} \right] \right\} \tag{3.50}$$

## 3.4 Resultados Numéricos

Nesta seção apresentamos resultados numéricos para nanofios antiferromagnéticos de diferentes raios onde, primeiramente, consideramos os termos de troca, Zeeman e anisotropia. A magnitude das ondas de spin são plotadas contra  $qa$  de 0 (centro da zona de Brillouin) a  $\pi$  (zona de fronteira). Em seguida, incluímos o interação dipolar, a fim de verificar sua influência nos espectros de excitação.

### 3.4.1 Sem Interação Dipolar

O gráfico da figura (3.3) mostra como a frequência de ondas de spin varia em função do vetor de onda, para um nanofio antiferromagnético com parâmetros arbitrários dados por  $N = 7$ ,  $K = 0,75$  (constante anisotrópica) e  $h = 0$ . Observamos a presença de 5 modos discretos, o que significa que 7 estão degenerados, pois sabemos que no caso antiferromagnético, podemos enxergar o sistema como sendo constituído de duas sub-redes, então o número de modos é igual ao dobro do número de linhas atômicas. As frequências de ondas de spin em  $q = 0$  correspondem a:  $\omega/SJ = 2,8; 5,1; 7,2; 8,2; 10,3$ , em ordem crescente.

Ao se aplicar campo magnético longitudinal ( $h = 0,25$ ), verificamos que há quebra de degenerescência de alguns modos (degenerescência de sub-rede). Isso se deve ao fato de termos na rede spins paralelos e antiparalelos ao campo, causando aumento e diminuição das frequências, respectivamente. Veremos na próxima sub-seção que o termo dipolar tem papel fundamental na separação dos modos degenerados.

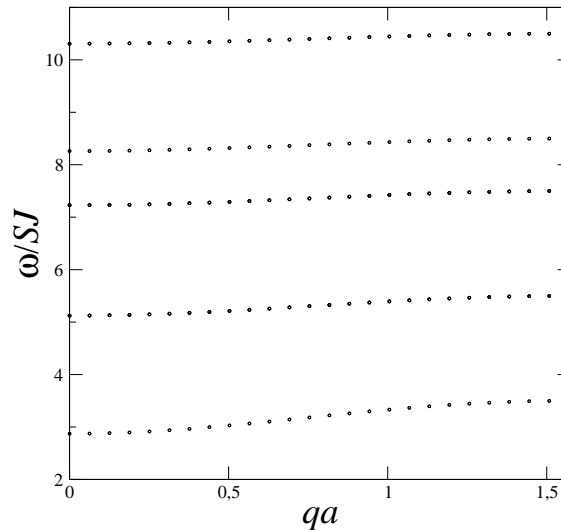


Figura 3.3: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 7$ ,  $K = 0,75$  na ausência de campo magnético aplicado.



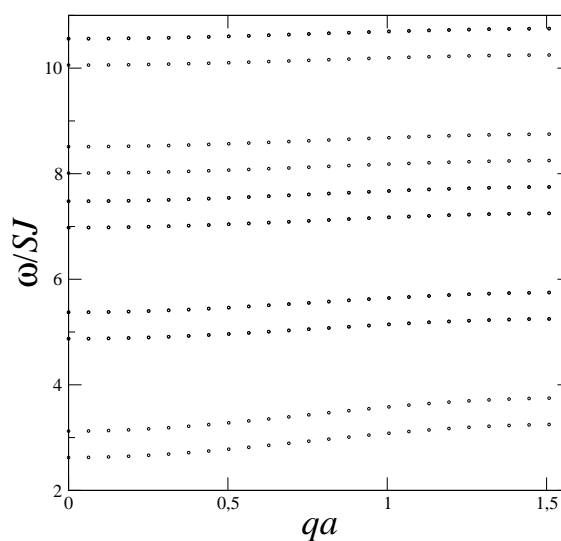


Figura 3.4: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 7$ ,  $h = 0,25$  e  $K = 0,75$ .

Os resultados seguintes mostram a relação de dispersão de ondas de spin para nanofios antiferromagnéticos de raios maiores. Para estes cálculos atribuímos valores aos parâmetros dados por:  $N = 37; h = 0,25; K = 0,75$  (fig. 3.5) e  $N = 91; h = 0,25; K = 0,75$  (fig. 3.6).

Como dito anteriormente, a existência de dois tipos de spins na rede (*up* e *down*), causa um desdobramento dos modos com aplicação de campo magnético. Podemos verificar no gráfico que expressa a frequência em função do campo aplicado na direção do eixo do nanofio, que há modos cuja as frequências de excitação aumentam linearmente e diminuem linearmente. Um dado importante é quando o campo assume valor aproximado a 2,87 (*campo crítico*), onde obtemos frequência nula. Isso significa uma instabilidade na configuração antiferromagnética. Os spins se rearranjam na rede numa configuração de menor energia, uma orientação de equilíbrio, passando a formar ângulos em relação ao eixo de simetria, o que corresponde a uma transição de fase para um estado denominado *spin-flop*.

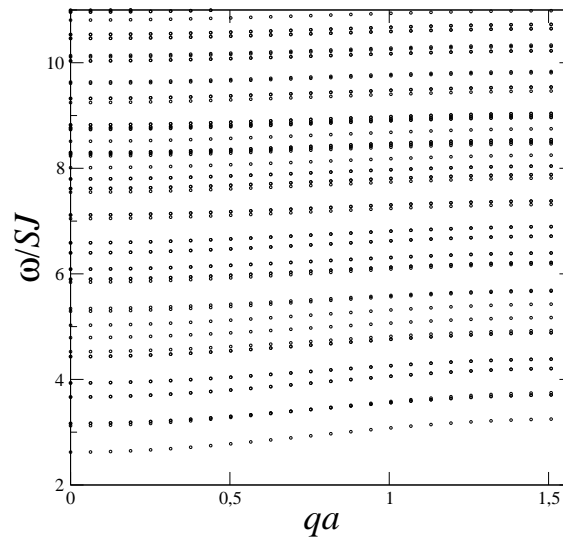


Figura 3.5: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 37$ ,  $h = 0,25$  e  $K = 0,75$ .

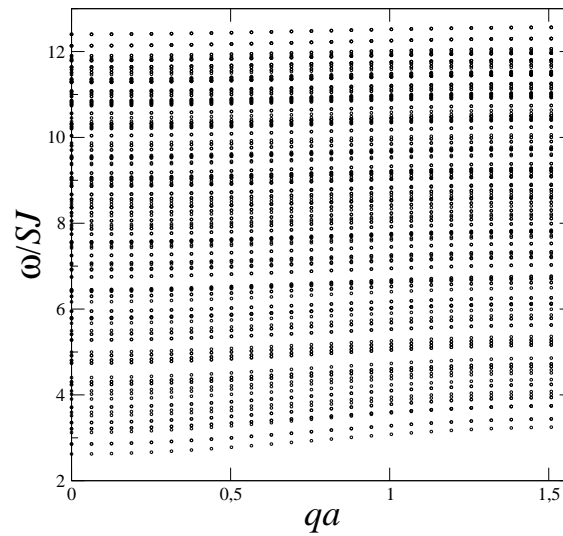


Figura 3.6: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 91$ ,  $h = 0,25$  e  $K = 0,75$ .

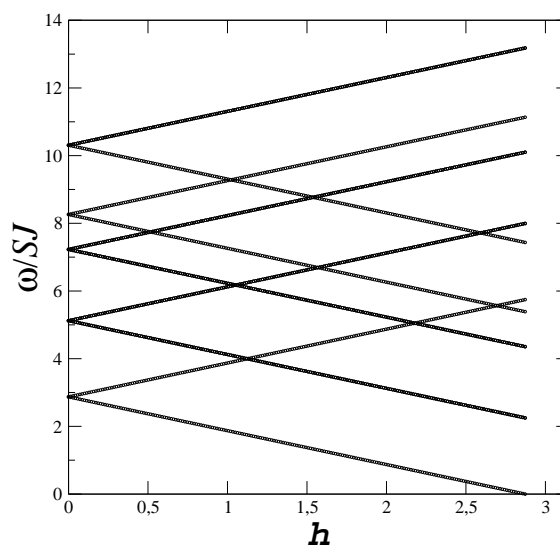


Figura 3.7: Frequência de ondas de spin (em  $q = 0$ ) versus campo longitudinal aplicado para um nanofio com  $N = 7$  e  $K = 0,75$ .

### 3.4.2 Com Interação Dipolar

Os próximos resultados são calculados levando também em conta o termo dipolo-dipolo. Os gráficos das figuras (3.8) e (3.9) mostram o comportamento da frequência de ondas de spin em função do vetor de onda para nanofios com  $N = 7$ ,  $K = 0,75$ ,  $h = 0$ ,  $f_D = 0,1$  e  $N = 7$ ,  $K = 2,0$ ,  $h = 1,0$ ,  $f_D = 0,25$ , respectivamente. Podemos verificar que a atuação do termo Zeeman juntamente com a interação dipolar quebram a degenerescência dos modos. Vale ressaltar que o termo dipolar não favorece a configuração antiferromagnética, pois ele frustra a orientação dos spins. O resultado é o aparecimento de modos com vetor de onda nulo, o que não é desejado. Para manter esta configuração é necessário que a constante anisotrópica tenha valores altos comparados ao fator dipolar ( $f_D$ ). Fisicamente isso significa que os spins precisam se rearranjar na rede, como no caso do campo crítico dito anteriormente, de forma a obter uma orientação de equilíbrio que minimize a energia. Outros resultados são mostrados para nanofios com raios maiores (fig. 3.10 e 3.11). No gráfico da figura (3.11) podemos observar já quase um contínuo no espectro. Obtemos também a variação da frequência com o campo aplicado (fig. 3.12) para um nanofio com  $N = 7$ ,  $q = 0$ ,  $K = 2,0$  e  $f_D = 0,25$ , onde podemos ver que o valor de campo crítico neste caso é aproximadamente 2,59.

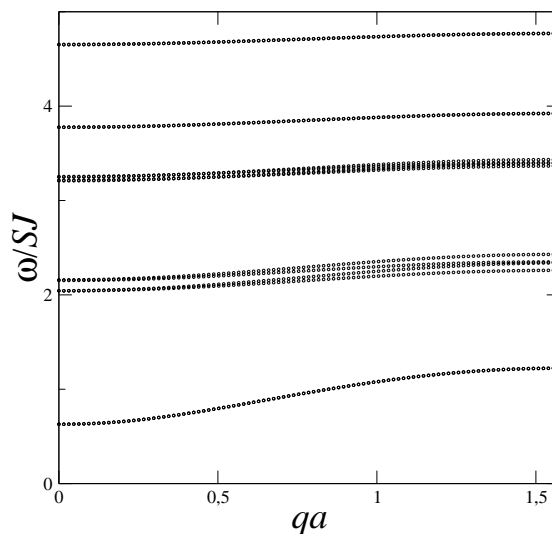


Figura 3.8: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 7$ ,  $K = 0,75$ ,  $h = 0$ ,  $f_D = 0,1$ .

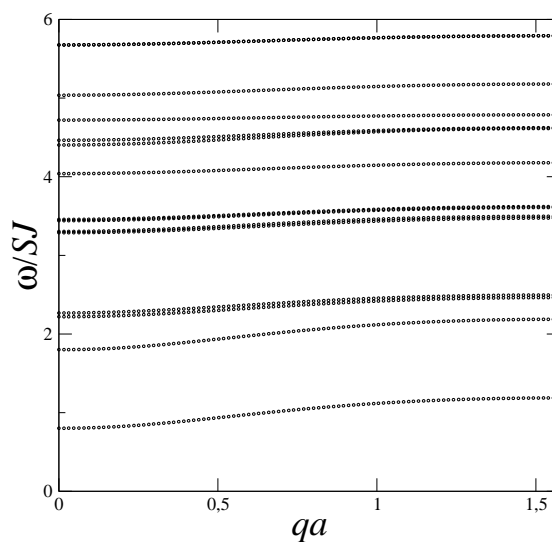


Figura 3.9: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 7$ ,  $h = 1,0$ ,  $K = 2,0$ ,  $f_D = 0,25$ .

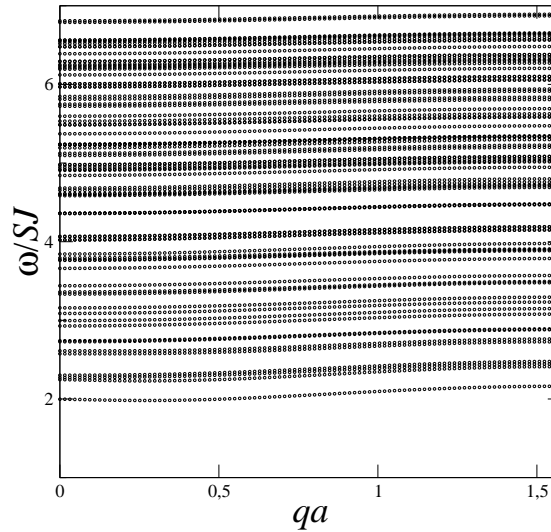


Figura 3.10: Frequência de ondas de spin versus vetor de onda  $qa$  para um nanofio com  $N = 37$ ,  $h = 0,25$ ,  $K = 2,0$ ,  $f_D = 0,1$ .

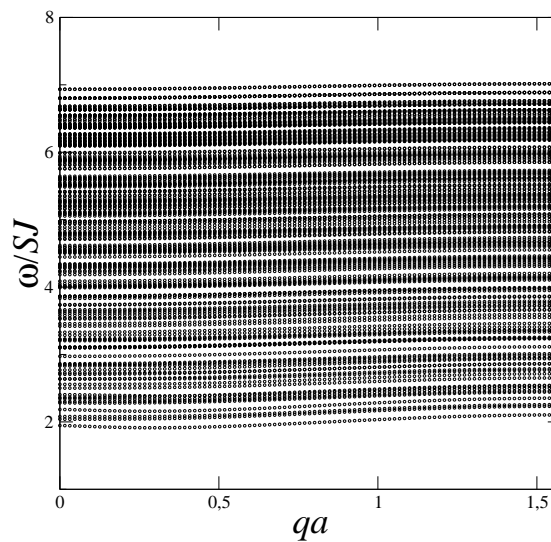


Figura 3.11: Relação de dispersão de ondas de spin para um nanofio com  $N = 91$ ,  $h = 0,25$ ,  $K = 2,0$ ,  $f_D = 0,1$ .

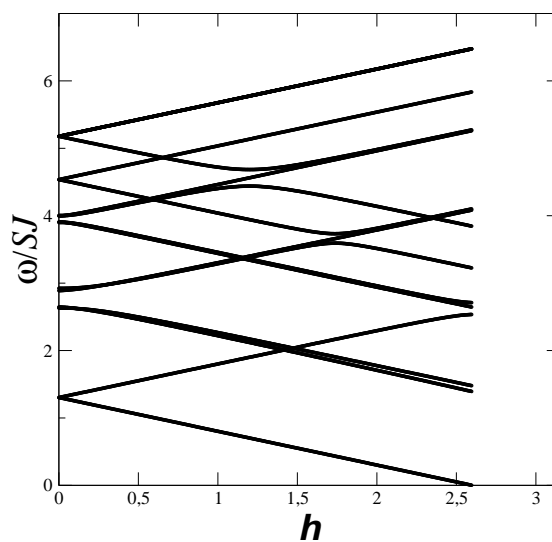


Figura 3.12: Variação da frequência de ondas de spin em função do campo aplicado para um nanofio com  $N = 7$ , vetor de onda  $q = 0$ ,  $K = 2, 0$  e  $f_D = 0, 25$ .

## *Conclusões Gerais e Perspectivas*

Neste trabalho desenvolvemos para nanofios magnéticos uma teoria microscópica cujo o formalismo Hamiltoniano inclui termos de troca, dipolo-dipolo, Zeeman e anisotropia, a fim de observar os efeitos quânticos que regem o sistema de partículas ou quasi-partículas.

Os resultados mostram que no caso ferromagnético a relação de dispersão apresenta modos degenerados quando a interação dipolar era desprezada. Acreditamos que esta degenerescência se deve a alta simetria do sistema. Observamos também uma tendência à formação de bandas em regiões localizadas do espectro para nanofios com raios maiores que 4, sendo que é necessário um estudo mais apropriado relativo a densidade de estados para se fazer tal afirmação, e que a frequência de excitação apresenta um comportamento linear em relação ao campo magnético externo aplicado ao se excluir o termo dipolar. Quando levamos em conta este termo mostramos que os modos de ondas de spin mais baixos apresentam um mínimo em vetor de onda não nulo devido a ação recíproca entre os termos de troca e dipolar, além dos resultados apontarem efeitos de repulsão no regime de pequenos valores de  $qa$  causados pela mistura dos modos magnetostáticos com modos de ondas de spin perpendiculares mais baixos. Para o nanofio antiferromagnético verificamos a quebra da degenerescência dos modos quando ambas as interações Zeeman e dipolar atuavam. Observamos que o termo dipolar frustra a configuração antiferromagnética, forçando os spins a se rearranjar na rede para uma configuração de mínima energia. Outro dado interessante é no que diz respeito ao valor de campo magnético cujo valor causa energia nula. Isso também implica que os spins precisam de uma nova orientação de equilíbrio, cujo o estado é chamado de *spin-flop*.

Como perspectivas deste trabalho podemos fazer as seguintes extensões:

- realizar cálculos com parâmetros físicos reais e comparar os resultados com os experimentos, principalmente espalhamento de luz de Brillouin [29];
- no caso antiferromagnético, estender as contas para determinar a fase de *spin-flop* e a fase ferromagnética que surgem quando o campo aplicado excede um valor crítico, causando uma nova configuração dos spins na rede;
- aplicar campo magnético transversal, isto é, perpendicular ao eixo do nanofio e calcular os espectros de excitação, pois neste caso, ocorre uma competição entre o campo aplicado e o campo de demagnetização, resultando em uma configuração dos spins deno-

minada *canting*;

- incluir segundos vizinhos no termo de troca para vermos se há uma mudança significativa nos resultados;
- considerar nanofios de diferentes geometrias em sua seção reta e observar como o espectro de excitação se comporta;
- calcular as médias termodinâmicas do sistema como o calor específico, susceptibilidade magnética e as funções de correlação ( $\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle, \alpha = x, y, z$ );
- modelar nanofios considerando geometrias mais complexas, por exemplo, super-redes, que consistem em arranjos periódicos de dois materiais distintos, e superposições aperiódicas de camadas como a sequência de Fibonacci, Thue-Morse, etc.



## *Referências*

- [1] D. C. Mattis, *The theory of magnetism I: statics and dynamics* (Springer-Verlag, Berlim, 1981).
- [2] H. G. P. L. de Barros e D. M. S. Esquivel, *Rev. Bras. de Ens. de / Fis.* **22** (2000).
- [3] G. A. P. Ribeiro, *Rev. Bras. de Ens. de / Fis.* **22** (2000).
- [4] W. Gilbert, *On the loadstone and magnetic bodies* (Encyclopaedia Britânica, Chicago, 1971).
- [5] J. C. Maxwell, *A treatise on electricity and magnetism*, third ed. (Dover, New York, 1954).
- [6] S. L. A. de Queiroz, *Rev. Bras. de Ens. de / Fis.* **22** (2000).
- [7] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena* (Oxford, Oxford, 1971).
- [8] P. Weiss, *J. de Phys.* **6**, 661 (1907).
- [9] M. Knobel, *Ciência Hoje* **27** (2000).
- [10] H. E. Toma e K. Araki, *Ciência Hoje* **37** (2005).
- [11] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*, revised edition ed. (Addison-Wesley, Reading, Ma, 1994).
- [12] E. Merzbacher, *Quantum mechanics*, second edition ed. (Wiley, New York, 1970).
- [13] A. H. Morrish, *The physical principles of magnetism* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1965).
- [14] D. Craik, *Magnetism: principles and applications* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1995).
- [15] R. N. Faria e L. F. C. P. Lima, *Introdução ao magnetismo dos materiais* (Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [16] F. Boch, *Z. Physik* **74**, 295 (1932).
- [17] I. S. Oliveira e V. L. B. de Jesus, *Introdução à física do estado sólido* (Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [18] W. Heisenberg, *Z. Physik* **49**, 619 (1928).
- [19] R. M. White, *Quantum theory of magnetism*, second corrected and updated ed. (Springer-Verlag, Berlim, 1983).

- [20] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [21] R. Kubo, Phys. Rev. **87**, 568 (1952).
- [22] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956).
- [23] T. Holstein e H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
- [24] J. ichi Igarashi e A. Watabe, Phys. Rev. B **44** (1991).
- [25] J. M. Pereira e M. G. Cottam, Phys. Rev. B **68**, 104429 (2003).
- [26] F. M. Woodward, A. S. Albrecht, C. M. Wynn, C. P. Landee, e M. M. Turnbull, Phys. Rev. B **65**, 144412 (2002).
- [27] S. Nakajima, Y. Toyozawa, e R. Abe, *The physics of elementary excitations* (Springer-Verlag, New York, 1980).
- [28] F. M. Falicof e J. L. Morán-López, *Magnetic properties of low-dimensional systems* (Springer-Verlag, New York, 1986).
- [29] Z. K. Wang, M. H. Kuok, S. C. Ng, D. J. Lockwood, M. G. Cottam, K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, e U. Gösele, Phys. Rev. Lett. **89**, 027201 (2002).
- [30] V. V. Kruglyak, R. J. Hicken, A. N. Kuchko, e V. Y. Gorobets, J. Appl. Phys. **98**, 014304 (2005).
- [31] M. Hernández-Vélez, Thin Solid Films **495**, 51 (2006).
- [32] N. Chaure e J. Coey, J. Magn. Magn. Mater. **303**, 232 (2006).
- [33] J. Nogués, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev, S. Suriñach, J. S. Muñoz, e M. D. Baró, Phys. Rep. **422**, 65 (2005).
- [34] K. H. J. Buschow e A. S. van der Goot, Acta Cryst. B **27**, 1085 (1971).
- [35] V. M. T. S. Barthem, D. G. an A. Nait-Saada, D. Schmitt, e A. Y. Takeuchi, J. Magn. Magn. Mater. **80**, 142 (1989).
- [36] K. H. J. Buschow, *Handbook on the physics and chemistry of rare earths, Vol.2* (North-Holland, Amsterdam, 1979).
- [37] R. E. Rapp, E. P. de Souza, H. Godfrin, e R. Calvo, J. Phys. Condens. Matter. **7**, 9595 (1995).
- [38] M. Siqueira, R. E. Rapp, e R. Calvo, Phys. Rev. B **48**, 3217 (1993).
- [39] R. Calvo, M. C. G. Passeggi, M. A. Novak, O. G. Symko, S. B. Oseroff, O. R. Nascimento, e M. C. Terrile, Phys. Rev. B **43**, 1074 (1991).
- [40] T. M. Nguyen e M. G. Cottam, J. Magn. Magn. Mater. **272–276**, 1672 (2004).
- [41] T. M. Nguyen e M. G. Cottam, Phys. Rev. B **71**, 094406 (2005).
- [42] J. M. Pereira e M. G. Cottam, J. Appl. Phys. **85**, 4949 (1999).

- 
- [43] R. N. C. Filho, M. G. Cottam, e G. A. Farias, Phys. Rev. B **62**, 6545 (2000).
- [44] S. M. Rezende, *Topics in magnetism - Magnetic excitations in insulators* (Instituto de Física, UFPE, Recife, 1974).
- [45] S. V. Vonsovskii, *Magnetism v. one* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1974).
- [46] R. Arias e D. L. Mills, Phys. Rev. B **63**, 134439 (2001).
- [47] L. Néel, Ann. de Phys. **17**, 61 (1932).
- [48] M. nouri e M. G. Cottam, J. Appl. Phys. **97**, 10J112 (2005).
- [49] Y.-C. Chen, *Quantum nonlinear sigma model and spin wave theory studies of lamellar quantum heisenberg antiferromagnets with random nonmagnetic impurities*, DPhil. thesis, University of California, 2001.
- [50] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor, M. Pantić, e S. Stojanović, Phys. Rev. B **65**, 104512 (2002).
- [51] R. M. White, M. Sparks, e I. Ortenburger, Phys. Rev. **139** (1965).
- [52] T. M. Nguyen, M. G. Cottam, H. Y. Liu, Z. K. Wang, S. C. Ng, M. H. Kuok, D. J. Lockwood, K. Nieslch, e U. G. ösele, Phys. Rev. B **73**, 140402 (2006).
- [53] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, seventh ed. (John Wiley & Sons Inc., New York, 1996).
- [54] H. Benson e D. L. Mills, Phys. Rev. **178**, 839 (1969).