



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO**

Wanêssa Façanha da Silva

Ondas de spin em redes decoradas

Fortaleza - CE

31/01/2014

Wanêssa Façanha da Silva

Ondas de spin em redes decoradas

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.

Prof. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

MESTRADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Fortaleza - CE

31/01/2014

Dedicatória

*Ao Camilo e à
família*

Agradecimentos

Quero agradecer à todos que contribuíram para essa tese. Em especial:

- À Deus, por ser minha fonte de energia.
- Ao Camilo, por me oferecer força e felicidade.
- Aos meu pais, por sempre apoiar meus planos.
- À tia Elke, por cuidar do Camilo com muito amor.
- À minha vó Eglantina, por todo o seu carinho.
- Ao Márcio, por todo o nosso amor.
- À minha tia Amanda, pelo apoio.
- Ao Prof. Raimundo Nogueira pela sua orientação, compreensão e paciência.
- Ao Prof. Ivan Santos de Oliveira, pela gentileza em esclarecer a minhas dúvidas em física do estado sólido.
- Ao Prof. Dory Hélio por ter contribuído com as correções desse trabalho.
- Ao Prof. Andrey Chaves pelas sugestões nas mudanças necessárias nesse trabalho.
- À minha amiga Rosana Alencar, por tudo.
- Ao meus colegas da UFC.
- À Rejane, por sempre me ajudar em situações burocráticas.
- À CAPES, pelo auxílio financeiro.

Resumo

Sistemas de baixa dimensionalidade têm atraído uma grande atenção ultimamente devido a sistemas como grafeno e nanotubos de carbono. Tais sistemas têm grandes possibilidades de aplicações tecnológicas, em particular na criação de dispositivos eletrônicos, devido às suas propriedades eletrônicas específicas. Nesse sentido, o estudo de outros sistemas em baixa dimensão se torna urgente. Mais especificamente, o estudo de propriedades magnéticas de materiais em baixa dimensionalidade também trás grandes novidades no comportamento de sistemas ferromagnéticos. O comportamento de ondas de spin em tais sistemas pode ser importante para o estudo da spintrônica e o desenvolvimento de novos aparelhos e memórias magnéticas. Dessa forma temos como objetivo nesse trabalho estudar o comportamento de ondas de spin em sistemas bidimensionais ferromagnéticos. Por sistemas bidimensionais consideramos aqui redes bidimensionais decoradas. As decorações são introduzidas para gerar redes com mais de um átomo na base da célula unitária da rede para estudarmos a riqueza do espectro das ondas de spin devido a essas modificações. A princípio tratamos com uma superposição de redes quadradas onde o deslocamento dessas redes depende dos parâmetros de controle α e β . Também usamos a superposição de um rede quadrada sobre um hexagonal.

Palavras-chave: ondas de spin. modelo de Heisenberg. ferromagnetismo em dimensões baixas

Abstract

Low-dimensional systems have attracted much attention lately due to systems such as graphene and carbon nanotubes. Such systems have great potential for technological applications. In particular the creation of electronic devices due to their specific electronic properties. In this sense, the study of other systems in low dimension becomes urgent. More specifically, the study of magnetic properties of materials at low dimensionality also brings great new features in the behavior of ferromagnetic systems. The behavior of spin waves in such systems may be important to the study of spintronic and the development of new devices and magnetic memories. Thus in this work we aim to study the behavior of ferromagnetic spin waves in two-dimensional systems. For two-dimensional systems we consider here two-dimensional networks decorated. The decorations are introduced to generate networks with more than one basic atom in the unit cell of the system to study the richness of the spectrum of spin waves due to these changes. At first deal with a superimposition of square networks where the displacement of these networks depends on the control parameters *alpha* and *beta*. We also use the superposition of a square on a hexagonal network.

Keywords: spin waves. Heisenberg model. low-dimensional ferromagnetism

Sumário

1	Introdução	p. 8
2	Momento magnético	p. 13
2.1	O spin do elétron	p. 15
2.1.1	O Princípio de exclusão de Pauli	p. 18
2.2	Diamagnetismo, Paramagnetismo e Ferromagnetismo	p. 20
2.2.1	Teoria de Weiss	p. 26
3	Estrutura Cristalina	p. 29
3.1	Redes Bidimensionais, Redes Tridimensionais e Bandas de Energia	p. 29
3.2	O Teorema de Bloch	p. 32
3.2.1	O Modelo Tight-Binding	p. 33
3.3	Interação de Troca, Modelo de Heisenberg e Ondas de Spin	p. 35
3.4	Ondas de spin em sistemas ferromagnéticos	p. 38
4	Ondas de Spin em Redes Decoradas	p. 40
4.1	Rede quadrada simples	p. 40
4.2	Rede Quadrada Simples Finita	p. 44
4.3	Redes decoradas	p. 48
4.4	Duas redes quadradas interpenetradas	p. 49
4.4.1	Rede Favo de Mel	p. 53
4.5	Rede Favo de Mel Decorada	p. 54

5 Conclusões

p. 58

Referências Bibliográficas

p. 60

1 *Introdução*

A busca da compreensão da natureza é a mola propulsora do desenvolvimento humano. Esta busca tem levado o homem a organizar o conhecimento adquirido ao longo do tempo. Esse processo de organização e construção do conhecimento chamamos de ciência. Dentro desse conceito de ciência o estudo dos processos da natureza, energia, e propriedades da matéria é denominado de física. E uma propriedade da matéria que sempre atraiu a atenção do homem foi a capacidade de certos materiais de se atraírem. Essa propriedade chamada de magnetismo é o objetivo do estudo que mostraremos aqui. O magnetismo em si é um campo muito vasto da física. Dentro desse complexo conceito que é o magnetismo, vamos estudar nesse trabalho as propriedades e características de ondas de spin em sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade. Em particular, vamos estudar a propagação dessas ondas de spin ou magnons em redes de átomos bidimensionais decoradas. Vamos então descrever mais precisamente o que significa magnetismo, ondas de spin ou magnons, e redes atômicas bidimensionais decoradas.

O magnetismo está relacionado às correntes elétricas [1]. Em 1819, o físico dinamarquês Hans Christian Oersted, procurava verificar se uma corrente atuava sobre um ímã, e para confirmar essa atuação ele usou uma bússola. Ao realizar o experimento, Oersted percebeu que o desvio da agulha era mais perceptível quanto maior fosse a corrente que passava por um fio próximo a bússola. Logo, o movimento da agulha ocorre porque existe uma força de natureza magnética agindo sobre ela [2,3]. Com a descoberta do magnetismo, uma base para o conhecimento de materiais magnéticos se tornou possível e conseqüentemente a importância dos fenômenos magnéticos para a tecnologia. Tendo um pensamento formado sobre o que é magnetismo, poderemos seguir em frente para explicarmos o momento magnético e as propriedades relacionadas a ele.

Para entendermos as propriedades relacionadas ao momento magnético, precisaremos, primeiramente, falar sobre o momento magnético. O momento magnético é um vetor que indica a medida da intensidade e orientação do dipolo. Para obtê-lo, iremos comentar sobre um modelo clássico de um elétron de massa m e carga $-e$ movendo-se em uma órbita circular de Bohr, que gera uma corrente. É importante falar sobre esse modelo clássico pois, a partir do movimento

circular de um elétron, usando uma combinação de eletromagnetismo clássico, teoria de Bohr e mecânica quântica, obtemos o momento magnético relacionado com o momento angular orbital do elétron, que será chamado de momento magnético orbital. Por consequência ele também estará relacionado ao número quântico orbital l e ao número quântico magnético m . Sabendo que, para qualquer valor de l , os valores de m irão variar de $-l$ a l .

Até que ponto essa relação do momento magnético com o momento angular orbital do elétron é o suficiente para entendermos alguns fenômenos? Para saber, temos que lembrar do experimento de Stern-Gerlach. No experimento de Stern-Gerlach, por convenção, o campo magnético está na direção z . Esse fato é importante, pois ao termos m igual a zero a componente z do momento magnético orbital será zero, pois eles estão relacionados como foi mencionado acima. Com isso como poderemos explicar a separação em duas componentes do feixe de átomos de prata? Para explicar que os feixes continuam se separando, mesmo com a componente z do momento magnético orbital igual a zero, é preciso considerarmos o momento angular intrínseco de um elétron, denominado de spin, pois esse momento angular intrínseco está relacionado ao momento magnético intrínseco do elétron, denominado momento magnético de spin. O momento magnético de spin será o responsável pela separação dos feixes do átomo de prata. Portanto, assim como o momento angular total é a adição do momento angular orbital com o momento angular de spin, o momento magnético é a adição do momento magnético orbital com o momento magnético de spin. Com a explicação acima sobre o momento magnético devido ao spin, percebemos que o momento magnético está relacionado tanto com o momento angular orbital quanto com o momento angular de spin [4]. Iremos fazer uso da relação do momento magnético com o spin, pois eles desempenham um papel importante no estudo do magnetismo na matéria, não esquecendo de mencionar que o estudo microscópico do magnetismo só foi possível no primeiro quarto do século XX, com o surgimento da Mecânica Quântica [5]. Tendo em mãos a ideia do que representa o momento magnético e o spin, lembrando que spin é um momento angular intrínseco de uma partícula [6], falaremos sobre o processo de magnetização e suas consequências, ou seja, sobre as propriedades ligadas ao momento magnético.

Em escala microscópica, um material pode responder de formas diferentes à ação de um campo magnético externo. Essa resposta está na forma do alinhamento dos momentos magnéticos em relação ao sentido do campo aplicado e através da susceptibilidade magnética, que denotamos por χ . Para compreendermos essa afirmação imagine que um material magnético é composto por vários átomos. Não iremos especificar de que elemento químico se trata. Quando ligarmos um campo magnético pequenas correntes induzidas se formam dentro do átomo, de acordo com a Lei de Lenz, as correntes geram um campo magnético oposto ao campo externo crescente. Logo, os momentos magnéticos induzidos nos átomos se opõem ao campo magnético

externo e um material que possui esta relação é denominado de diamagnético. Em um material diamagnético, χ possui um valor negativo.

Existem casos em que os momentos magnéticos tentam alinhar-se com o campo magnético externo, mas nem todos conseguem. Materiais desse tipo são ditos paramagnéticos. Materiais paramagnéticos possuem χ variando com o inverso da temperatura, e essa relação de variação de χ com a temperatura é conhecida como a lei de Curie [5,7]. “O paramagnetismo é em geral, um tanto fraco, posto que as forças de alinhamento são relativamente pequenas quando comparadas com as forças dos movimentos térmicos que desfazem a ordem”[7].

O ordenamento dos momentos magnéticos é importante e se manifesta de diversas formas, como foi mencionado anteriormente. Prosseguindo com o assunto ordenamento magnético, poderemos explicar o ferromagnetismo. Ao ocorrer o alinhamento do momento magnético com o campo magnético externo, mesmo quando o campo é desligado, observamos um material ferromagnético. Em um material ferromagnético, χ está variando com o inverso da temperatura. A definição de materiais diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos é explicada através de um elemento importante que caracteriza o material, denominado de magnetização. O que entendemos de magnetização é que se trata, em nível microscópico, da ordenação ou alinhamento dos momentos magnéticos atômicos[5,7].

As propriedades físicas dos materiais magnéticos dependem do seu ordenamento, como mencionado anteriormente. Contudo, a disposição espacial dos átomos é um fator que afeta fortemente as propriedades físicas dos materiais magnéticos. Dessa forma, precisamos descrever os diversos tipos de arranjos espaciais. Para isso devemos estudar as estruturas cristalinas dos materiais. Um cristal “é formado pelo acúmulo de átomos em ambiente estável, a partir de um solução”[8]. Chamamos de cristal ideal aquele que surge com a repetição infinita de grupos idênticos de átomos. Esse grupo de átomos é denominado de base, e a base ligada a um conjunto de pontos matemáticos formam a rede cristalina. As variações da rede cristalina podem ser classificadas como unidimensional, bidimensional ou tridimensional. Em particular, vamos nos concentrar aqui no estudo de redes bidimensionais que têm como característica a sua forma invariante em relação as rotações de π e 2π em torno de um eixo que passa por um ponto da rede. Existem cinco tipos diferentes de redes bidimensionais, que são a rede oblíqua e as quatro redes especiais[8].

Em uma rede cristalina os átomos encontram-se empacotados nos sítios. Os elétrons pertencentes aos átomos, interagem com os seus vizinhos e essa interação é de origem coulombiana. Ao considerar o princípio de exclusão de Pauli, a função de onda total de um elétron tem que

ser antisimétrica. Usamos a parte espacial da função de onda, para calcularmos a energia média devido à interação entre os elétrons[9,5].

Anteriormente discutimos sobre o spin, o momento magnético e suas influências na classificação dos materiais. Continuaremos com esse assunto para mostrar um modelo que seja capaz de descrever um ordenamento ferromagnético a altas temperaturas, lembrando que um modelo de spins não interagentes é incapaz de descrever tal ordenamento. Poderíamos considerar as interações dipolo-dipolo no Hamiltoniano em um sistema com os spins localizados, com o objetivo de explicar o ferromagnetismo mas esse tipo de interação é fraca a altas temperaturas e não conseguiriam manter o estado ordenado. A fim de resolver esse problema, na década de 30, Dirac, Heisenberg e outros sugeriram uma nova forma de explicar um estado ferromagneticamente ordenado, que também servisse a altas temperaturas. Eles estruturaram esse novo mecanismo, usando argumentos quânticos e incluindo a interação de origem coulombiana, sendo considerada forte o suficiente para explicar tal ordenamento[10].

No parágrafo anterior, falamos sobre como calcular a energia média, onde usávamos apenas a parte espacial da função de onda total do elétron, já que a interação coulombiana entre eles independe do spin. Ao fazermos o cálculo da energia média, encontramos dois termos: um termo representa a energia coulombiana média do sistema e outro termo representa a energia de troca, sabendo que a energia de troca aparece ao considerarmos o princípio de exclusão de Pauli. Werner Heisenberg, em 1928, foi o primeiro a notar que a energia de troca explicava o ordenamento magnético. O Hamiltoniano de Heisenberg, que explica o ferromagnetismo, contém a energia de troca multiplicada pelo produto escalar dos spins dos elétrons. O sinal da energia média depende do estado de spin ser singleto ou tripleto [5,10]. Além desse modelo, podemos citar o modelo de Ising, e o modelo XY que também são usados para estudar o ordenamento ferromagnético. O modelo de Ising é considerado um caso limite do modelo de Heisenberg, pois ele considera apenas a componente z do spin, enquanto o modelo de Heisenberg considera as componentes x, y e z do spin. Em 1925, Ising apresentou a solução unidimensional do seu modelo e percebeu que era decepcionante pois não apresentava nenhuma magnetização espontânea e nenhuma transição de fase. Voltando ao modelo XY, este considera apenas as componentes x e y do spin [11,10].

Este trabalho tem como objetivo fazer uso do modelo de Heisenberg, o qual contém a energia média do sistema adicionado a energia de troca, para obter as energias de ondas de spin em redes planares. As oscilações em um sistema de spins é chamada de ondas de spin, pois enxergamos as oscilações dos spins por todo um sistema como ondas que se propagam, e

a quantização dessas ondas de spin é definida como magnons[5]. Esse trabalho apresenta um caso inédito, que avalia as mudanças na distribuição e na intensidade das energias das ondas de spin em redes decoradas. Sabendo que as estruturas a base de carbono como nanotubos de carbono e grafenos têm tido uma enorme atenção nos últimos anos devido a seu grande potencial em aplicações tecnológicas. Em particular o grafeno, que é basicamente uma folha de átomos de carbono distribuídos em uma rede favo de mel tem sido explorado tanto por esse potencial em aplicação tecnológica mas também por sua peculiaridade na sua banda de energia onde apresenta uma dispersão linear em torno de alguns pontos específicos da zona de Brillouin. Esse comportamento vem do fato da rede favo de mel possuir dois átomos na sua base. Esse foi o ponto que motivou nosso estudo. No capítulo 2, iremos abordar com mais detalhes a relação do momento magnético com o momento angular orbital e com o spin, falaremos sobre o spin e o princípio de exclusão de Pauli, materiais magnéticos e sobre a teoria de Weiss. No capítulo 3, falaremos sobre a estrutura cristalina, rede bidimensional, rede tridimensional, bandas de energia, teorema de Bloch, modelo tight-binding, interação de torca, modelo de Heisenberg e sobre as ondas de spin em um sistema ferromagnético. No capítulo 4, serão apresentados os resultados da obtenção das energias de ondas de spin em uma rede quadrada simples, em uma rede quadrada infinita, em duas redes quadradas interpenetradas, em rede favo de mel e em uma rede quadrada imersa em uma rede favo de mel. No capítulo 5 apresentamos a conclusão do nosso trabalho. No final, listamos as referências utilizadas.

2 *Momento magnético*

O resultado do experimento de Stern-Gerlach mostra que o elétron possui um momentum angular intrínseco, ou seja, o spin. Na realidade, o experimento original nada tinha a ver com o fato do elétron possuir spin: a primeira proposta para tal foi feita em 1925 por Uhlenbach and Goudsmit, e foi baseada na análise do espectro atômico. O experimento de fato tinha como objetivo mostrar a “quantização do espaço” associada com o momentum angular intrínseco dos elétrons. A previsão que foi feita pela “velha” mecânica quântica desenvolvida por Bohr afirmava que as componentes espaciais do momentum angular podiam possuir apenas valores discretos. De tal forma que a direção do vetor momentum angular era restrita a somente poucas possibilidades.

Antes de mostrarmos essa quantização do momento angular vamos calcular o momento magnético orbital do elétron e, para realizarmos este cálculo, faremos uso da teoria clássica eletromagnética, da teoria de Bohr e da mecânica quântica. Não faremos uso de um cálculo totalmente quântico, pois iremos preferir o modelo simples utilizado por Bohr na descrição do átomo.

Imagine um elétron de massa m e carga $-e$ girando com velocidade de módulo v entorno de uma órbita de Bohr circular de raio r . Esse movimento circular de um elétron gera uma corrente de intensidade i , que é escrita da seguinte forma:

$$i = \frac{e}{\tau} = \frac{ev}{2\pi r}, \quad (2.1)$$

onde τ é o período orbital do elétron. O eletromagnetismo ensina que é conveniente associar a uma espira, atravessada por uma corrente i e com seção reta A , o momento de dipolo magnético $\vec{\mu}$, cujo módulo é

$$\mu_\ell = iA. \quad (2.2)$$

A direção e o sentido de $\vec{\mu}$ são dados pela regra da mão direita. A conveniência vem do fato que o campo magnético gerado pela espira em pontos muito distantes dela depende do produto iA . O conceito de momento de dipolo magnético continua útil no domínio quântico, daí sua importância. Para falarmos do momento magnético, iremos fazer uma pequena comparação entre a carga elétrica e o momento magnético. Na eletricidade, a carga ou monopolo elétrico é a entidade mais simples que gera campo elétrico. Em contrapartida, no magnetismo podemos considerar o dipolo magnético como a entidade geradora de campo magnético, já que não há provas experimentais da existência do monopolo magnético. O momento de dipolo magnético é uma propriedade do dipolo que gera (e interage com) o campo magnético, pois ele “é uma medida da intensidade e orientação do dipolo”[4].

Vamos agora deduzir heurísticamente a relação entre o momento magnético orbital $\vec{\mu}_\ell$ e o momento angular \vec{L} . O momento angular \vec{L} é escrito da seguinte maneira:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \quad (2.3)$$

Em uma órbita circular, \vec{r} e \vec{v} são sempre perpendiculares entre si. Em consequência disso o módulo de L será:

$$L = mrv. \quad (2.4)$$

Substituindo a equação (2.1) e $A = \pi r^2$ na equação (2.2), obtemos:

$$\mu_\ell = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2}, \quad (2.5)$$

e fazendo a razão entre os módulos de μ_ℓ e de L , teremos:

$$\frac{\mu_\ell}{L} = \frac{evr}{2mrv} = \frac{e}{2m}, \quad (2.6)$$

onde a constante $\frac{e}{2m}$ pode ser escrita na forma

$$\frac{g_l \mu_B}{\hbar}, \quad (2.7)$$

onde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0,927 \times 10^{-20}$ ergs/gauss e $g_l = 1$. μ_B é denominado magneton de Bohr, uma unidade de medida natural dos momentos magnéticos e g_l é o fator de Landé. Nesse caso $g = 1$,

mas haverá casos em que ele será diferente de um.

Com essas informações, reescreveremos a equação (2.6) na forma vetorial, especificando o módulo de $\vec{\mu}_\ell$ e a sua orientação relativa a \vec{L} da seguinte forma:

$$\vec{\mu}_\ell = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} \vec{L}. \quad (2.8)$$

Ao observarmos a razão entre os módulos de μ_ℓ e L , percebemos que ela independe do raio da órbita e da frequência orbital, ou seja, independe da teoria mecânica. Logo poderemos usar a equação (2.8) para qualquer momento angular, orbital ou intrínseco. Ao calcular $\vec{\mu}_l$ quanticamente e dividi-lo pela expressão encontrada da mecânica quântica $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$, encontraremos o mesmo valor obtido pela teoria de Bohr, que corresponde à equação (2.8). Substituindo o valor “quântico” de L na equação (2.8), obtemos o seguinte módulo do momento magnético orbital:

$$\mu_\ell = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} L = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = -g_l \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)}. \quad (2.9)$$

Agora, vamos substituir o valor de L_z na equação (2.8) e o módulo da componente z do momento magnético orbital será [4]:

$$\mu_{\ell_z} = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} L_z = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} m_\ell \hbar = -g_l \mu_B m_\ell. \quad (2.10)$$

2.1 O spin do elétron

O spin é uma propriedade fundamental das partículas, assim como a massa e a carga. O spin foi proposto por Uhlenbeck and Goudsmit em 1925 para explicar a separação de linhas no espectro do hidrogênio, até então não entendida. Alguns anos antes, em 1920, um experimento havia sido realizado em Frankfurt, na Alemanha, por Otto Stern e Walter Gerlach. Esse experimento consiste em fazer passar um feixe de átomos de prata através de um campo magnético não-uniforme em uma determinada direção. Observou-se que aproximadamente metade dos átomos é defletida naquela direção em um dado sentido, e a outra metade é defletida em sentido contrário [12].

O experimento de Stern-Gerlach deveria ter resultado nulo, sem deflexão dos feixes, caso o único momento angular presente nos átomos e suas partículas fosse o orbital, visto que o átomo de prata tem todas as camadas cheias e um elétron na camada 5s. Assim seu momento angular orbital total é nulo e, conseqüentemente, o momento de dipolo magnético a ele associado também. Vale notar que essa não foi a compreensão do inicial do experimento, daí o spin só ter sido proposto cinco anos mais tarde, em outro contexto [13].

Então, aquele experimento é uma evidência de que o elétron possui um momento angular intrínseco, o spin \vec{S} , ao qual associa-se o número quântico s . Como a multiplicidade das componentes do momento angular quântico é $2s + 1$, e o experimento apresenta a separação do feixe em duas componentes, a multiplicidade é igual a 2, o que implica que $s = \frac{1}{2}$. Vamos escrever a relação do módulo S e da componente S_z do spin com os números quânticos s e m_s , para podermos em seguida mostrar a relação do momento magnético com spin:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad (2.11)$$

$$S_z = m_s\hbar. \quad (2.12)$$

Agora podemos escrever a relação do momento magnético com o spin, da mesma forma que fizemos anteriormente entre o momento magnético e o momento angular orbital:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{g_s\mu_B}{\hbar}\vec{S}, \quad (2.13)$$

$$\mu_{s_z} = -g_s\mu_B m_s, \quad (2.14)$$

onde g_s é denominado fator g de spin.

Como afirmamos anteriormente, a separação do feixe dos átomos de prata no experimento de Stern-Gerlach indica que m_s assumirá apenas dois valores, $\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. Por outro lado, g_s é um pouco maior que 2, indicando que, neste ponto, o momento angular orbital e o de spin tem relações distintas com o momento magnético gerado por cada um deles [4]. A derivação teórica do valor de g_s é feita no âmbito da eletrodinâmica quântica[14]. A concordância entre a previsão teórica e o valor experimental de g_s é uma das melhores, senão a melhor, já alcançada por uma teoria física!

Vamos formalizar as ideias acima. Considerando que o campo magnético não homogêneo está na direção z, é a componente z do spin do elétron que será medida, e seus dois possíveis valores são $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$. A esses autovalores correspondem autoestados que serão representados

por $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, respectivamente. Com isso teremos:

$$S_z |\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad (2.15)$$

$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \quad (2.16)$$

Os autoestados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ formam uma base e obedecem a condição de ortonormalidade:

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \quad \text{e} \quad \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0. \quad (2.17)$$

Sabendo que $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ são autoestados de um operador, então a combinação linear destes também é:

$$|\alpha\rangle = a |\uparrow\rangle + b |\downarrow\rangle, \quad (2.18)$$

onde $|a|^2$ é a probabilidade de encontrar o elétron no estado $|\uparrow\rangle$ e $|b|^2$ é a probabilidade de encontrar o elétron no estado $|\downarrow\rangle$. Logo $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

A representação matricial dos autoestados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ é:

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Essas matrizes coluna são denominadas espinores. A representação matricial das componentes de spin é:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.20)$$

onde as matrizes acima são denominadas matrizes de Pauli, que são definidas da seguinte forma[6]:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

2.1.1 O Princípio de exclusão de Pauli

O princípio de exclusão de Pauli afirma que duas partículas de spin semi-inteiro, os férmions, não podem estar em um mesmo estado. Então, ao escrevermos a função de onda total de dois elétrons, teremos que considerar esse princípio, pois a função de onda dos elétrons deve ser anti-simétrica sob a troca de partículas, obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli.

Assim, a função de onda total de dois elétrons é formada pelo produto da função de onda espacial simétrica com uma função de onda espinorial anti-simétrica ou de uma função de onda espacial anti-simétrica com a função de onda espinorial simétrica.

Dessa forma, podemos agora construir as funções de onda espinorial simétrica (β_S) e anti-simétrica (β_A) [15]. Primeiro iremos considerar duas partículas com spin $\frac{1}{2}$, o elétron e o próton no estado fundamental do hidrogênio, para não nos preocuparmos com o momento angular orbital. Sabendo que tanto o elétron quanto o próton podem ter spin para cima ou para baixo, obtém-se quatro possibilidades para representar os estados de spin, que são:

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

onde a primeira seta refere-se ao elétron e a segunda ao próton. O momento angular total de spin de um átomo é definido como a adição dos momentos angulares de spin das partículas do sistema, que possui a seguinte forma:

$$\vec{S} \equiv \vec{S}^1 + \vec{S}^2. \quad (2.22)$$

Assim, o operador S_z total será simplesmente a adição das duas componentes z dos operadores de spin de cada partícula, agindo sobre os estados v_1 e v_2 :

$$\begin{aligned} S_z v_1 v_2 &= (S_z^1 + S_z^2) v_1 v_2 = (S_z^1 v_1) v_2 + v_1 (S_z^2 v_2) \\ &= (\hbar m_1 v_1) v_2 + v_1 (\hbar m_2 v_2) = \hbar(m_1 + m_2) v_1 v_2, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde S_z^1 atua apenas sobre v_1 e S_z^2 apenas sobre v_2 . Então $m_1 + m_2$ é o número quântico para o sistema composto. Com isso teremos:

$$|\uparrow\uparrow\rangle : m = 1$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle : m = 0$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle : m = 0$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle : m = -1.$$

A variação acima dos valores de m nos faz perceber que o estado com $s = 1$ deve existir, para o qual $m = -1, 0, 1$, além do estado $s = 0$, para o qual $m = 0$.

Para descobrirmos qual é o estado com $s = 0$, iremos aplicar o operador de aniquilação no estado $|\uparrow\uparrow\rangle$ e obteremos:

$$\begin{aligned} S_- |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_-^1 |\uparrow\rangle) |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle (S_-^2 |\uparrow\rangle) \\ &= (\hbar |\downarrow\rangle) |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle (\hbar |\downarrow\rangle) = \hbar(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Assim, os três estados quando $s = 1$, na notação $|sm\rangle$

$$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle; |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]; |1-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (2.25)$$

onde os estados acima são denominados tripleto, que é simétrico e representa a função de onda espinorial simétrica β_S .

Para $s = 0$ e $m = 0$, teremos o estado normalizado:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle], \quad (2.26)$$

onde o estado acima é denominado singleto. O estado singleto é anti-simétrico e representa a função de onda espinorial anti-simétrica β_A .

Percebemos que ao combinar duas partículas de spin $\frac{1}{2}$ poderemos ter nesta combinação um spin total igual a 1 ou a 0, dependendo se ocupam a configuração tripleto ou singleto, respectivamente [6].

2.2 Diamagnetismo, Paramagnetismo e Ferromagnetismo

Para medir o efeito da aplicação de um campo magnético externo sobre algum material, deve-se verificar como os dipolos magnéticos respondem coletivamente a este campo. Para tanto, é útil definir a magnetização \vec{M} da seguinte forma: Toma-se uma região macroscopicamente pequena do material, mas grande o suficiente para conter um grande número de dipolos magnéticos. A região tem momento de dipolo magnético \vec{m}_i e volume v . Define-se a magnetização $\vec{M}(\vec{r})$ em cada ponto do material (região macroscopicamente pequena), localizado pelo vetor \vec{r} como

$$\vec{M} = \frac{1}{v} \sum_i \vec{m}_i. \quad (2.27)$$

Claramente, a magnetização indica o comportamento global dos dipolos magnéticos microscópicos do material. Do ponto de vista macroscópico, a magnetização está definida em cada "ponto" material. Seria de esperar que qualquer material a temperaturas suficientemente altas, como a temperatura ambiente, e na ausência de campo magnético externo, tenha magnetização nula, uma vez que a agitação térmica deveria destruir qualquer alinhamento que os dipolos pudessem ter.

Esse, de fato, é o comportamento mais comum. Naturalmente, a forma como os momentos magnéticos orbital e intrínseco reagem à aplicação de um campo magnético determina o comportamento global de um dado material [2]. Também aqui há diferença entre ambos. Tudo deriva do efeito do torque $\vec{\tau}$ que atua sobre o dipolo quando está na presença de um campo magnético \vec{B}

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (2.28)$$

Para o que nos interessa, é suficiente saber que este torque causa uma variação no momento magnético orbital $\vec{\mu}_\ell$ oposta a \vec{B} , e tende a alinhar o momento magnético de spin $\vec{\mu}_s$ a \vec{B} .

O primeiro efeito é universal, todos os átomos o experimentam. Em materiais cujos átomos têm um número par de elétrons, não há elétrons desemparelhados e, portanto, os spins dos elétrons se somam para anular-se. Assim $\vec{\mu}_s = 0$, e o efeito líquido no material é uma magnetização oposta ao campo externo \vec{B} . Estes materiais são ditos diamagnéticos.

O segundo é experimentado apenas por materiais cujos átomos têm um número ímpar de

elétrons, de modo que $\vec{\mu}_s \neq 0$. A magnetização induzida terá o mesmo sentido \vec{B} . Tais materiais são chamados paramagnéticos.

A figura ilustra de forma simples os dois casos. Fica evidente que os materiais diamagnéticos são repelidos, enquanto os paramagnéticos são atraídos pelo campo magnético.

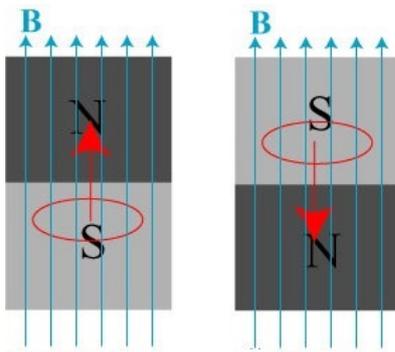


Figura 2.1: Diamagnetismo e Paramagnetismo. Figura retirada do site: <http://skullsinthestars.com/2009/04/13/levitation-and-diamagnetism-or-leave-earnshaw-alone/>

A grandeza que mede a intensidade e o tipo de resposta que o material dá quando um campo magnético externo \vec{H} lhe é aplicado é a *susceptibilidade magnética* χ_m :

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}. \quad (2.29)$$

Se o material for homogêneo, que é o caso mais simples, χ_m é um escalar. Materiais diamagnéticos têm $\chi_m < 0$, enquanto paramagnéticos têm $\chi_m > 0$. Ambos efeitos são muito fracos, o que é indicado pelo pequeno valor de χ_m , com valores em torno de 10^{-5} .

Na eletrodinâmica clássica, os efeitos da magnetização são simulados pelas densidades de correntes de magnetização volumétrica $\vec{J}_m = \nabla \times \vec{M}$, e superficial $\vec{K} = \vec{M} \times \hat{n}$. Assim, haverá em geral duas fontes para a indução magnética \vec{B} : a corrente convencional, que chamaremos corrente livre, e as correntes de magnetização. A densidade de corrente total \vec{J} será:

$$\vec{J} = \vec{J}_m + \vec{J}_l, \quad (2.30)$$

onde \vec{J}_m e \vec{J}_l são a corrente de magnetização e a corrente livre, respectivamente.

Agora, substituiremos essas correntes na equação da Lei de Ampère,

$$\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \vec{B}) = \vec{J}, \quad (2.31)$$

e obteremos a seguinte equação:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \right) = \vec{J}_l. \quad (2.32)$$

O termo entre parêntese é definido como o campo magnético \vec{H} :

$$\vec{H} \equiv \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}. \quad (2.33)$$

Assim, poderemos escrever a relação entre \vec{H} e \vec{B} :

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}). \quad (2.34)$$

O objetivo de obter esta relação é mostrar que ao substituirmos a equação (2.29) na equação acima, conseguiremos provar que \vec{B} é proporcional a \vec{H} em meios lineares, da seguinte forma:

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi_m)\vec{H}. \quad (2.35)$$

O termo entre parêntese é denominado permeabilidade magnética do material e denotado por μ . Com isso a equação (2.35) terá a seguinte forma:

$$\vec{B} = \mu\vec{H}. \quad (2.36)$$

Vamos agora tratar do ferromagnetismo, que é o assunto que nos interessa diretamente neste trabalho. Há materiais que apresentam uma magnetização muito intensa quando submetidos a um campo magnético. Além disso, nesses materiais, a magnetização continua mesmo na ausência de um campo magnético, o que não acontece com materiais diamagnéticos e paramagnéticos. Esse comportamento é chamado de magnetização espontânea. “A magnetização de um material ferromagnético é avaliada pelo seu histórico magnético e não apenas pelo campo magnético aplicado a ele”[1].

Assim como no paramagnetismo, no ferromagnetismo são os seus dipolos magnéticos associados ao spin dos elétrons desemparelhados que desempenham um papel fundamental, mas em contrapartida a diferença é que o ferromagnetismo possui como característica a interação entre os dipolos próximos e esses tem preferência em apontar no mesmo sentido.

Para entendermos porque os objetos ferromagnéticos do nosso dia-a-dia (um prego, por exemplo) não são ímãs fortes, mesmo sabendo que os dipolos magnéticos têm preferência em apontarem no mesmo sentido em um material ferromagnético, é preciso entendermos o que são os domínios. Os domínios são áreas pequenas em um material onde ocorre o alinhamento. Existem vários domínios em um material e neles todos os momentos de dipolo magnético encontram-se alinhados, mas as orientações dos domínios são aleatórias, o que resulta numa magnetização nula.

É importante saber que o ferromagnetismo ocorre devido ao alinhamento dos momentos de dipolo magnético dentro de um domínio e que a agitação térmica presente tem o poder de destruir esse ordenamento, mas apenas a um determinado valor de temperatura, o qual é 770°C para o ferro. O valor desta temperatura, onde ocorre a destruição do ordenamento, é chamada de temperatura de Curie. Abaixo desta temperatura o ferro é ferromagnético e acima desta ele é paramagnético. Não existe uma transição gradual entre do estado ferromagnético para o estado paramagnético, tal como não existe na mudança de fase da água, por exemplo. Essas mudanças abruptas em temperaturas definidas, que acontecem nas propriedades dos materiais, são denominadas *transições de fase* [1].

Como vimos, um material pode ser classificado de acordo com a sua resposta a aplicação de um campo magnético externo sobre ele, e essa resposta depende da temperatura, ou seja, do estado de agitação atômica. Lembrando sempre que o entendimento do magnetismo está ligado a Mecânica Quântica, pois um sistema clássico em equilíbrio térmico não pode possuir momento magnético diferente de zero. O momento magnético de um átomo isolado pode ter origem no spin dos elétrons, no momento angular orbital, no spin do núcleo e na variação do

momento angular orbital que é causada pela aplicação de um campo magnético externo [2]. Em termos macroscópicos, quando aumentamos o campo, a relação de \vec{M} com \vec{H} deixa de ser linear e para valores extremamente altos do campo, a magnetização satura e atinge o seu ponto máximo. Para materiais chamados de paramagnéticos ideais, que são paramagnéticos a todas as temperaturas, a susceptibilidade magnética está de acordo com a lei de Curie:

$$\chi_m = \frac{C}{T}. \quad (2.37)$$

“Do ponto de vista microscópico, o material paramagnético corresponde a um sistema composto por dipolos magnéticos microscópicos permanentes e não interagentes "[16]. Os elementos do grupo do ferro e dos terras raras são exemplos desse tipo de materiais. Para materiais paramagnéticos que não são ideais, a grandeza χ_m obedece a lei de Curie-Weiss, para temperaturas suficientemente altas:

$$\chi_m = \frac{C}{T - \Theta}. \quad (2.38)$$

Materiais que sofrem uma transição de um estado paramagnético para um estado ferromagnético possuem a constante Θ positiva, mas se ocorre uma transição de um estado paramagnético para um estado antiferromagnético a constante Θ do material será negativa.

As equações mais precisas para a dependência da magnetização com o campo H e a temperatura T é a que envolve um tratamento clássico dos dipolos microscópicos

$$M = \mu L \left(\frac{\mu H}{RT} \right), \quad (2.39)$$

onde

$$L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \quad (2.40)$$

é a função de Langevin. Quando um tratamento quântico é dado para a interação entre os dipolos e o campo externo, obtém-se a magnetização em termos da função de Brilluoin

$$M = \mu B \left(\frac{\mu H}{RT} \right), \quad (2.41)$$

onde a função de Brilluoin $B(x)$ é dada por

$$B(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth \left(\frac{2J+1}{2J} x \right) - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2J} \right), \quad (2.42)$$

onde J é o momento angular total de cada dipolo magnético do material.

Em um estado ferromagnético, a magnetização pode estar relacionada ao campo magnético externo ou relacionada com a temperatura. Quando um material é aquecido e submetido a um campo magnético externo constante, a sua magnetização estará variando continuamente com a temperatura. Para um valor qualquer, acima ou abaixo da temperatura crítica, a magnetização surge devido o campo. Quando o campo que age sobre uma substância é desligado lentamente, a uma temperatura constante, e se esta temperatura for superior à temperatura de Curie, a magnetização diminuirá linearmente com o campo, de acordo com $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$. Mas se a temperatura for inferior à temperatura de Curie, a magnetização não irá desaparecer com o desligamento do campo, e surge a magnetização espontânea. Quando o campo é pequeno, a magnetização irá variar com o campo da seguinte forma:

$$\vec{M} = \vec{M}^* + \chi_m \vec{H}, \quad (2.43)$$

onde \vec{M}^* é chamada de magnetização espontânea. \vec{M}^* e χ_m dependem apenas da temperatura. Quando o campo é nulo, a magnetização espontânea varia com a temperatura, mas na temperatura crítica ela se torna nula.

A compreensão do ferromagnetismo é contraditória, pois um material ferromagnético, assim como o ferro, possui uma magnetização espontânea abaixo da temperatura crítica, mas ele só possuirá essa imantação permanente ao ser exposto ao um campo magnético externo. Isso ocorre porque um material é composto por vários domínios magnéticos macroscópicos e, dentro

deles, encontram-se dipolos magnéticos em direções aleatórias. O dipolo magnético resultante se anula devido a orientação aleatória desses, logo para uma amostra apresentar uma imantação natural é preciso ser exposta a um campo magnético [16].

2.2.1 Teoria de Weiss

A magnetização espontânea de materiais ferromagnéticos, foi explicada por Weiss [17]. Ele imaginava que cada dipolo sofria a ação do campo magnético produzidos pelos dipolos vizinhos e, além disso, Weiss afirmou que a magnetização era proporcional ao campo, de forma que o campo total sobre o dipolo seria $\vec{H} + \lambda\vec{M}$, sendo $\lambda > 0$. Então quando o campo é zero o material continua submetido a um campo local, o qual Weiss chamou de campo molecular, que orientaria o dipolo. O campo molecular ou de Weiss, ocorre através das interações entre os momentos magnéticos do material, na época de Weiss essas interações eram desconhecidas e só foram esclarecidas na teoria de Heisenberg [18]. Por mais que a técnica de campo médio, também conhecida como campo molecular, seja aprimorada ela nunca irá competir com abordagens exatas, mas ela pode ser utilizada para avaliar um problema de uma forma mais simplificada [19].

Se substituirmos o campo magnético pelo campo molecular, na equação (2.41), obtemos a equação de estado de um sistema que sofre uma transição ferromagnética-paramagnética. Substituindo o campo molecular na equação de magnetização de Brillouin, teremos:

$$M = \mu_B \left[\frac{\mu}{RT} (H + \lambda M) \right]. \quad (2.44)$$

Quando H for igual a zero, a equação acima terá a seguinte forma:

$$M = \mu_B \left(\frac{\mu\lambda}{RT} M \right). \quad (2.45)$$

Faremos uso do método gráfico para verificar uma solução não nula da equação acima, a qual comprova a magnetização espontânea. Iremos reescrever a equação 2.45, usando a variável $x = \frac{\lambda\mu M}{RT}$:

$$\frac{RT}{\lambda\mu^2}x = B(x). \quad (2.46)$$

O gráfico abaixo mostra que (2.46) só terá solução para $x \neq 0$ se

$$\frac{RT}{\lambda\mu^2} \leq B'(0). \quad (2.47)$$

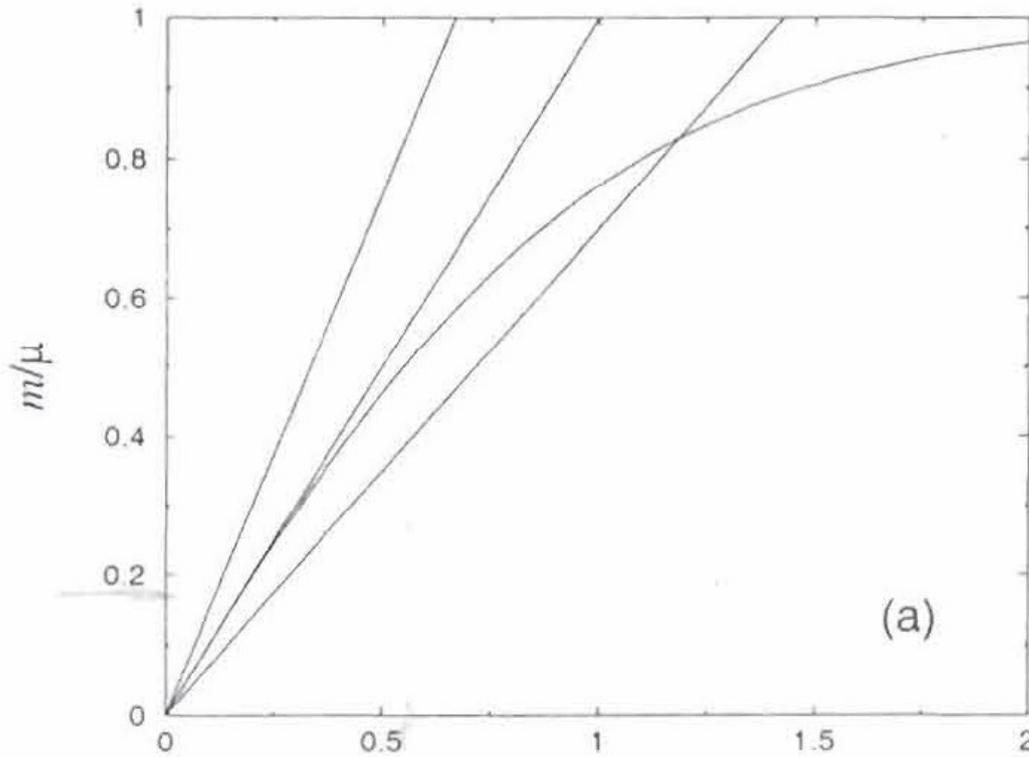


Figura 2.2: Solução gráfica da equação 2.46. Figura retirada de [16]

Essa condição é equivalente à $T \geq T_c$, onde

$$\frac{RT_c}{\lambda\mu^2} = B'(0). \quad (2.48)$$

Mas de (2.42) vem que $B'(0) = \frac{(J+1)}{3J}$. Assim

$$T_c = \frac{(J+1)\lambda\mu^2}{3JR}. \quad (2.49)$$

Conhecendo-se a magnetização de saturação μ , esta equação permite determinar o valor de λ ou, equivalentemente, do campo molecular de Weiss $H_W = \lambda\mu$. Estimando $\mu = \mu_B$,

$$H_W \approx \frac{RT_c}{\mu_B}. \quad (2.50)$$

Usando o valor de T_c para o ferro, tem-se $H_W \approx 10^3 T$ que é quatro ordens de grandeza maior que o campo gerado por um dipolo magnético da ordem do magneton de Bohr em seu vizinho. Isto indica que o ferromagnetismo não é fruto de interações magnéticas entre os dipolos. Sua causa é o princípio da exclusão de Pauli [16].

3 *Estrutura Cristalina*

A verificação da cristalinidade de um material não é realizada através da aparência dos elementos, mas através da organização dos íons em um arranjo periódico. Com a difração de raio X, ficou razoável descrever a estrutura microscópica dos sólidos [20]. Contudo, antes de falar em cristais e na formação de rede cristalina, é importante comentar sobre os átomos e os seus arranjos espaciais. Os átomos quando não estão muito energizados ou se movendo com grandes velocidades, estão em busca de se agrupar em uma configuração de menor energia, quando conseguem essa configuração percebemos que os mesmos arranjos surgem em outra posição, com o mesmo objetivo que é procurar uma configuração de menor energia, e com isso temos um padrão repetitivo dos átomos e conseguimos visualizar a simetria da matéria onde eles se encontram. Com a ideia de arranjo dos átomos e com a sua repetição, teremos a possibilidade de compreender o surgimento de um cristal, de uma rede cristalina, e de visualizarmos a simetria desses. Na superfície da terra os átomos são expostos a uma variedade de condições diferentes de pressão e temperatura. Tais condições é que são responsáveis pelo agrupamento dos átomos na composição das substâncias, e conseqüentemente dos cristais e sua estrutura cristalina [7], a estrutura cristalina é apresentada na figura 3.1. A rede cristalina pode tomar várias formas e vamos classificá-las nas seções em seguida, que serão em redes bidimensionais e tridimensionais.

3.1 **Redes Bidimensionais, Redes Tridimensionais e Bandas de Energia**

Classificar todas as estruturas cristalinas possíveis, de uma só vez, é muito complicado e por isso consideraremos somente a classificação de rede de Bravais. A rede de Bravais é um conceito fundamental para definirmos qualquer sólido cristalino e é entendida como um arranjo infinito de pontos discretos que possui arranjos e orientações, os quais são os mesmos quando visualizados de qualquer ponto. Lembrando que esse é um conceito matemático para rede de Bravais [20].

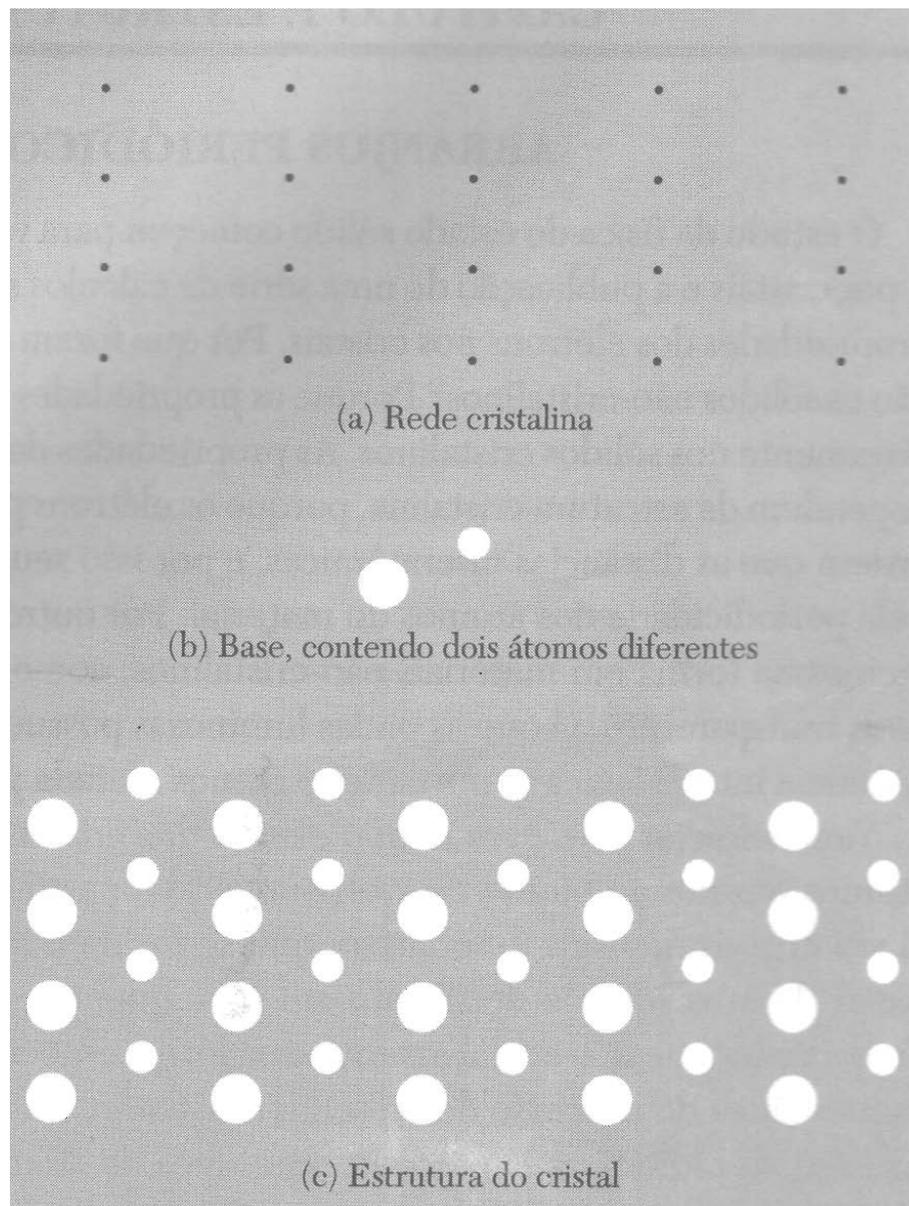


Figura 3.1: a) Rede Cristalina, b) Base, contendo dois átomos diferentes, c) Estrutura do Cristal. Figura retirada de [8].

A rede que é invariante apenas em relação a rotações de π e 2π , em torno de um eixo passando por um ponto desta, é chamada de rede oblíqua. Entretanto, algumas redes do tipo oblíquo podem ser invariantes em relação a rotações de $\frac{2\pi}{3}$, $\frac{2\pi}{4}$ ou $\frac{2\pi}{6}$, ou em relação a uma reflexão especular, onde esta denominação é para planos que passam por pontos da rede.

Podemos impor certas restrições aos eixos a_1 e a_2 e construir uma rede invariante em relação a estas novas operações. Existem quatro restrições onde cada uma leva um tipo especial de rede, com isso há cinco redes diferentes do tipo bidimensionais, que é a rede oblíqua e as quatro redes especiais. Os tipos de redes diferentes são chamados de redes de Bravais, logo existem cinco redes de Bravais em duas dimensões.

Em três dimensões existem quatorze redes, dentre as quais uma é a triclínica, chamada de rede geral, e as treze restante são redes especiais. Com o objetivo de facilitar a classificação, as redes foram agrupadas em sete sistemas: triclínico, monoclínico, ortorrômbico, tetragonal, cúbico, trigonal e hexagonal.

A rede cúbica é dividida da seguinte maneira: rede cúbica simples (cs), rede cúbica de corpo centrado (ccc) e rede cúbica de faces centradas (cfc). Essas redes cúbicas podem ser visualizadas na figura 3.2. É importante saber que as células primitivas, por definição, possuem um ponto da rede, enquanto as células convencionais da rede ccc contém dois pontos da rede e a célula da rede cfc possui quatro pontos da rede.

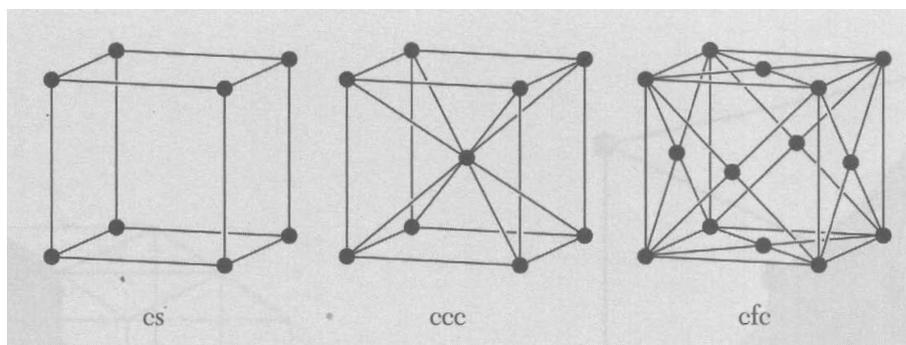


Figura 3.2: Rede Cúbica Simples, Rede Cúbica de Corpo Centrado e Rede Cúbica de Face Centrada. Figura retirada de [8].

Para identificarmos os pontos em uma célula utilizamos a equação:

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3, \quad (3.1)$$

que é escrita em termos das coordenadas atômicas x , y e z . O tamanho de cada coordenada corresponde a uma fração do comprimento do eixo a_1 , a_2 , a_3 que está na direção do eixo, e a origem é tomada como sendo um dos vértices da célula. Logo, as coordenadas do centro de uma célula cúbica são $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ e as do centro das faces são $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ [8].

Em uma rede cristalina as energias não são mais discretas, levando em consideração que os átomos dispostos em uma rede cristalina não são átomos isolados, portanto as suas funções de onda serão sobrepostas e dessa forma surgirá as bandas de energia. As bandas de energia são responsáveis pela diferenciação das propriedades condutoras de metais, isolante e semicondutoras. Para o modelo tight-binding ou modelo de ligação forte, como também é chamado, a superposição de funções de onda é tal que a função de onda de um elétron pode ser escrita como uma combinação linear de orbitais atômicos [5].

A disposição dos elétrons em um cristal é organizada em bandas de energia e eles estão separados por uma banda proibida, esta recebe tal nome porque possui uma energia a qual o elétron não consegue adquirir. As bandas proibidas surgem da junção das ondas associadas aos elétrons de condução com os íons da rede cristalina. Sabendo que as reflexões de Bragg de ondas eletônicas em cristais são responsáveis pelo surgimento de bandas proibidas. Lembrando que a condição de Bragg para a difração é a seguinte:

$$k = \pm \frac{1}{2}G = \pm n \frac{\pi}{a}, \quad (3.2)$$

onde $G = \frac{2\pi n}{a}$ é um vetor da rede recíproca e n é um número inteiro. Em $k = \pm \frac{\pi}{a}$ ocorre as primeiras reflexões e a primeira banda proibida, para outros valores de n obtemos outras bandas proibidas. A primeira zona de Brillouin está entre $+\frac{\pi}{a}$ e $-\frac{\pi}{a}$ no espaço recíproco [8].

3.2 O Teorema de Bloch

Para encontrarmos os autoestados dos elétrons que se movem livremente em um cristal teremos que resolver a equação de Schrödinger, nesta equação o potencial que age sobre um elétron na posição \vec{r} é $U(\vec{r})$. Levaremos em consideração apenas o potencial devido aos íons da rede, pois o potencial devido a interação elétron-elétron não será considerado e com essas informações a equação de Schrödinger será:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi = E \psi. \quad (3.3)$$

Os íons dispostos regularmente no espaço implica em um potencial $U(\vec{r})$ periódico. Sabendo que \vec{R} é o vetor da rede e \vec{r} é a coordenada do elétrons, então:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}). \quad (3.4)$$

Percebendo que todos os pontos da rede de Bravais são equivalentes, podemos construir o pensamento que se $\psi_k(\vec{r})$ e $\psi_k(\vec{r} + \vec{R})$ são funções de onda em \vec{r} e $\vec{r} + \vec{R}$, respectivamente, teremos:

$$|\psi_k(\vec{r})|^2 = |\psi_k(\vec{r} + \vec{R})|^2. \quad (3.5)$$

Essas funções de onda diferem de um fator de fase global $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})$:

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}). \quad (3.6)$$

Esta equação é o teorema de Bloch. A função $\psi_k(\vec{r})$, que é chamada de função de Bloch [21], é escrita da seguinte forma:

$$\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (3.7)$$

Os elétrons em um potencial periódico se comportam como partículas “livres”, possuindo uma função de onda igual a uma onda plana, que é modulada em amplitude pela função $u_k(\vec{r})$. Esse é o teorema de Bloch [5].

3.2.1 O Modelo Tight-Binding

O modelo de “ligação forte” ou modelo tight-binding tem como característica fundamental estudar os elétrons que estão na camada mais interna de um átomo. Podemos citar como exemplo os elétrons da camada 3d do ferro.

Vamos considerar um autoestado $\phi(\vec{r})$ de um elétron em um átomo isolado com autoenergia E_0 , e supor que este autoestado seja normalizado e não degenerado. Para elétrons bem localizados, ou seja, fortemente ligados a superposição das funções de onda $\phi(\vec{r})$ é bem pequena. Essa superposição das funções de onda nos dá uma energia extra do elétron no cristal. Contudo, essa energia extra é menor que a energia do elétron em um átomo.

O Hamiltoniano do elétron pode ser escrito como a soma da parte atômica com a parte do cristal:

$$H = H_{at} + H_{cr}, \quad (3.8)$$

onde $H_{cr} \ll H_{at}$. Sabendo que $\phi(\vec{r})$ é um autoestado de H_{at} , então:

$$H_{at} \phi(\vec{r}) = E_0 \phi(\vec{r}). \quad (3.9)$$

A função de onda $\phi(\vec{r} - \vec{R})$ se refere ao elétron que está próximo a um ponto \vec{R} da rede. Como a equação de Schrödinger é linear e $\phi(\vec{r})$ é solução da equação, então a combinação linear de orbitais atômicos também será solução. Logo, “postula-se que a função de onda de um elétron em qualquer ponto da rede será uma combinação linear de orbitais atômicos” (OLI-

VEIRA, JESUS, 2011, p. 137) :

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} C_{k,\vec{R}} \phi(\vec{r} - \vec{R}). \quad (3.10)$$

Esta função de onda deve ser normalizada e obedecer o teorema de Bloch, para isso sujeitamos que:

$$C_{k,\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp i\vec{k} \cdot \vec{R}, \quad (3.11)$$

onde N é o número de sítios da rede. Assim a função de onda $\psi_k(\vec{r})$ será:

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \phi(\vec{r} - \vec{R}). \quad (3.12)$$

A equação acima representa a função de onda do elétron no cristal, no modelo tight-binding. Essa função satisfaz ao teorema de Bloch e é normalizada.

Como foi mencionado anteriormente que a energia extra do elétron em um cristal devido ao H_{cr} é pequena, então vamos calcular o quanto H_{cr} modifica E_0 , que é a energia do elétron em um átomo isolado. Para isto vamos calcular o valor esperado de H_{cr} utilizando as funções de onda $\psi_k(\vec{r})$ da Eq.(3.12):

$$\Delta E_k = \int \psi_k^*(\vec{r}) H_{cr} \psi_k(\vec{r}) d^3 r = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}'} \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')] \int \phi_{\vec{R}'}^* H_{cr} \phi_{\vec{R}} d^3 r, \quad (3.13)$$

onde $\phi_{\vec{R}} \equiv \phi_{\vec{r}-\vec{R}}$. Logo, a energia total do elétron no cristal será $E_k = E_0 + \Delta E_k$.

Da soma dupla iremos manter apenas os termos $\vec{R} = \vec{R}'$, que representam a perturbação da rede sobre o sítio \vec{R} , e aquele em que \vec{R} difere de \vec{R}' somente pela distância entre primeiros vizinhos. O último termo representa a superposição de funções de onda, apenas dos átomos vizinhos, como exige a aproximação de ligação forte. Logo, obteremos:

$$\Delta E_k = -\alpha - \gamma \sum_{\vec{R}} \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')]]. \quad (3.14)$$

Por definição:

$$\alpha \equiv - \int \int \phi_{\vec{R}}^* H_{cr} \phi_{\vec{R}} d^3 r, \quad (3.15)$$

$$\gamma \equiv - \int \int \phi_{\vec{R}}^* H_{cr} \phi_{\vec{R}} d^3 r. \quad (3.16)$$

Um vetor \vec{d} liga um átomo na posição \vec{R} aos primeiros vizinhos. Com isso ΔE_k pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\Delta E_k = -\alpha - \gamma \sum_{\vec{d}} \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{d})]. \quad (3.17)$$

Percebemos que α é o valor esperado de H_{cr} no sítio \vec{R} e que este termo também representa a correção perturbativa de primeira ordem na energia do elétron em relação ao átomo isolado. Enquanto γ , representa o grau de superposição das funções de onda, já que este termo envolve a integração de funções de onda de átomos vizinhos. Podemos esperar que γ descreva as propriedades de um elétron em um sólido. Sabendo que todos os sítios de uma rede de Bravais são equivalentes uns aos outros, concluímos que α e γ independem da posição de um sítio específico.

Para calcularmos os termos α e γ é necessário conhecer H_{cr} , mas no geral consideram estas quantidades como parâmetros a serem ajustados [5].

3.3 Interação de Troca, Modelo de Heisenberg e Ondas de Spin

Elétrons possuem spin e esses spins interagem através da rede cristalina. Essa interação é eletromagnética e para estudá-la devemos considerar uma interação coulombiana entre dois elétrons:

$$U(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (3.18)$$

onde $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ é a distância entre dois elétrons. Usaremos funções de onda espaciais, que são combinações lineares de funções de onda simétricas e antisimétricas, para calcular a energia média do sistema. Lembrando do fato que a interação independe do spin, precisaremos usar apenas a parte espacial da função de onda:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.19)$$

onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1)]$. Substituindo $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ na equação(3.19) obtemos:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int [\phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1)] \frac{1}{r_{12}} [\phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1)] dr_1 dr_2 \quad (3.20)$$

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \quad (3.21)$$

$$\langle U \rangle = \frac{2e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \pm \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \quad (3.22)$$

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \pm \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \quad (3.23)$$

$$\langle U \rangle = E \pm J_{troca}, \quad (3.24)$$

onde

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2, \quad (3.25)$$

e

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) dr_1 dr_2. \quad (3.26)$$

Sabemos que E é a energia média do sistema, mas como foi imposta a condição do princípio da exclusão de Pauli, então a energia média possuirá um termo J_{troca} , chamado energia de troca. O termo de troca é assim chamado porque os elétrons trocam de estado, como pode ser verificado

na Eq.(3.26).

A determinação se o sinal \pm na expressão $\langle U \rangle$ será positivo ou negativo irá depender se o estado de spin é singlete ou tripleto. Logo, a energia média depende do spin, apesar da interação entre dois elétrons não dependa. Agora fica fácil pensar que $\langle U \rangle$ passa a ser escrita em termos das variáveis de spin, com isso podemos escrever a energia média para visualizar, de forma simplificada, a sua dependência com o spin:

$$\langle U \rangle = E \pm 4J_{troca} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2.$$

Werner Heisenberg foi o primeiro a perceber, em 1928, a importância da energia de troca para explicar a ordem magnética nos materiais. Ele escreveu o Hamiltoniano de troca da seguinte forma:

$$H_{troca} = -2J_{troca} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2.$$

Este é o chamado Hamiltoniano de Heisenberg [5] o qual é chamado de modelo de Heisenberg, que foi definido por Dirac e Heisenberg com o objetivo de descrever um estado ferromagneticamente ordenado a altas temperaturas [9].

Os spins dos elétrons, em uma rede cristalina, interagem entre si e essa interação é descrita através do modelo de Heisenberg. Ao ocorrer a oscilação desse sistema de spins interagentes, essa oscilação irá se propagar como uma onda através da rede, e tal oscilação é definida como ondas de spins. O modelo de Heisenberg prevê a existência das ondas de spin [5]. Bloch foi um dos primeiros a afirmar que as ondas de spin eram como excitações elementares em materiais magnéticos ordenados [22], ele pensava nos spins sendo desviados das posições de equilíbrio, gerando a ideia de excitações, consideradas como perturbações do sistema a qual se propagavam pelo cristal com um comportamento ondulatório. Essas excitações em um cristal é similar aos modos vibracionais em um sólido, dessa forma as ondas de spin são os modos normais associados com os spins interagentes em um cristal da mesma forma que as oscilações dos átomos em torno da sua posição de equilíbrio são os modos normais de vibrações do sólido [23]. Em um sistema ferromagnético os spins estão acoplados via interação de troca, ao ocorrer a excitação do sistema os spins irão precessionar em torno da posição de equilíbrio. No caso de uma excitação de menor energia, os spins que precessionam em torno de \vec{H} continuarão paralelos uns aos outros, ou seja, com a mesma fase, como mostra a figura 3.3. A excitação de menor energia também é chamada de modo uniforme. Neste caso a interação entre os spins não causa variação na frequência de precessão que é $\omega_0 = \gamma H$. O sistema também possui modos coletivos, por causa da interação entre os spins, os modos coletivos são denominados de ondas

de spin, e neles a fase de precessão varia no espaço. O modo uniforme é, de certa forma, uma onda de spin com comprimento de onda infinito. O comprimento de onda e o ângulo entre os spins vizinhos estão relacionados de tal forma que, ao diminuir o comprimento de onda, o ângulo entre os spins vizinhos aumenta e como consequência ocorre o aumento a contribuição da energia de troca para a excitação.

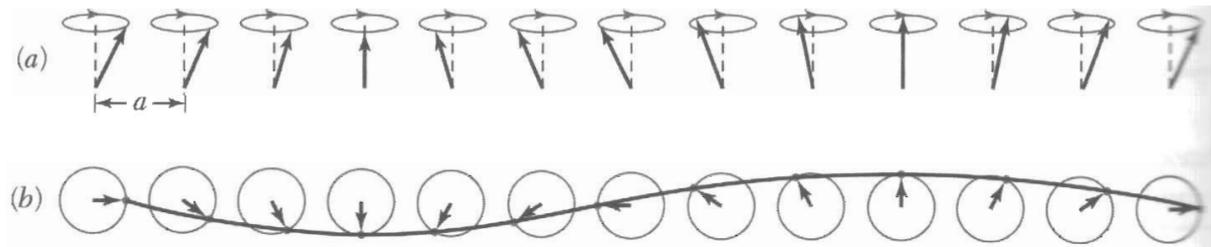


Figura 3.3: Uma onda de spin unidimensional. (a) Vista em perspectiva. (b) Vista de topo. Os desenhos correspondem a um ciclo completo de onda. Figura retirada de [8].

As ondas de spins ao serem quantizadas possuem o seu quantum denominado de magnon. Os magnons são excitados termicamente e obedecem à estatística de Bose-Einstein, apenas se a temperatura não estiver próxima à temperatura crítica onde o sistema passa para a fase ferromagnética. Começamos fazendo uma abordagem semi-clássica sobre ondas de spin, onde elas surgem ao ocorrer a precessão dos spins em torno da sua posição de equilíbrio, levando a uma excitação do sistema que pode conter uma excitação de menor energia, como já mencionado, denominado de modo uniforme. O spin, no tratamento semi-clássico, é tratado como um vetor não quantizado precessionante [24]. Mas existe um tratamento quântico para avaliar as características das ondas de spin, lançando mão do uso das transformações de Holstein-Primakoff, um método de operadores fundamentado em segunda quantização [25], nesta abordagem as energias do sistema, que dependem dos operadores de spin, são expressas em termos dos operadores de criação e destruição de magnons [24].

3.4 Ondas de spin em sistemas ferromagnéticos

Consideramos um sistema ferromagnético onde os spins estão arrançados em uma rede cristalina, onde o campo magnético h_0 e a magnetização M assumem uma direção z , paralela a superfície do filme que está em um plano $x-z$, com o eixo y perpendicular a essa superfície. Nessa rede cristalina, os spins, que ocupam os sítios da rede, interagem com os primeiros vizinhos via interação de troca e interagem com um campo magnético externo h_0 . O Hamiltoniano que descreve essa interação possui a seguinte forma:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B h_0 \sum_i S_i^z. \quad (3.27)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano se refere a interação de troca e o segundo termo se refere ao efeito Zeeman. Agora iremos escrever a Eq.(3.27) em termos das componentes do spin:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^z S_j^z) - g\mu_B h_0 \sum_i S_i^z. \quad (3.28)$$

Nesse ponto, vamos transformar o problema de operadores de spin para um problema mais geral como um problema de muitos corpos que interagem. Para isso vamos usar as transformações de Holstein-Primakoff :

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} a_i, \quad (3.29)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.30)$$

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad (3.31)$$

onde os operadores de spin S são substituídos por operadores de criação e destruição bosônicos. Reescrevendo S_i^x , S_j^x , S_i^y , S_j^y o Hamiltoniano em termos dos operadores de criação e destruição pode ser escrito como:

$$H = -S \sum_{i,j} J_{ij} (a_i^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i) + g\mu_B h_0 \sum_i a_i^\dagger a_i, \quad (3.32)$$

$$H = S \sum_{i,j} [(J_{ij} + \bar{h}_0) \delta_{ij} - J_{ij}] a_i^\dagger a_j. \quad (3.33)$$

Aqui, consideramos somente os termos biliares com operados a e a^\dagger . A equação acima é a base para a descrição do sistema ferromagnético descrito acima. As propriedades geométricas da rede, e as interações de maior alcance que os primeiros vizinhos, podem ser construídas a partir do arcabouço montado aqui. No capítulo a seguir vamos exemplificar isso [26].

4 Ondas de Spin em Redes Decoradas

Neste capítulo vamos estudar o espectro de ondas de spin em diversas redes bidimensionais. Primeiramente vamos analisar o caso de redes cristalinas como as redes quadradas simples e depois disso vamos decorar a rede quadrada. O primeiro caso a ser estudado será o caso de duas redes quadradas interpenetradas que também pode ser visto como uma quadrada com corpo centrado deslocado. Depois vamos estudar uma rede quadrada imersa em uma rede favo de mel. Desenvolvemos um Hamiltoniano geral para qualquer rede cuja a decoração seja a interpenetração de duas redes, assim poderemos encontrar as energias de qualquer sistema de redes interpenetradas. É importante mencionar que modelos com redes decoradas são úteis para a compreensão de assimetrias, por exemplo, do tipo líquido-vapor em fluidos puros em termos do modelo de Ising [27].

4.1 Rede quadrada simples

Vamos usar o Hamiltoniano em termos dos operadores de criação e destruição desenvolvido no capítulo anterior

$$H = -S \sum_{i,j} J_{ij} \left(a_i^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \right) + g\mu_B S h_0 \sum_i a_i^\dagger a_i, \quad (4.1)$$

onde S representa o spin do sistema considerado, J_{ij} é a interação de troca entre os sítios da rede e h_0 se refere a um campo externo aplicado. Em duas dimensões esse campo é necessário para garantir a estabilidade da fase ferromagnética. É importante mencionar aqui que estudaremos o acoplamento ferromagnético, ou seja, o estado fundamental se adequando a todos os spins que estão orientados na mesma direção. Dessa forma $J_{ij} > 0$.

O Hamiltoniano acima pode ser reescrito numa forma quadrática (bi-linear) em termos dos operadores de criação e destruição como mostra a expressão abaixo

$$H = S \sum_{i,j} [(J_{ij} + \bar{h}_0) \delta_{ij} - J_{ij}] a_i^\dagger a_j, \quad (4.2)$$

$$H = \sum_{i,j} A_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad (4.3)$$

onde $A_{ij} = S[(J_{ij} + \bar{h}_0) \delta_{ij} - J_{ij}]$, e $\bar{h}_0 = g \mu_B S h_0$. A equação acima é mais simplificada mas contudo ainda não está posta numa forma diagonal para que possamos determinar as energias do sistema. Para isso podemos transformar os operadores de campo a_i e a_i^\dagger em operadores de modos coletivos normais a_q e a_q^\dagger . Em geral essa transformação é dada da seguinte forma

$$a_i = \sum_q \psi_q^i a_q, \quad (4.4a)$$

$$a_i^\dagger = \sum_q \psi_q^{i*} a_q^\dagger. \quad (4.4b)$$

Substituindo essas transformações na Eq.4.3 teremos

$$H = \sum_{i,j} \sum_{q,q'} A_{ij} \psi_q^{i*} \psi_q^j a_q^\dagger a_{q'}, \quad (4.5)$$

que leva o Hamiltoniano a uma forma diagonal

$$H = \sum_q E_q a_q^\dagger a_q, \quad (4.6)$$

se as autofunções satisfizerem a seguinte equação de autovalores

$$E_q \psi_q^i = \sum_j A_{ij} \psi_q^j. \quad (4.7)$$

É importante lembrar que os operadores de modos coletivos devem obedecer as usuais relações bosônicas de comutação

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'} \quad (4.8)$$

$$[a_q, a_{q'}] = [a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] = 0. \quad (4.9)$$

Devido a condição de que o Hamiltoniano seja diagonal, podemos mostrar que as autofunções formam um conjunto completo e satisfaz as condições de ortonormalidade abaixo:

$$\sum_i \psi_q^i \psi_{q'}^{i*} = \delta_{qq'} \quad (4.10)$$

$$\sum_q \psi_q^i \psi_q^{j*} = \delta_{ij}. \quad (4.11)$$

A transformação geral Eq.4.4a deve ser utilizada para diagonalizar o Hamiltoniano sempre que h_0 e J_{ij} variarem de ponto a ponto. No caso particular onde existe simetria translacional $\psi_q^i = \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_i)$ é solução da Eq. 4.7. Assim as transformações Eq.4.4a se tornam as usuais transformadas de Fourier

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^\dagger e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \quad (4.12a)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}. \quad (4.12b)$$

E as relações de completeza e ortogonalidade das autofunções nos fornecem

$$\sum_i e^{i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot \vec{r}_i} = N \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \quad (4.13)$$

$$\sum_q e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = N \delta_{ij}. \quad (4.14)$$

Com essas definições o Hamiltoniano Eq.4.3 fica

$$H = \sum_q A_q a_q^\dagger a_q, \quad (4.15)$$

onde $A_q = S [\bar{h}_0 + J(0) - J(\vec{q})]$ é a transformada de Fourier dos coeficientes A_{ij} , sendo que $J(\vec{q}) = \sum_j J_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$. Podemos ver que $E(q) = A_q$ são auto-energias desse Hamiltoniano e são chamadas de magnons, ou seja, as auto-energias são quantizadas.

O fator $J(\vec{q})$ é fundamental pois é ele quem caracteriza a rede que iremos trabalhar bem como o número de vizinhos. Neste trabalho, por uma questão de generalidade vamos considerar até os segundos vizinhos de cada sítio. Dessa forma, podemos reescrever $J(\vec{q}) = z_1 J_1 \gamma_1(q) + z_2 J_2 \gamma_2(q)$, onde

$$\gamma_i(q) = \frac{1}{z_i} \sum_{\delta_i} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\delta}_i}, \quad (4.16)$$

aqui $i = 1, 2$.

Para o caso de uma rede quadrada simples, $z_1 = z_2 = 4$, e

$$\gamma_1(q) = \frac{1}{2} [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)] \quad (4.17)$$

$$\gamma_2(q) = \cos(q_x a) \cos(q_y a). \quad (4.18)$$

E a energia para as ondas de spin se propagando nessa rede fica

$$E(q) = S(\bar{h}_0 + 4J_1 + 4J_2) - 2S [J_1 (\cos q_x a + \cos q_y a) - 2J_2 \cos q_x a \cos q_y a]. \quad (4.19)$$

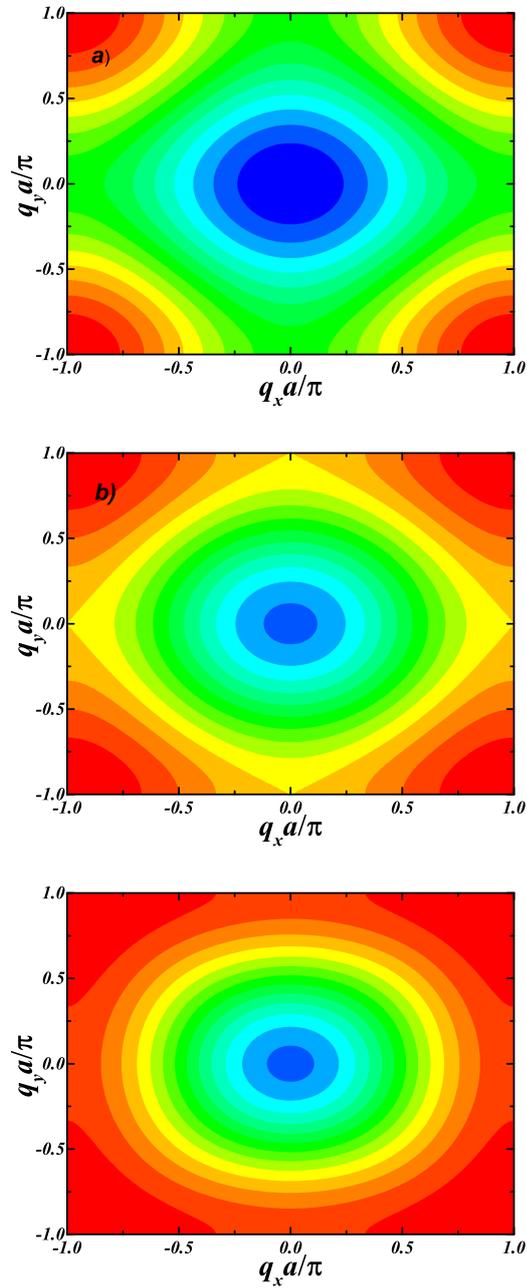


Figura 4.1: Curva de contorno para as ondas de spin. As energias aumentam do azul para o vermelho correspondendo a $E/J_1 = 0$ até $E/J_1 = 9$. Em todas as figuras usamos $J_1 = 1$, $h_0 = 1$ e: a) $J_2 = 0$, b) $J_2 = 0,2$, e c) $J_2 = 0,4$

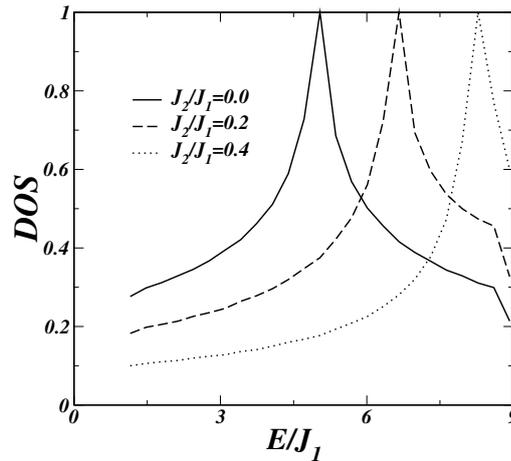


Figura 4.2: A densidade de estados para $J_1 = 1, h_0 = 1$ e três diferentes valores de J_2 . $J_2 = 0$ linha sólida, $J_2 = 0.2$ linha tracejada, e $J_2 = 0.4$ a linha pontilhada

A Figura 4.1 mostra a curva de contorno para as ondas de em uma rede quadrada infinita para diferentes valores da interação de troca J_2 . A curva de contorno mostra a energia crescendo do azul para o vermelho. É interessante notar que a medida que J_2 aumenta o gráfico de contorno muda significativamente. Esse resultado é melhor observado quando mostramos na Fig. 4.2 a densidade de estados para os mesmo valores de J_2 da Fig.4.1. O aumento de J_2 não somente desloca o espectro de energia para energias mais altas como também muda significativamente a distribuição das energias. Devemos salientar aqui que em geral a interação de troca de segundos vizinhos deve ser bem menor que a de primeiros vizinhos. Fizemos aqui uma extrapolação nesses valores para melhor salientar os efeitos de J_2 no espectro.

4.2 Rede Quadrada Simples Finita

Um caso de grande importância que devemos estudar é o caso de uma fita magnética. Esse sistema pode ser visto como o truncamento em uma direção da rede infinita discutida anteriormente. Aqui vamos escolher truncar a rede quadrada na direção y . Isso implica que mantemos a simetria translacional na direção x e temos uma limitação do sistema em y . Assim nessa direção temos linhas de átomos que agora serão numeradas. Dessa forma a transformada Fourier dos operadores Eq.4.12a deve ser reescrita para incorporar agora um índice referente a linha atômica n .

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qn} a_{qn}^\dagger e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \quad (4.20a)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qn} a_{qn} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}. \quad (4.20b)$$

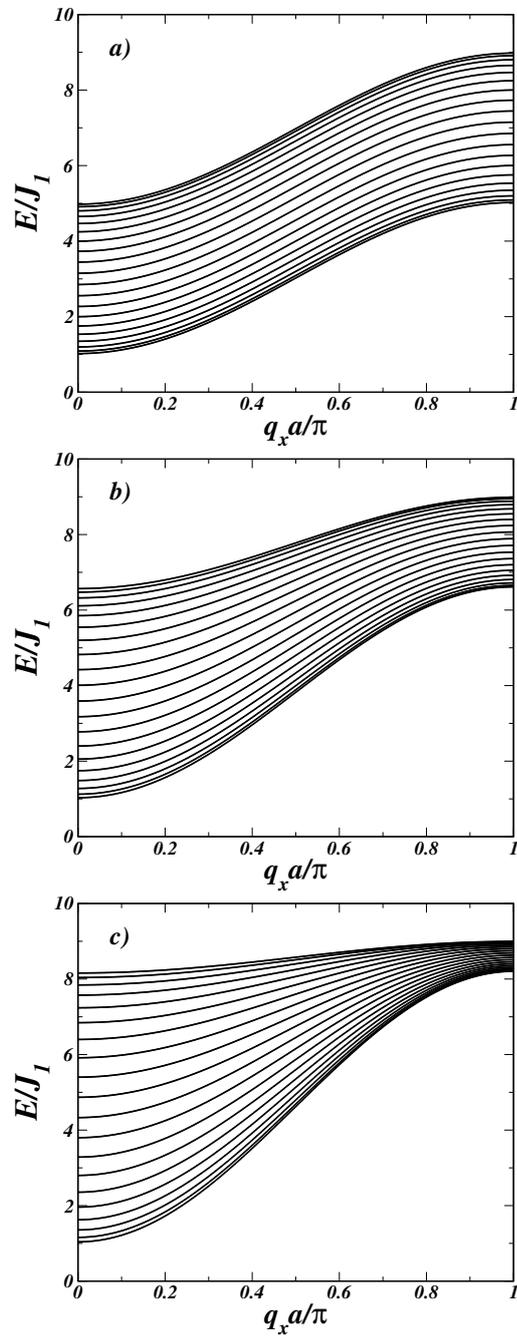


Figura 4.3: Relação de dispersão de ondas de spin para uma fita quadrada com 20 camadas atômicas ($N=20$). Em todas as figuras usamos $J_1 = 1$, $\bar{h}_0 = 1$ e: a) $J_2 = 0$, b) $J_2 = 0,2$, e c) $J_2 = 0,4$

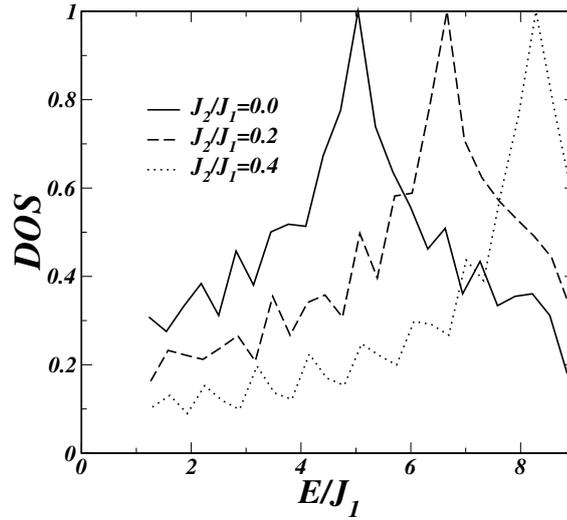


Figura 4.4: A densidade de estados, em uma rede finita, para $J_1 = 1, \bar{h}_0 = 1$ e três diferentes valores de J_2 . $J_2 = 0$ linha sólida, $J_2 = 0.2$ linha tracejada, e $J_2 = 0.4$ a linha pontilhada

O Hamiltoniano agora depende do vetor de onda \vec{q} e da posição do sítio na fita magnética dada por n que vai de $1, 2, \dots, N$, onde N é o número total de linhas atômicas na fita que define a espessura da mesma.

$$H = \sum_{q,n,n'} A_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger a_{qn'}. \quad (4.21)$$

Os coeficientes $A_{nn'}(q)$ agora são elementos de uma matriz $\tilde{A}(q)$ dados por

$$A_{nn'}(q) = S[(4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_x a + \bar{h}_0) \delta_{n,n'} - (J_1 + 2J_2 \cos(q_x a))(\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1})]. \quad (4.22)$$

É importante notar que o Hamiltoniano não está diagonalizado. A transformação de campo não é suficiente para tal. O que temos agora é uma matriz tridiagonal. Devemos então usar a equação do movimento dos operadores para tentar linearizar o conjunto de N equações acima. Assim, usando $i\hbar dO/dt = [O, H]$ obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_{qn}}{dt} &= \sum_{q',n',n''} A_{nn'}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{q'n''}], \\ i\hbar \frac{da_{qn}}{dt} &= \sum_{n'} A_{nn'}(q) a_{qn'}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

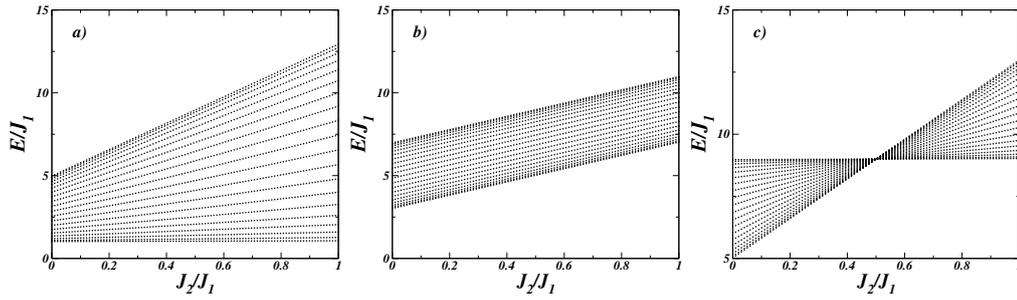


Figura 4.5: Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos J_2 para uma fita quadrada com 20 camadas atômicas ($N=20$). Em todas as figuras usamos $J_1 = 1$, $\hbar_0 = 1$ e: a) $q_x = 0$, b) $q_x = 0,5\pi$, e c) $q_x = \pi$

A solução da Eq.4.23 pode ser encontrada se tomarmos $a_{qn} = a_{qn} e^{-iE(q)t/\hbar}$ que nos dá a forma matricial

$$E(q) \begin{pmatrix} a_{q1} \\ a_{q2} \\ \vdots \\ a_{qn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & -v & 0 & \cdots & \cdots \\ -v & u & -v & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & 0 & -v & u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{q1} \\ a_{q2} \\ \vdots \\ a_{qn} \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

onde $u = 4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_x a + \hbar_0$, and $v = J_1 + 2J_2 \cos(q_x a)$. Nosso trabalho agora é encontrar os autovalores da matriz acima.

A Figura 4.3 mostra a relação de dispersão para três diferentes valores da interação de troca entre segundos vizinhos em uma fita quadrada com $N = 20$ linhas atômicas. O maior efeito dos segundos vizinhos é visto na região do vetor de onda mais próximo da borda da zona de Brillouin. Isso também se verifica quando analisamos a densidade de estados. O gráfico mostrado na Fig. 4.4 é bem semelhante ao caso infinito mas possui mais estrutura porque o espectro é descontínuo no caso finito.

Quando observamos a dispersão da energia em função do parâmetro J_2 , a Figura 4.5 mostra como os modos são afetados pela interação com os segundos vizinhos. Da figura podemos ver que para pequenos vetores de onda os modos de mais baixa energia quase não são afetados por J_2 , enquanto que os outros modos crescem linearmente mas não com o mesmo coeficiente linear. Para valores intermediários do vetor de onda todos os modos crescem linearmente com o mesmo coeficiente linear. No limite da zona de Brillouin quem não variam agora são os modos mais energéticos.

4.3 Redes decoradas

Aqui vamos desenvolver um cálculo genérico para qualquer rede cuja decoração seja a interpenetração de duas redes que vamos chamar de a e b . O Hamiltoniano geral para o sistema é dado por $H = H^{(a)} + H^{(b)} + H^I$, onde temos a soma do Hamiltoniano da rede a , b , e da interação entre elas. Cada termo será escrito como

$$H^I = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(J_{i,j}^{(ab)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + J_{i,j}^{(ba)} \vec{S}_j^a \cdot \vec{S}_i^b \right), \quad (4.25)$$

$$H^{(a)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(aa)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a - g\mu_B h_0 \sum_i S_i^{za}, \quad (4.26)$$

$$H^{(b)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(bb)} \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b - g\mu_B h_0 \sum_i S_i^{zb}. \quad (4.27)$$

Fazendo o produto escalar $\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b = S_i^{xa} S_j^{xb} + S_i^{ya} S_j^{yb} + S_i^{za} S_j^{zb}$ e lembrando que

$$S_i^x = \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i + a_i^+), \quad (4.28)$$

$$S_i^y = i \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i^+ - a_i), \quad (4.29)$$

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i. \quad (4.30)$$

Teremos

$$S_i^{xa} S_j^{xb} = \frac{S}{2} (a_i + a_i^+) (b_j + b_j^+) = \frac{S}{2} (a_i b_j + a_i b_j^+ + a_i^+ b_j + a_i^+ b_j^+), \quad (4.31)$$

$$S_i^{ya} S_j^{yb} = -\frac{S}{2} (a_i^+ - a_i) (b_j^+ - b_j) = \frac{S}{2} (a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i b_j - a_i^+ b_j^+), \quad (4.32)$$

$$S_i^{za} S_j^{zb} = (S - a_i^+ a_i) (S - b_j^+ b_j) = -S (a_i^+ a_i + b_j^+ b_j), \quad (4.33)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b = S (a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i^+ a_i - b_j^+ b_j), \quad (4.34)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a = 2S (a_i^+ a_j - a_i^+ a_i), \quad (4.35)$$

$$\vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b = 2S (b_i^+ b_j - b_i^+ b_i). \quad (4.36)$$

Usando esses resultados podemos reescrever o Hamiltoniano total como

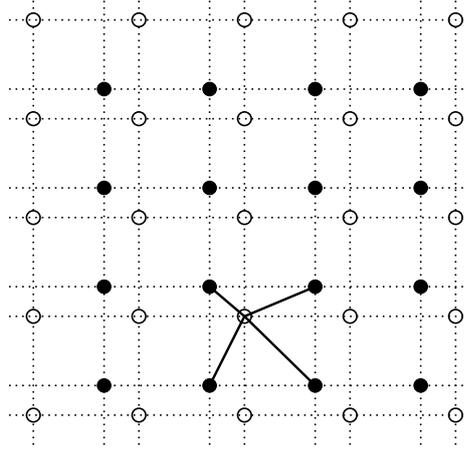


Figura 4.6: Duas redes quadradas interpenetradas

$$\begin{aligned}
 H = & S \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} \right) + J_{ij}^{(aa)} + \bar{h}_0 \right] \delta_{ij} - J_{ij}^{(aa)} \right\} a_i^\dagger a_j + \\
 & + S \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} \right) + J_{ij}^{(bb)} + \bar{h}_0 \right] \delta_{ij} - J_{ij}^{(bb)} \right\} b_i^\dagger b_j - \\
 & - S \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} \right) \left(a_i^\dagger b_j + a_i b_j^\dagger \right). \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

Essa expressão é geral. Vamos estudar agora dois casos: a) duas redes quadradas que se interpenetram e b) uma rede favo de mel com uma rede quadrada superposta. Essa rede é equivalente a uma rede hexagonal diluída.

4.4 Duas redes quadradas interpenetradas

Como já vimos antes vamos usar a transformada de Fourier dos operadores de criação e destruição para obter

$$H = \sum_q \left[A(q) a_q^\dagger a_q + B(q) b_q^\dagger b_q + C(q) a_q^\dagger b_q + D(q) a_q b_q^\dagger \right], \quad (4.38)$$

onde

$$\begin{aligned} A(q) &= S \left[\frac{1}{2} \left(J^{(ab)}(0) + J^{(ba)}(0) \right) + J^{(aa)}(0) + \bar{h}_0 - J^{(aa)}(q) \right], \\ B(q) &= S \left[\frac{1}{2} \left(J^{(ab)}(0) + J^{(ba)}(0) \right) + J^{(bb)}(0) + \bar{h}_0 - J^{(bb)}(q) \right], \\ C(q) &= -\frac{S}{2} \left[J^{(ab)}(q) + J^{(ba)}(q) \right], \\ D(q) &= C^*(q). \end{aligned}$$

Nesta rede os sítios da mesma rede possuem 4 vizinhos com distancia d enquanto que entres as redes a e b cada sítio também possui 4 vizinhos com distâncias (ver Fig. 4.6):

$$d_1 = d \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad (4.39)$$

$$d_2 = d \sqrt{\alpha^2 + (1 - \beta)^2}, \quad (4.40)$$

$$d_3 = d \sqrt{(1 - \alpha)^2 + \beta^2}, \quad (4.41)$$

$$d_4 = d \sqrt{(1 - \alpha)^2 + (1 - \beta)^2}. \quad (4.42)$$

Aqui α e β são os parâmetros que localizam uma rede com relação a outra, e $0 \leq \alpha \leq 1$, $0 \leq \beta \leq 1$, com o vínculo $0 < (\alpha + \beta) < 2$. Isso garante que uma rede não será totalmente superposta a outra, como mostra a Figura 4.6

Os fatores de estrutura são

$$J^{(aa)}(q) = J \left(e^{iq_y d} + e^{-iq_y d} + e^{iq_x d} + e^{-iq_x d} \right), \quad (4.43)$$

$$J^{(bb)}(q) = J \left(e^{iq_y d} + e^{-iq_y d} + e^{iq_x d} + e^{-iq_x d} \right), \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} J^{(ab)}(q) &= J_1 \left(e^{-iq_x \alpha d} + e^{-iq_y \beta d} \right) + J_2 \left(e^{-iq_x \alpha d} + e^{iq_y d(1-\beta)} \right) + \\ &J_3 \left(e^{iq_x d(1-\alpha)} + e^{-iq_y \beta d} \right) + J_4 \left(e^{iq_x d(1-\alpha)} + e^{iq_y d(1-\beta)} \right), \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} J^{(ba)}(q) &= J_1 \left(e^{iq_x \alpha d} + e^{iq_y \beta d} \right) + J_2 \left(e^{iq_x \alpha d} + e^{-iq_y d(1-\beta)} \right) + \\ &J_3 \left(e^{-iq_x d(1-\alpha)} + e^{iq_y \beta d} \right) + J_4 \left(e^{-iq_x d(1-\alpha)} + e^{-iq_y d(1-\beta)} \right), \end{aligned} \quad (4.46)$$

e vamos considerar aqui que as interação dependem das distâncias da seguinte forma $J_i = d_i J / d$. Assim, podemos reescrever as equações acima como:

$$J^{(aa)}(q) = J^{(bb)}(q) = 2J [\cos(q_y d) + \cos(q_x d)] = 4J \gamma_1(q), \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} J^{(ab)}(q) = J^{(ba)*}(q) &= J_1 \left(e^{-iq_x \alpha d} + e^{-iq_y \beta d} \right) + J_2 \left(e^{-iq_x \alpha d} + e^{iq_y d(1-\beta)} \right) + \\ &J_3 \left(e^{iq_x d(1-\alpha)} + e^{-iq_y \beta d} \right) + J_4 \left(e^{iq_x d(1-\alpha)} + e^{iq_y d(1-\beta)} \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

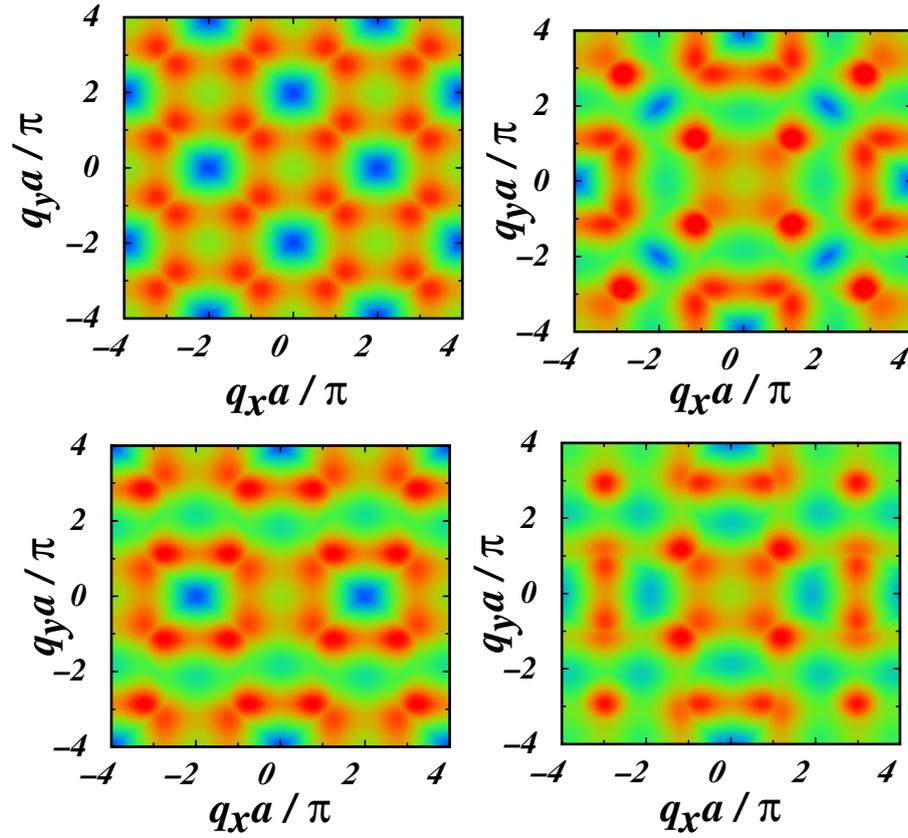


Figura 4.7: Curva de contorno para as ondas de spin para os parâmetros: painel superior a esquerda $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.5$, painel superior a direita $\alpha = 0.25$ e $\beta = 0.25$, painel inferior a esquerda $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.25$, painel inferior a direita $\alpha = 0.33$ e $\beta = 0.7$. Usamos $J_1 = 1$, $h_0 = 1$

Com estas definições podemos ver que $A(q) = B(q)$.

Mais uma vez nosso objetivo é diagonalizar o Hamiltoniano da rede decorada definido pela Eq. 4.38. Para isso vamos definir as seguintes matrizes:

$$\tilde{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

com

$$\tilde{\mathcal{A}}^\dagger = \begin{pmatrix} a_q^\dagger & b_q^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

Agora podemos então escrever o Hamiltoniano da seguinte forma

$$H = \sum_q \tilde{\mathcal{A}}^\dagger \tilde{\mathcal{X}} \tilde{\mathcal{A}}, \quad (4.51)$$

onde

$$\tilde{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix} A(q) & C(q) \\ D(q) & A(q) \end{pmatrix}, \quad (4.52)$$

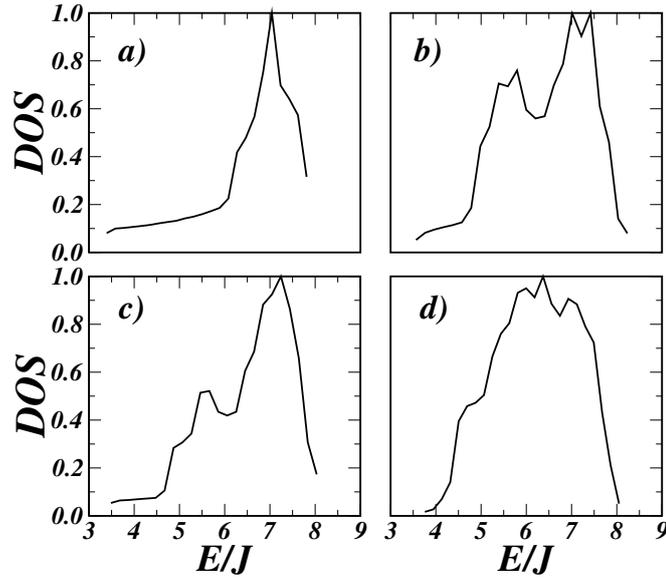


Figura 4.8: A densidade de estados para as redes interpenetradas: a) $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.5$, b) $\alpha = 0.25$ e $\beta = 0.25$, c) $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.25$, e d) $\alpha = 0.33$ e $\beta = 0.7$

onde as energias do sistema são dadas pelos autovalores da equação acima

$$E(q) = A(q) \pm \sqrt{|C(q)|^2}, \quad (4.53)$$

onde podemos escrever

$$A(q) = S \left[\frac{2J}{d} (d_1 + d_2 + d_3 + d_4) + \bar{h}_0 + 4J(1 - \gamma_1(q)) \right],$$

$$C(q) = -\frac{2SJ}{d} [d_1 \gamma_1(q, \alpha, \beta) + d_2 \gamma_1(q, \alpha, 1 - \beta) + d_3 \gamma_1(q, 1 - \alpha, \beta) + d_4 \gamma_1(q, 1 - \alpha, 1 - \beta)],$$

onde usamos a definição de $\gamma_1(q)$ com os índices α e β para indicar $\gamma_1(q, \alpha, \beta) = [\cos(q_x \alpha d) + \cos(q_y \beta d)]/2$.

Primeiramente vamos ver o espectro de energia para duas redes superpostas quando $\alpha = \beta = 0.5$. A Figura 4.7 mostra um espectro com energia $3 < E/J < 8$ e uma periodicidade de 2π . É interessante notar como o espectro muda quando deslocamos e usamos $\alpha = \beta = 0.25$, a Fig. 4.7 mostra um comportamento muito distinto onde as energias mais baixas estão totalmente deslocadas quando comparadas com o caso anterior. O painel inferior a esquerda mostra o espectro para um caso onde $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.25$, e finalmente mostramos o resultado para um valor incomensurável da razão α/β . Todas as figuras mostram espectros com muita estrutura e diversidade de cores. Isso é confirmado quando mostramos a densidade de estados na Fig. 4.8. Nela podemos ver que a medida que deslocamos a rede mais energias contribuem igualmente

no espectro.

4.4.1 Rede Favo de Mel

Uma rede favo de mel por si só já possui dois átomos na sua célula unitária. Dessa forma o Hamiltoniano descrito na seção anterior se aplica perfeitamente.

$$H = \sum_q \left[A(q) a_q^\dagger a_q + B(q) b_q^\dagger b_q + C(q) a_q^\dagger b_q + D(q) a_q b_q^\dagger \right], \quad (4.54)$$

onde

$$\begin{aligned} A(q) &= S \left[\frac{1}{2} \left(J^{(ab)}(0) + J^{(ba)}(0) \right) + J^{(aa)}(0) + \bar{h}_0 - J^{(aa)}(q) \right], \\ B(q) &= S \left[\frac{1}{2} \left(J^{(ab)}(0) + J^{(ba)}(0) \right) + J^{(bb)}(0) + \bar{h}_0 - J^{(bb)}(q) \right], \\ C(q) &= -\frac{S}{2} \left[J^{(ab)}(q) + J^{(ba)}(q) \right], \\ D(q) &= C^*(q). \end{aligned}$$

O que devemos mudar aqui para descrever a rede favo de mel são os fatores de estrutura. Na rede favo de mel temos 3 primeiros vizinhos com distância a e 6 segundos vizinhos com distância $\sqrt{3}a$. Para os primeiros vizinhos o fator de estrutura é

$$J^{(ab)}(q) = J_1 \left(e^{iq_x a} + e^{i(-q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(-q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} \right) \quad (4.55)$$

$$J^{(ab)}(q) = J_1 \left(e^{iq_x a} + 2e^{-iq_x a/2} \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right) \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} J^{(aa)}(q) &= J_2 \left(e^{i(3q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(3q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} + \right. \\ &\quad \left. e^{i(-3q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(-3q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i\sqrt{3}q_y a} + e^{-i\sqrt{3}q_y a} \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$J^{(aa)}(q) = J_2 \left(4 \cos(3q_x a/2) \cos(\sqrt{3}q_y a/2) + 2 \cos(\sqrt{3}q_y a) \right) \quad (4.58)$$

$$J^{(aa)}(q) = J^{(bb)} = J_2(q) \quad (4.59)$$

$$J^{(ab)}(q) = J^{(ba)*} = J_1(q). \quad (4.60)$$

Com isso podemos ver que $A(q) = B(q)$ e que $C(q) = D(q)$, que pode ser escritos como

$$\begin{aligned} A(q) &= S \left[3J_1 + 6J_2 + \bar{h}_0 - J_2(q) \right], \\ C(q) &= -S \Re J_1(q), \end{aligned}$$

onde a parte real $\Re J_1(q) = J_1 \left[\cos(q_x a) + 2 \cos(q_x a/2) \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right]$. Da mesma forma que no caso das redes quadradas interpenetradas teremos a seguinte relação de dispersão $E(q) =$

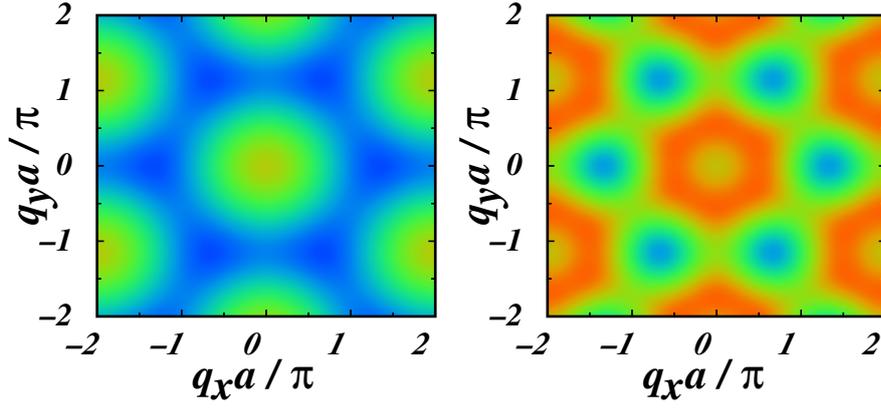


Figura 4.9: Curva de contorno para as ondas de spin para a rede favo de mel sem segundos vizinhos no painel a esquerda e com segundos vizinhos usando $J_2 = 0.4$ no painel a direita.

Usamos $J_1 = 1$, $h_0 = 1$

$A(q) \pm \sqrt{C(q)}$. Para ilustrar vamos mostrar o contorno das curvas de dispersão para a rede favo de mel na Figura 4.9. Nela podemos ver que as energias aumentam quando aumentamos o parâmetro de interação de segundos vizinhos.

4.5 Rede Favo de Mel Decorada

Vamos decorar a rede favo de mel com um átomo do tipo c entre os átomos do tipo a e b em cada linha atômica como mostra a figura. Nesse caso agora temos três tipos de átomos e conseqüentemente devemos alterar o Hamiltoniano da seção anterior para introduzir tal decoração. Desprezando os segundos vizinhos na rede favo de mel o Hamiltoniano se torna $H = H^I + H^{I_1} + H^{I_2} + H_{Zeeman}$ onde

$$H^I = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(J_{i,j}^{(ab)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + J_{i,j}^{(ba)} \vec{S}_j^a \cdot \vec{S}_i^b \right), \quad (4.61)$$

$$H^{I_1} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(J_{i,j}^{(ac)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^c + J_{i,j}^{(ca)} \vec{S}_j^a \cdot \vec{S}_i^c \right), \quad (4.62)$$

$$H^{I_2} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(J_{i,j}^{(bc)} \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^c + J_{i,j}^{(cb)} \vec{S}_j^b \cdot \vec{S}_i^c \right), \quad (4.63)$$

$$H_{Zeeman} = -g\mu_B h_0 \sum_i \left(S_i^{za} + S_i^{zb} + S_i^{zc} \right). \quad (4.64)$$

Depois da transformação dos operadores de spin para os operadores bosônicos como nos casos anteriores teremos

$$\begin{aligned}
H = & S \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} + J_{ij}^{(ac)} + J_{ij}^{(ca)} \right) + \bar{h}_0 \right] \right\} a_i^\dagger a_i + \\
& + S \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} + J_{ij}^{(bc)} + J_{ij}^{(cb)} \right) + \bar{h}_0 \right] \right\} b_i^\dagger b_i + \\
& + S \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ac)} + J_{ij}^{(ca)} + J_{ij}^{(bc)} + J_{ij}^{(cb)} \right) + \bar{h}_0 \right] \right\} c_i^\dagger c_i - \\
& - S \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ab)} + J_{ij}^{(ba)} \right) \left(a_i^\dagger b_j + a_j b_i^\dagger \right) - \\
& - S \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(ac)} + J_{ij}^{(ca)} \right) \left(a_i^\dagger c_j + a_j c_i^\dagger \right) - \\
& - S \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(J_{ij}^{(bc)} + J_{ij}^{(cb)} \right) \left(c_i^\dagger b_j + c_j b_i^\dagger \right)
\end{aligned} \tag{4.65}$$

e depois da transformada de Fourier teremos

$$\begin{aligned}
H = & \sum_q \left[A(q) a_q^\dagger a_q + B(q) b_q^\dagger b_q + C(q) c_q^\dagger c_q + \right. \\
& D(q) a_q^\dagger b_q + F(q) a_q b_q^\dagger + G(q) b_q^\dagger c_q + \\
& \left. + K(q) b_q c_q^\dagger + L(q) a_q^\dagger c_q + M(q) a_q c_q^\dagger \right].
\end{aligned} \tag{4.66}$$

Os fatores de estrutura da rede favo de mel já foram mostrados na seção anterior. E $J^{(ac)} = e^{iq_x a/2}$ e $J^{(bc)} = e^{-iq_x a/2}$.

$$\begin{aligned}
A(q) = & B(q) = S \left(3J_1 + J_c + \bar{h}_0 \right), \\
C(q) = & S \left(2J_c + \bar{h}_0 \right), \\
D(q) = & F(q) = -SJ_1 \left[\cos(q_x a) + 2 \cos(q_x a/2) \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right], \\
G(q) = & K(q) = L(q) = M(q) = -SJ_c \cos(q_x a/2),
\end{aligned}$$

onde J_c é a interação de troca com o sítio c . Mais uma vez nosso objetivo é diagonalizar o Hamiltoniano da rede decorada definido pela Eq. 4.66. Para isso vamos definir as seguintes matrizes:

$$\tilde{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \\ c_q \end{pmatrix}, \tag{4.67}$$

com

$$\tilde{\mathcal{A}}^\dagger = \begin{pmatrix} a_q^\dagger & b_q^\dagger & c_q^\dagger \end{pmatrix}. \tag{4.68}$$

Agora podemos então escrever o Hamiltoniano da seguinte forma

$$H = \sum_q \tilde{\mathcal{A}}^\dagger \tilde{\mathcal{X}} \tilde{\mathcal{A}}, \quad (4.69)$$

onde

$$\tilde{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix} A(q) & D(q) & G(q) \\ D(q) & A(q) & G(q) \\ G(q) & G(q) & C(q) \end{pmatrix}, \quad (4.70)$$

onde as energias do sistema são dadas pelos autovalores da equação acima. As curvas de dispersão são mostradas na Figura 4.10 abaixo. Na figura fixamos $q_y = 0$. Podemos ver que a medida que “ligamos” a interação da rede favo de mel com a rede quadrada interpenetrada, observamos uma mudança significativa no espectro em torno do ponto $q_x = 0$. Podemos notar que o espectro relativo a rede favo de mel perde seu caráter linear em torno de $q_x = 0$ e o modo que aparece sem dispersão ganha um contorno. Além disso existe a quebra da degenerescência das energias nesse ponto. Podemos concluir que essa interação das redes muda o espectro significativamente, não somente pelo surgimento de um modo novo, mas pela sua característica.

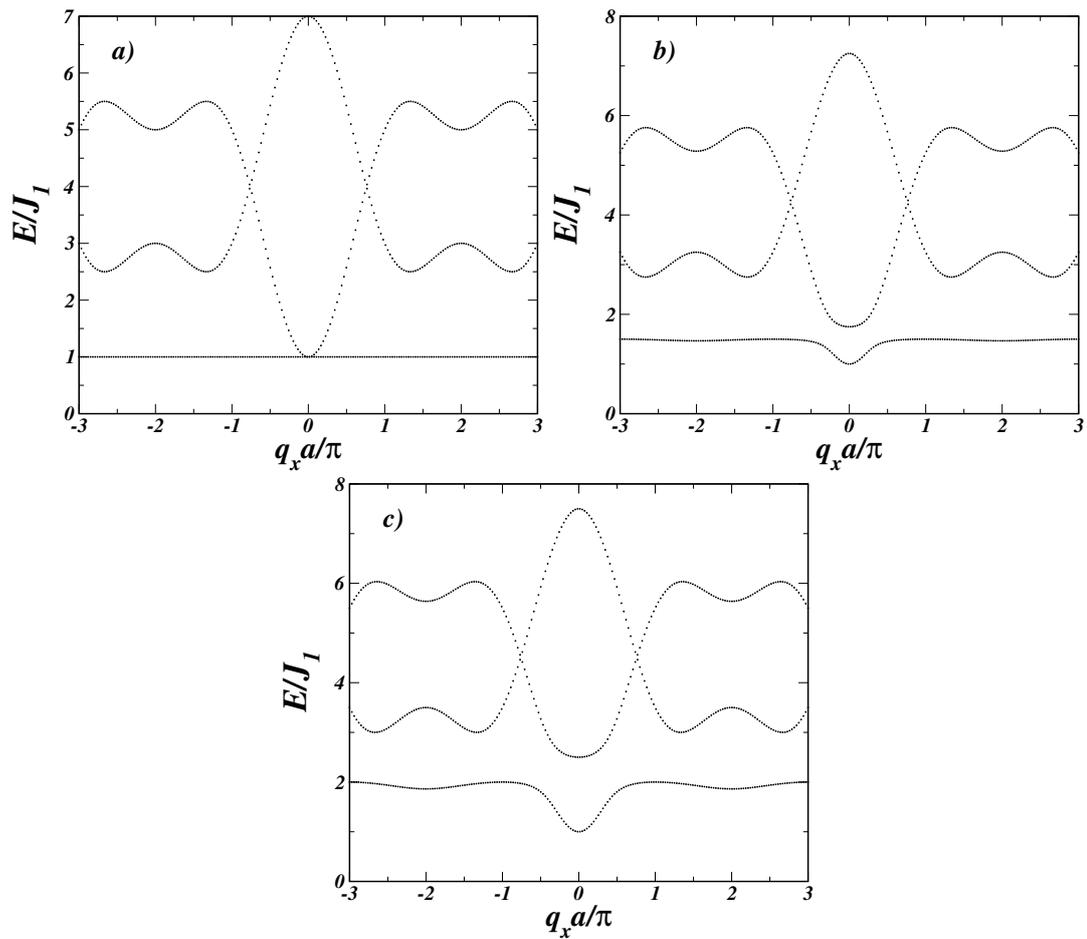


Figura 4.10: Relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel decorada para $J_c = 0, J_1 = 1, h_0 = 1$, para $J_c = 0.25, J_1 = 1, h_0 = 1$, e para $J_c = 0.5, J_1 = 1, h_0 = 1$

5 *Conclusões*

Neste trabalho estudamos a propagação na mudança de fase da precessão dos spins, (ondas de spin) em redes decoradas com baixa dimensionalidade. O estudo da propagação da onda de spin é importante pois essa excitação coletiva do material magnético é responsável pela diminuição da magnetização do material magnético. Portanto, o estudo dessas ondas em sistemas de baixa dimensionalidade é importante ainda mais em sistemas de dimensão reduzida (2D) pois é a tendência de estudarmos materiais a base de carbono que se apresentam como grandes candidatos para os novos dispositivos eletrônicos nos próximos anos. Dessa forma estudar essa propriedade física dos materiais magnéticos em estruturas bidimensionais se justifica.

Usamos o Hamiltoniano de Heisenberg incluindo a interação entre primeiros e segundos vizinhos no sistema. Como trabalhamos com duas redes interpenetradas, dividimos o Hamiltoniano em três partes, um Hamiltoniano para cada rede isoladamente e um que leva em consideração a interação entre as redes. Esse formalismo é independente da rede a ser utilizada. Assim, conseguimos construir um formalismo geral para redes que possuem dois átomos na base. O Hamiltoniano é escrito numa forma matricial que viabiliza a sua diagonalização.

Primeiramente consideramos uma rede quadrada interpenetrada por outra rede quadrada situada em uma posição qualquer que é definida por dois parâmetros α e β . Mostramos que o posicionamento das redes altera a relação de dispersão significativamente. Importante notar que para valores racionais da razão α/β as figuras mostram uma simetria bem distinta daquela quando usamos α/β irracional. Contudo, é bom salientar que a simetria sempre existe. A diferença entre as figuras da relação de dispersão fica mais evidenciada quando mostramos a densidade de estados do sistema. Verificamos que a densidade é bastante modificada com a mudança dos parâmetros.

Para ilustrar que o formalismo se adequa a qualquer rede com dois átomos na base, aplicamos o resultado para uma rede favo de mel e observamos que a única modificação deve ser feita nos fatores de estrutura que caracterizam cada rede. Para finalizar, introduzimos uma rede quadrada na rede favo de mel e pudemos verificar que essa decoração quebra a linearidade da

energia em torno dos pontos k e k' da zona de brillouin.

Em resumo, usamos um formalismo para estudar qualquer rede decorada e/ou sistemas com mais de um átomo na base de uma rede cristalina em duas dimensões. Mostramos que essas alterações alteram significativamente os sistemas isolados.

Referências Bibliográficas

- [1] Griffiths, David J., Eletrodinâmica/ David J. Griffiths ; tradução Heloisa Coimbra de Souza; revisão técnica Antonio Manoel Mansnares. - 3.ed. - São Paulo : Pearson Addison Wesley, 2001.
- [2] Machado, Kleber Daum, teoria do eletromagnetismo. v.2 Ponta Grossa: Editora UEPG, 2002.
- [3] H. M. Nussenzveig, Curso de Física Básica 3 (Eletromagnetismo) (Editora Edgard blücher, São Paulo, 1999).
- [4] R. Eisberg, R. Resnick, Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas (Editora Campus Ltda., Rio de Janeiro, 1979).
- [5] Oliveira, Ivan S., Introdução à física do estado sólido / Ivan S. Oliveira, Vitor L. B. de Jesus. - 2.ed.- São Paulo : Editora Livraria da Física, 2011.
- [6] Griffiths, David J., Mecânica Quântica; tradução Lara Freitas; revisão técnica Marcelo Mulato.–2.ed.–São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- [7] Feynman, Richard P., Lições de física de Feynman : edição definitiva / Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, Matthew Sands ; tradução Adriana Válio Roque da Silva...[et al.]. - Porto Alegre : Bookman, 2008. v.2.
- [8] Kittel, Charles, Introdução à física do estado sólido / Charles Kittel ; tradução Ronaldo Sérgio de Biasi. - Rio de Janeiro : LTC, 2006
- [9] Feynman, Richard P., Lições de física de Feynman : edição definitiva / Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, Matthew Sands ; tradução Adriana Válio Roque da Silva...[et al.]. - Porto Alegre : Bookman, 2008. v.3.
- [10] Salinas, Sílvio R. A., Introdução à Física Estatística/Sílvio R. A Salinas. - São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1999. - (Acadêmica; 9)

- [11] W.D. McComb. Renormalization Methods a guide for beginners. Oxford University, 2004.
- [12] G.E. Uhlenbeck, S. Goudsmit. Spinning Electrons and the Structure of Spectra, Instituut voor Theoretische Natuurkunde Leyden, Nature, vol. 117, p. 264-265, February 20, 1926.
- [13] Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 33, n. 2, 2604 (2011).
- [14] W. Greiner, Quantum mechanics: an introduction, Springer, 2001.
- [15] J.J Sakurai, Modern Quantum Mechanic (Addinsson-Wesley Publising Company, Massachusetts, 1994).
- [16] Oliveira, Mário José de, Termodinâmica/ Mário José de Oliveira.– São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.
- [17] Pierre Weiss, J. Physique 6, 661 (1907).
- [18] W. Heisenberg, Z. Physik 49, 619 (1928).
- [19] Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 26, n. 4, p. 385-393, (2004).
- [20] Aschroft, Neil W., Física do estado sólido/ Neil W. Aschroft, N. David Mermin; tradução Maria Lucia Godinho de Oliveira.– São Paulo : Cengage Learning, 2011.
- [21] O. Madelong , Introduction to Solid-State Theory, 2a. ed., Springer-Verlang, Berlim (1981).
- [22] F. Bloch, Z. Phys. 61, 206 (1930).
- [23] Anselmo, Dory Hélio Aires de Lima. Espectro das ondas de Spin lineares e não lineares em multicamadas magnéticas anisotrópicas. 1999. Tese (Doutorado em Física)- Centro de Ciências Exatas e da Terra, Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 1999.
- [24] Rezende, M. Sérgio. Fenômenos dinâmicos em nano-estruturas magnéticas - II *IV*: Curso de Verão, 2013, Recife. Minicurso. Recife: UFPE, 2013. Disponível em : <<http://www.ufpe.br/veraofisica/images/Verao2013/Minicursos/smr>> Acesso em: 14 de maio 2014.

-
- [25] T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
- [26] Costa Filho, R. N. ; Cottam, M. ; Farias, G. . Microscopic theory of dipole-exchange spin waves in ferromagnetic films: Linear and nonlinear processes. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics), Maryland, USA, v. 62, n.10, p. 6545-6560, 2000.
- [27] .Wheeler, J. C. Decorated Lattice-Gas Models of Critical Phenomena in Fluids and Fluid Mixtures. Annual Review of Physical Chemistry, Vol. 28: 411-443 (1977).