



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

WANÊSSA FAÇANHA DA SILVA

MODELO DE HEISENBERG XXZ PARA ONDAS DE SPIN EM BAIXA DIMENSÃO

FORTALEZA

2022

WANÊSSA FAÇANHA DA SILVA

MODELO DE HEISENBERG XXZ PARA ONDAS DE SPIN EM BAIXA DIMENSÃO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

FORTALEZA
2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S584m Silva, Wanêssa Façanha da.

Modelo de Heisenberg xxz para ondas de spin em baixa dimensão / Wanêssa Silva. – 2021.
71 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

1. Ondas de spin. 2. Modelo de Heisenberg. 3. Ferromagnetismo em baixas dimensões. 4. Redes decoradas. I. Título.

CDD 530

WANÊSSA FAÇANHA DA SILVA

MODELO DE HEISENBERG XXZ PARA ONDAS DE SPIN EM BAIXA DIMENSÃO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 26/01/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Dory Hélio Aires de Lima Anselmo
Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN)

Prof. Dr. Claudionor Gomes Bezerra
Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN)

Ao meu Filho.

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a todos que contribuíram para essa defesa de doutorado. Em especial:

À Deus, por ser minha fonte de energia.

Ao Camilo, por me oferecer força e felicidade.

À minha mãe, por sempre apoiar meus planos.

À tia Elke, por cuidar do Camilo com muito amor.

Ao Prof. Raimundo Nogueira pela sua orientação, compreensão e paciência.

Aos professores do departamento de Física.

Ao meus colegas da UFC.

À Rejane e Ana Cleide, por sempre me ajudar em situações burocráticas.

O presente trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código do financiamento - 001.

RESUMO

Sistemas de baixa dimensionalidade têm atraído uma grande atenção principalmente devido a materiais como grafeno e nanotubos de carbono. Tais materiais 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, como por exemplo, o estudo de propriedades magnéticas de materiais em baixa dimensionalidade e com o desenvolvimento desse campo de pesquisa teremos uma melhor compreensão dos fenômenos relacionados ao magnetismo. Há vários assuntos curiosos a serem pesquisados em sistemas magnéticos, como o comportamento de ondas de spin o qual é importante para o estudo da spintrônica. A spintrônica gerou inúmeras pesquisas de desenvolvimento de novos aparelhos e memórias magnéticas, como a pesquisa do grafeno magnético, por exemplo, que tem como aplicação a criação de novos componentes spintrônicos (que armazenam dados usando o spin do elétron, em vez de sua carga). Devido ao grande potencial de impacto das pesquisas magnéticas na vida tecnológica que nos cerca, temos como objetivo nesse trabalho estudar o comportamento de ondas de spin em sistemas bidimensionais ferromagnéticos usando Hamiltoniano de Heisenberg XXZ. Tal modelo de Heisenberg XXZ se define através da interação entre os momentos magnéticos de um sistema anisotrópico. Dessa forma esse Hamiltoniano se caracteriza por ter $J_x = J_y \neq J_z$. Os sistemas bidimensionais que consideramos aqui são redes decoradas. Tais decorações são introduzidas para gerar redes com mais de um átomo na base da célula unitária 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 de parâmetros de controle α e β . Também analisamos a superposição entre duas redes triangulares.

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

ABSTRACT

Low-dimensional systems have attracted much attention lately due to materials 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, as for example, the study of magnetic properties of materials at low dimensionality and with the development of this field of research we will have a better understanding of the phenomena related to magnetism. There are several curious subjects to be investigated in magnetic systems such as behavior of spin waves which is important for the study of spintronics. Spintronics has generated numerous researches on the development of new apparatus and magnetic memories, such as the research of magnetic graphene, for example, which has the development of new spintronic components (which store data using the spin of the electron instead of its charge). The process of forming a magnetic graphene is given by placing the graphene on a layer of magnetic insulator, a material that is an electrical insulator but with magnetic properties. Due to the great impact potential of the magnetic researches in the technological life that we surround, we aim at this work to study the behavior of spin waves in two-dimensional ferromagnetic systems using Hamiltonians of Heisenberg XXZ. Such Hamiltonian is characterized by having $J_x = J_y \neq J_z$. For two-dimensional systems we consider here networks decorated. Such 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 control parameters α and β . We also use the superposition of a square on a hexagonal network. We also analyzed the overlap between two triangular networks.

Keywords: spin wave; Heisenberg model; low-dimensional ferromagnetism; decorated lattices.

Lista de Figuras

Figura 1 – Experimento de Stern-Gerlach. Fonte: [1]	13
Figura 2 – Paramagnético, Ferromagnético, Antiferromagnético e Ferrimagnético. J (energia de troca). Fonte: [2]	15
Figura 3 – a) Ondas de spin no estado fundamental, b) Ondas de spin no estado excitado, c) Ondas de spin vista em perspectiva, Ondas de spin vista do topo. Fonte:[3] .	18
Figura 4 – Precessão dos spins em torno da sua posição de equilíbrio, gerando uma onda de spin. Fonte:[4]	18
Figura 5 – Paramagnetismo e Diamagnetismo. Fonte: [5]	29
Figura 6 – Solução gráfica da equação 2.46. Fonte: [6]	35
Figura 7 – a) Rede Cristalina, b) Base, contendo dois átomos diferentes, c) Estrutura do Cristal. Figura retirada de [7].	38
Figura 8 – Rede Cúbica Simples, Rede Cúbica de Corpo Centrado e Rede Cúbica de Face Centrada. Figura retirada de [7].	39
Figura 9 – Relação de dispersão para a rede quadrada anisotrópica para três valores diferentes de λ . a) rede quadrada, b) rede triangular. Linhas sólidas são para $\lambda = 1.0$, linhas pontilhadas $\lambda = 0.5$, e linhas tracejadas $\lambda = 1.15$	50
Figura 10 – Rede Quadrada.	51
Figura 11 – Rede Triangular.	51
Figura 12 – Duas redes quadradas interpenetradas	53
Figura 13 – Duas redes quadradas interpenetradas	53
Figura 14 – Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas de Heisenberg puros ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais próximo do tipo Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$)	55
Figura 15 – Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas de Heisenberg puros ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$	56

Figura 16	–O gráfico de contorno da energia das ondas de spin. Para dois arranjos espaciais diferentes das redes. O painel superior para $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.87$, o painel inferior $\alpha = 0.87$ e $\beta = 0.5$. O painel esquerdo mostra o ramo superior, enquanto o painel direito mostra o ramo inferior da dispersão. As energias crescem do azul para o vermelho.	57
Figura 17	–O gráfico de contorno das ondas de spin para o mesmo sistema da Fig. 16. Mas agora estamos deslocando uma das redes. Aqui $\beta = 0.3$, e $q_y d_a / \pi = 0$. . .	58
Figura 18	–Duas redes triangulares superpostas.	59
Figura 19	–Relação de dispersão de duas redes triangulares interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas puros de Heisenberg ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$. . .	59
Figura 20	–Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas puros de Heisenberg ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$. . .	60
Figura 21	–O gráfico de contorno da energia das ondas de spin. Para dois arranjos espaciais, diferentes, das redes. O painel superior para $J^{za} = J^{zb} = 0$, no painel inferior, a interação completa é considerada. O painel esquerdo mostra o ramo superior, enquanto o painel direito mostra o ramo inferior da dispersão, e tomamos $\alpha = 0$ e $\beta = 0.57$. As energias crescem de azul para o vermelho. . .	61
Figura 22	–O gráfico de contorno das ondas de spin para o mesmo sistema da Fig. 16. Mas agora estamos deslocando uma das redes. Para $\alpha = 0$, e $q_y d_a / \pi = 0$. . .	62

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	MOMENTO MAGNÉTICO	22
2.1	O Spin do Elétron	24
2.1.1	<i>O princípio de exclusão de Pauli</i>	26
2.2	Ordenamentos Magnéticos	28
2.2.1	<i>Teoria de Weiss</i>	33
3	ESTRUTURA CRISTALINA	37
3.1	Redes Bidimensionais, Redes Tridimensionais e Bandas de Energia	37
3.2	O Teorema de Bloch	40
3.2.1	<i>O modelo tight-binding</i>	41
3.2.2	<i>Modelo de Ising</i>	43
3.2.3	<i>Modelo de Heisenberg</i>	44
3.3	Ondas de Spin em Sistemas Ferromagnéticos	45
3.4	Ondas de Spin em Redes Decoradas	49
4	RESULTADOS	50
4.1	Rede Quadrada e Rede Triangular	50
4.2	Redes Decoradas	51
4.2.1	<i>Duas redes quadradas superpostas</i>	52
4.2.2	<i>Duas redes triangulares interpenetradas</i>	58
5	CONCLUSÕES	63
	REFERÊNCIAS	64

1 INTRODUÇÃO

A natureza nos mostra, de forma curiosa e complexa, a sua dinâmica de fenômenos, os quais despertam interesses em entendê-los e explorá-los em sua forma construtiva para o mundo. O estudo dos processos da natureza, como a energia, a simetria e as propriedades da matéria, está inserido no escopo da física. Dentre essas propriedades da matéria acima citadas, uma que sempre atraiu a atenção do homem foi a capacidade de certos materiais de se atraírem. Essa propriedade é chamada de magnetismo e ele é o objetivo do estudo que mostraremos aqui. O magnetismo em si é um campo muito vasto da física, e a indústria alimenta essa área de pesquisa para alavancar a tecnologia a qual utilizamos. Dentro da riqueza de assuntos pesquisados em trabalhos científicos que fazem uso do magnetismo, iremos estudar nesta tese as propriedades das ondas de spin em sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade. No desenvolvimento deste trabalho apresentaremos características do magnetismo que mostrarão a sua importância tecnológica. Em particular, iremos estudar a propagação dessas ondas de spin em redes de átomos bidimensionais decoradas. E então descrever mais precisamente o que significa magnetismo, ondas de spin, magnons, redes atômicas bidimensionais decoradas e suas aplicações.

O magnetismo está relacionado a correntes elétricas [8]. 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 era a corrente que passava por um fio próximo à bússola. Logo, o movimento da agulha ocorre porque existe uma força de natureza magnética agindo sobre ela e novamente o magnetismo se faz presente em fenômenos observados no cotidiano [9, 10]. O magnetismo é a base para o conhecimento de materiais magnéticos e para os fenômenos relacionados a ele, os quais são indispensáveis para a tecnologia. Ao darmos ênfase na afirmação de que a ação do magnetismo está relacionada a correntes elétricas, como é mencionado ao longo da história por vários cientistas e filósofos [11], podemos seguir em frente para explicarmos o momento magnético e as propriedades relacionadas a ele.

O momento magnético é um vetor que indica a medida da intensidade e orientação do dipolo magnético. 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 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 [8, 12].

Até que ponto essa relação do momento magnético com o momento angular orbital do elétron é o suficiente para entendermos alguns fenômenos? Para sabermos, temos que lembrar do experimento de Stern-Gerlach [13]. No experimento de Stern-Gerlach, forma-se um feixe de átomos neutros pela evaporação de prata em um forno. Tal feixe é colimado por um diafragma e entra em um ímã onde a seção reta deste ímã mostra que ele produz um campo que aumenta de intensidade na direção z , de acordo com a figura, e que esta também é a direção do campo magnético no feixe. Lembrando que os átomos são neutros, então a única força resultante que age sobre eles é a componente z da força magnética, $F = \frac{\partial B_z}{\partial Z} \mu_z$ e que eles serão defletidos de uma quantidade proporcional a μ_z . Sabendo que $\mu_z = -g_l \mu_b m_l$ e que m varia de $-l$ a l . Caso a componente z do momento magnético orbital possua valor igual a zero, dentro o intervalo de valores que ela pode assumir, como iremos 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. É importante salientar que a soma do momento magnético orbital com o momento magnético de spin é representada pelo momento magnético total, assim como o momento angular total é a adição do momento angular orbital com o momento angular de spin. Com a explicação acima sobre o momento magnético devido ao spin, percebemos que ele está relacionado tanto com o momento angular orbital, quanto com o momento angular de spin. O experimento de Stern-Gerlach não tinha como objetivo provar a existência do spin, pelo contrário, seu objetivo era comprovar a quantização espacial [14]. Em 1927 Phipps e Taylor realizaram o mesmo experimento de Stern-Gerlach, mas utilizaram átomos de hidrogênio o qual, ao atravessar o campo magnético, também possuíam seus momentos magnéticos desviados em dois possíveis valores, mesmo tendo o momento angular orbital nulo o qual adquiriu esse valor devido aos átomos estarem sujeitos a uma temperatura baixa caracterizando um estado fundamental [15]. Phipps e Taylor cogitaram a possibilidade do ocorrido estar relacionado ao momento magnético associado ao movimento das cargas do núcleo, mas não era o caso, pois o momento de dipolo medido estava relacionado à massa do elétron e não do próton [13].

A existência do spin do elétron foi proposta por Uhlenbeck and Goudsmit [16]. 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 mi-

oscópico do magnetismo só foi possível no primeiro quarto do século XX, com o surgimento da Mecânica Quântica [17]. 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 [18], falaremos sobre o processo de magnetização e suas consequências, ou seja, sobre as propriedades ligadas ao momento magnético.

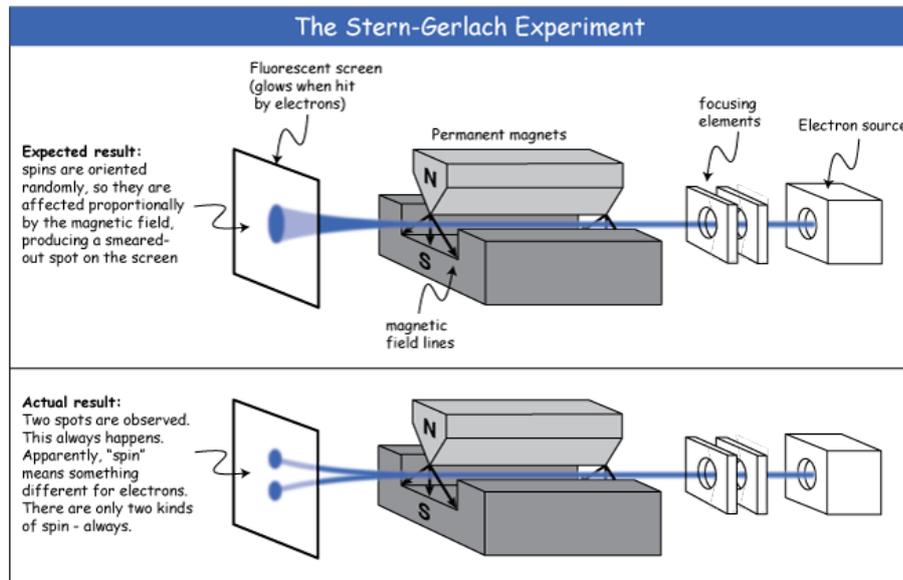


Figura 1: Experimento de Stern-Gerlach. Fonte: [1]

Em escala microscópica, um material pode responder de formas diferentes à ação de um campo magnético externo. Essa resposta se caracteriza pelo alinhamento dos momentos magnéticos em relação ao sentido do campo aplicado e pela susceptibilidade magnética χ do meio. Para compreendermos essa afirmação, imagine que um material magnético é composto por vários átomos. Quando aplicarmos um campo magnético, pequenas correntes induzidas se formarão no átomo. De acordo com a Lei de Lenz, essas correntes geram um campo oposto ao aplicado. Dessa forma, o comportamento dos momentos magnéticos induzidos nos átomos é oposto ao campo magnético externo, e isso caracteriza um material diamagnético o qual não possui momento magnético permanente. Nesse tipo de material, χ possui um valor negativo [19].

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. Seus átomos possuem momento magnético permanente. Esses materiais 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 [8, 17, 19]. As forças de alinhamento, que definem o paramagnetismo, são relativamente fracas ao serem comparadas com as forças de movimentos térmicos as quais destroem a ordem magnética [19].

O ordenamento dos momentos magnéticos é importante, pois ao identificarmos o

tipo presente no material, poderemos analisar a sua relação com o comportamento termodinâmico do sistema, os tipos de transições de fase devido à variação da temperatura do sistema em questão, por exemplo, e as consequências para cada alteração no sistema físico e com isso poderemos usar para alguma aplicação desejada. O ordenamento magnético se manifesta de diversas formas e quando ocorre o alinhamento dos momentos magnéticos com o campo magnético e este alinhamento permanece o mesmo quando o campo é desligado, observamos um material ferromagnético. Esse tipo de ordenamento é chamado de espontâneo e ocorre abaixo de uma determinada temperatura crítica e que possui uma dependência linear de χ com o inverso da temperatura [17, 19]. Além dos ordenamentos mencionados anteriormente, existem ainda outros; antiferromagnético, o qual os momentos de dipolo de átomos vizinhos tendem a alinhar-se de forma antiparalela, e o ferrimagnético o qual possui momentos magnéticos de magnitudes distintas.

Em 1920, Louis Eugene Felix Néel sugeriu que ao penetrar duas subredes ferromagnéticas, seria obtida uma rede antiferromagnética. Tal ideia foi confirmada em 1949 por meio do experimento de difração elástica de nêutrons [20]. O material ferrimagnético, por sua vez, possui a mesma característica de um material antiferromagnético, ou seja, os seus momentos magnéticos se ordenam antiparalelamente, mas o que os diferencia é que em um material ferrimagnético os momentos de dipolo magnético possuem magnitudes distintas, ao contrário de um material antiferromagnético [7]. A definição desses materiais é explicada através da magnetização. O que entendemos de magnetização é que se trata, em nível microscópico, da soma de todos os momentos magnéticos atômicos em um determinado volume. A Fig.2 nos mostra o comportamento dos ordenamentos citados acima [17, 19, 21, 22].

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 tais propriedades físicas. Dessa forma, precisamos descrever os diversos tipos de arranjos espaciais, e para isso devemos estudar as estruturas cristalinas dos materiais. Um primeiro passo seria entender o que seria um cristal, este por sinal pode ser entendido como o acúmulo de átomos em ambiente estável e que também pode ser classificado como ideal. Chamamos de cristal ideal o que surge com a repetição infinita de grupos idênticos de átomos. Esse grupo de átomos é denominado de base, e esta, quando ligada a um conjunto de pontos matemáticos forma a rede cristalina e a unidade que se repete em um cristal ideal (dotado de simetria) é chamada de célula unitária [7]. Após classificarmos os tipos de cristais, teremos um cuidado a mais ao se tratar da dinâmica dos átomos que os compõem. Uma das primeiras indagações que surgem é como deveremos pensar a nível microscópico, ou seja, no mundo da mecânica quântica.

Em particular, vamos nos concentrar aqui no estudo de redes bidimensionais que

Para, Ferro, Antiferro, Ferri

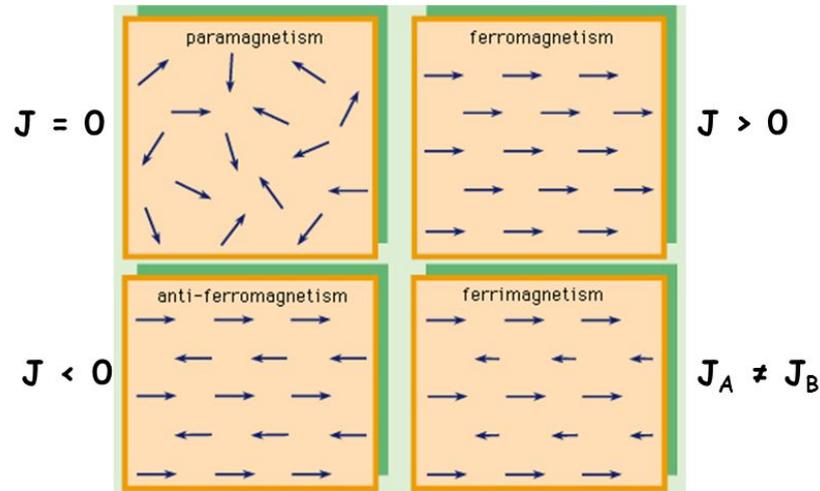


Figura 2: Paramagnético, Ferromagnético, Antiferromagnético e Ferrimagnético. J (energia de troca). Fonte: [2]

têm como característica a sua forma invariante em relação às 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 as quais se classificam como: rede quadrada, rede retangular, rede hexagonal, rede retangular centrada [7, 23, 24].

Em uma rede cristalina, os átomos encontram-se em posições que chamamos de sítios. Os elétrons pertencentes aos átomos possuem momentos magnéticos de spin. Esses momentos magnéticos, que chamaremos simplesmente de spin, interagem com os seus vizinhos e essa interação é de origem coulombiana. Discutimos anteriormente que o ordenamento dos momentos magnéticos de spins influencia a classificação dos materiais. Vamos agora descrever um modelo que seja capaz de explicar 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 manteria 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 [25].

O objetivo do modelo é calcular a energia média. Para isso devemos usar apenas

a parte espacial da função de onda total do elétron, já que a interação coulombiana entre os elétrons independe do spin. Ao fazermos o cálculo da energia média, encontramos dois termos: um termo que representa a energia coulombiana do sistema e outro termo que representa a energia de troca, sabendo que a energia de troca surge ao considerarmos o princípio de exclusão de Pauli. (A energia de troca explica os tipos de ordenamentos magnéticos, e o primeiro a notar tal relação foi Werner Heisenberg, em 1928). Com isso, o Hamiltoniano de Heisenberg, que explica o tal ordenamento, contém a energia de troca multiplicada pelo produto escalar dos spins dos elétrons. Lembrando que o sinal da energia média, em relação à função de onda espacial, depende do estado de spin ser singlete ou tripleto porque se trata da interação entre dois elétrons [17, 26].

O modelo de Heisenberg passou a ser bastante estudado, mas foi Hans Bethe quem formulou um método, em 1931, que tinha como objetivo encontrar a solução exata para os autovalores e autovetores do Hamiltoniano de Heisenberg para o modelo XXX, ou seja, para um sistema isotrópico em termos da interação de troca. O método de Bethe para o modelo XXZ (modelo anisotrópico de Heisenberg) não apresentou dificuldades, e em 1968, Yang e Yang mostraram que a solução, de forma clássica, também consegue explicar o modelo XXZ [27–31]. Uma peculiaridade em relação ao modelo de Hans Bethe é que o método de ansatz leva o cálculo do momento de quasipartículas a um conjunto de equações transcendentais, chamadas de restrições de Bethe, e uma suposição para encontrar as soluções para os momentos é a conjectura de corda [32].

Além desse modelo, podemos citar o modelo de Ising, o modelo XY e o modelo de Potts que também são usados para estudar o ordenamento magnético. 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 [33]. Em 1925, Ising mostrou a solução unidimensional do seu modelo e percebeu que era decepcionante, pois não apresentava nenhuma magnetização espontânea e nenhuma transição de fase. Tal modelo tinha sido proposto por Wilhelm Lenz, orientador de Ernest Ising, em 1920 e solucionado para uma rede quadrada (2D) por Lars Onsager em 1944.

O modelo de Ising é uma ferramenta utilizada em mecânica estatística com larga aplicação em áreas como a química, a biologia devido a sua forma simples, mas não trivial. Na física, em particular, é usado para estudar: rede de gás, transições de fase gás-líquido, sólido-líquido e para determinar singularidades em propriedades termodinâmicas e magnéticas no ponto crítico [34, 35]. Na literatura encontramos, também, publicações recentes sobre a associação do modelo de Ising a fotônica como um processo de minimização de energia, nomeando o processo como “máquinas de Ising”. Tal processo otimiza problemas de combinatória de grande relevância para a ciência e a tecnologia os quais continuam sendo difíceis de lidar

em escala pela eletrônica convencional [36]. O modelo XY considera apenas as componentes x e y do spin. Mermin e Wagner mostraram que sistemas com spins contínuos com fase angular periódica e em duas dimensões, do tipo XY, não possuem ordenamento de longo alcance, portanto não apresentam transição de fase ferromagnética ou antiferromagnética e não possuem magnetização espontânea para qualquer temperatura finita [37, 38].

Em contrapartida, Berezinskii, Kosterlitz e Thouless apresentaram, através da teoria de grupo de renormalização, uma transição de fase não usual mediada por defeitos topológicos denominados vórtices, diferente dos casos ferromagnético e antiferromagnético. Apesar de não haver uma ordem de longo alcance, mesmo a baixas temperaturas, há uma pseudo-ordem de longo alcance onde a correlação entre spins decai como uma lei de potência [39–42]. Essa descoberta levou ao prêmio nobel de 2016, o qual faz uma homenagem a variedade de descobertas relacionadas à topologia e as transições de fase, na divulgação científica sobre a transição de fase para o modelo XY está presente duas facetas interessantes: os trabalhos inovadores de John Kosterlitz e David Thouless sobre as transições de fase de ordem infinita e por Duncan Haldane sobre os gaps de energia nas cadeias quânticas de spin [43]. Podemos mencionar uma das publicações, por exemplo, para mostrar a importância dos vórtices na literatura, que é a pesquisa de cientistas da Universidade de Rice, Estados Unidos, onde decodificaram a estrutura tridimensional de um vórtice magnético do tamanho de um glóbulo vermelho do sangue. A estrutura, semelhante a de um tornado, permitirá a construção de discos rígidos para computadores com capacidades muito maiores que as dos atuais [44].

O modelo de Potts para quatro estados, em termos históricos, foi estudado primeiro por Ashkin e Teller em 1943. Mas o modelo geral de q estados tem seu nome atual após o professor Cyril Domb da Universidade de Oxford, em 1974, propor como tema de tese ao seu aluno Renfrey B. Potts em 1951. Dois anos depois o problema foi abordado em um estudo independente de Kihara em 1954 [45]. O modelo de Potts se tornou um importante campo de testes para diferentes métodos e abordagens no estudo da teoria de pontos críticos e além disso não poderíamos deixar de mencionar que o modelo de Potts é uma generalização do modelo de Ising para mais de duas componentes e que atualmente envolve uma série de problemas de física estatística [46, 47]. As características que diferenciam esses três modelos mencionados acima são importantes, pois a partir de tal característica saberemos qual modelo utilizar. Por exemplo, em material com anisotropia uniaxial, usa-se o modelo de Ising (os momentos dipolares podem se alinhar em um ou em outro sentido do eixo); em um material com anisotropia planar, teremos o modelo XY (O spin está restrito a qualquer direção no plano xy); e para sistemas isotrópicos, com três componentes de spin, ou anisotrópico em uma ou em duas componentes do spin, como por exemplo: XXZ ou XYZ , faz-se uso do modelo de Heisenberg [30, 48].

Após a abordagem sobre modelos que estudam os ordenamentos magnéticos, prosseguire-

mos com uma breve introdução sobre ondas de spins e suas características quânticas. Afinal, o que são as ondas de spin? Imagine as oscilações em um sistema de spins, tais oscilações são denominadas de ondas de spin, pois enxergamos essa perturbação por todo um sistema como ondas que se propagam, e a quantização dessas ondas de spin é definida como magnon [49]. Através das Figs.3 e 4 podemos vislumbrar as ondas de spin.

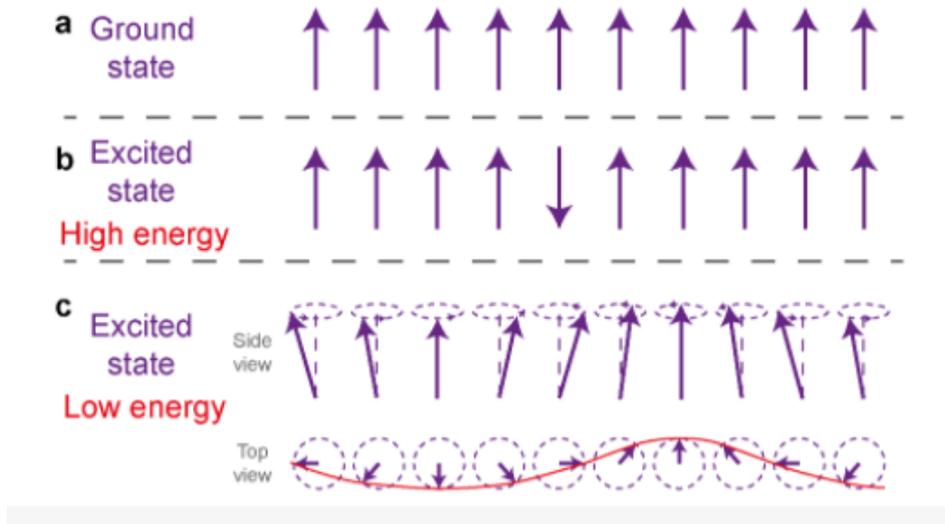


Figura 3: a) Ondas de spin no estado fundamental, b) Ondas de spin no estado excitado, c) Ondas de spin vista em perspectiva, Ondas de spin vista do topo. Fonte:[3]

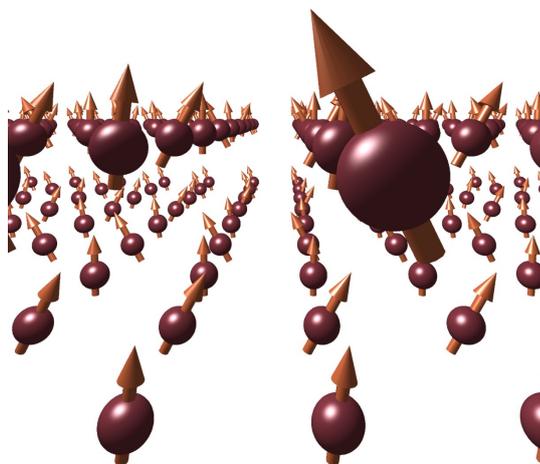


Figura 4: Precessão dos spins em torno da sua posição de equilíbrio, gerando uma onda de spin. Fonte:[4]

Existe uma similaridade entre as excitações elementares em materiais ferromagnéticos e as excitações elementares em sólidos elásticos. O movimento oscilatório dos átomos em

relação a sua posição de equilíbrio com as frequências dos modos normais de vibração é definida como uma excitação elementar em sólidos, e a sua quantização é chamada de fônon. Os fônons são quasipartículas que se propagam por todo o sólido, distribuindo o aumento da temperatura para todo sistema. Assim como os fônons, a quantização das ondas de spin também são quasipartículas que interagem com os seus vizinhos mais próximos, e a interação é via interação de troca (J), a qual surge ao considerarmos o princípio de exclusão de Pauli. Em um sistema ferromagnético, no seu estado fundamental, todos os spins estão paralelos e uma pequena amplitude de oscilação desses spins é descrita por uma variável dinâmica tipo oscilador harmônico. A interação entre os vizinhos mais próximos através das quasipartículas, é responsável pela dispersão com a dependência da frequência ω do modo normal com o vetor de onda \vec{k} (com comprimento de onda $\lambda = \frac{2\pi}{k}$) [50]. Aproveitando o assunto, não podemos esquecer de classificar a precessão dos spins em torno do campo magnético \vec{H} em termos de energia, ou seja, quando os spins precessam em fase em torno do campo, a excitação é de menor energia e é chamada de modo uniforme o qual não contribui para a frequência de precessão, mas quando os spins precessam fora de fase em torno do campo, ou seja, quando a fase de precessão varia no espaço, o sistema de spins é classificado de modo coletivo e este possui uma diferença de fase do primeiro ao último spin igual a 2π , enquanto o modo uniforme possui onda de spin de comprimento infinito. À medida que o comprimento de onda diminui há um aumento da contribuição da energia de troca para a energia de excitação [51, 52]. Os magnons são quantizações das excitações elementares de um sistema de spins acoplados. A única condição necessária para que eles venham a surgir é que os spins localizados em sítios distintos interajam entre si. Bem, como já falamos sobre momento magnético, sobre sua relação com o momento angular de spin e da sua precessão em torno da sua posição de equilíbrio, fazendo surgir as ondas de spin as quais quantizadas geram os magnons, precisamos mencionar onde os magnons podem ser encontrados. Eles, por sua vez, podem ser detectados em materiais ferromagnético, ferrimagnético, antiferromagnético, isolantes, metais, semimetais, na forma cristalina ou amorfa. É importante mencionar que o termo magnon não é apenas usado para excitações elementares envolvendo o spin eletrônico, mas eles também estão associados às excitações elementares dos spins nucleares [53, 54].

Este trabalho apresenta a avaliação das mudanças na distribuição e na intensidade das energias de ondas de spin em relação ao parâmetro λ no modelo de Heisenberg XXZ ($J_x = J_y \neq J_z$). Usaremos esse método nas seguintes estruturas: rede quadrada, rede triangular, duas redes quadradas interpenetradas, duas redes triangulares interpenetradas e dependendo da alteração da posição de uma rede sobre a outra obteremos uma configuração que se torna semelhante à estrutura de uma rede favo de mel. O estudo de sistemas físicos de redes planas quadradas e triangulares tem atraído muita atenção por décadas [?, 55–62]. Por exemplo, sis-

temas de baixa dimensão como hexagonais ou as chamadas rede favo de mel têm sido objetos de pesquisa atraentes por um longo tempo [63]. Esses sistemas apresentam grande potencial para aplicações tecnológicas, por exemplo, no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos devido às suas propriedades físicas incomuns (para uma revisão recente, consulte a [64]). Por outro lado, os sistemas de momentos magnéticos localizados interagindo também atraíram muita atenção. Esses sistemas apresentam uma coleção de momentos magnéticos (spins) interagindo através da constante de troca. A própria constante de troca é uma consequência direta da interação de Coulomb e do princípio de exclusão de Pauli, associada à sobreposição direta de funções de onda de dois spins vizinhos.

Sabendo que as estruturas à 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 pela 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. Encontramos um grande arsenal de pesquisas sobre o grafeno e dentre as inúmeras aplicações podemos, também, citar o grafeno magnético. Entre as possíveis aplicações do grafeno magnético estão as células de memória e novos componentes spintrônicos, que armazenam dados usando o spin do elétron, em vez de sua carga [65]. Podemos citar outras publicações sobre as aplicações do grafeno, por exemplo: o uso do grafeno para realizar sinapse artificial (conhecido como memoresistor), um resistor com memória, capaz de recordar dados armazenados anteriormente. Este elemento é o ponto chave da computação neuromórfica [66]; o grafeno com defeito (monocamada amorfa de carbono) possui deformidade plástica sem rompimento [67]; aplicação de tensão elétrica em uma rede de grafeno com o objetivo de prender e libertar elétrons viajantes em sua estrutura hexagonal, lembrando que o grafeno é melhor condutor elétrico que os metais, os elétrons em uma rede de grafeno não param [68].

É importante mencionar a investigação do comportamento em relação a dispersão das ondas de spin em sistemas diversos, como por exemplo, em filmes ultrafinos caracterizados em uma configuração de sistemas lineares e não lineares, que segundo o artigo [69], a investigação da dinâmica não linear das ondas de spin pode ser realizada através da teoria da perturbação de temperatura finita baseada em diagramas de Feynman (apresentando uma outra ferramenta matemática para trabalhar com as ondas de spin), focando essa obtenção em materiais ferromagnéticos específicos os quais são: *Fe*, *EuO* e *GdCl₃*. Podemos citar, também, a observação de modos de vibração das ondas de spin muito próximos um do outro, para uma esfera de granada ítrio, onde para certos valores dos parâmetros do sistema observa-se interação

entre os modos de vibração de excitação que levam a vários fenômenos dinâmicos, incluindo, auto-oscilações, cascatas de duplicidade de período, quase-periodicidade e caos [70].

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 Uhlenbech 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 em torno 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” [13].

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 $g_l = 1$, 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 [17]

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

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 e 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 [71].

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 inicial do experimento, daí o spin só ter sido proposto cinco anos mais tarde, em outro contexto [72].

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 [73]. A derivação teórica do valor de g_s é feita no âmbito da eletrodinâmica quântica [13]. 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 [8]

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

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) [1, 8, 74]. 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:

$$|0 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle], \quad (2.26)$$

onde o estado acima é denominado singlete. O estado singlete 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 singlete, respectivamente [8, 75, 76].

2.2 Ordenamentos Magnéticos

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 orbitais intrínsecos reagem à aplicação de um campo magnético determina o comportamento global de um dado material [77, 78]. 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 abaixo ilustra de forma simples os dois casos. Fica evidente que os materiais diamagnéticos são repelidos, enquanto os paramagnéticos são atraídos pelo campo magnético.

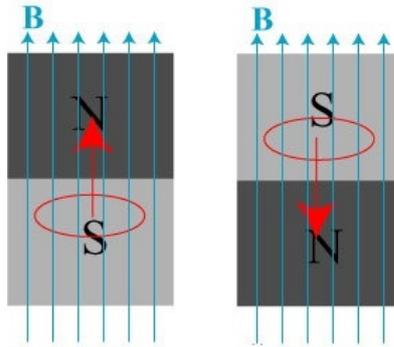


Figura 5: Paramagnetismo e Diamagnetismo. Fonte: [5]

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 $\vec{J}_m = \vec{\nabla} \times \vec{M}$, 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 parênteses 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”[8, 79].

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 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* [8, 80].

Como vimos, um material pode ser classificado de acordo com a sua resposta à 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 [81]. 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 [73, 82, 83]. 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”. 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 [17].

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 Brillouin

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

onde a função de Brillouin $B(x)$ 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 [84, 85].

2.2.1 Teoria de Weiss

A magnetização espontânea de materiais ferromagnéticos, foi explicada por Weiss [86]. 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 [11, 87]. 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 [88].

Ao substituírmos o campo magnético pelo campo molecular, na equação Eq.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

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

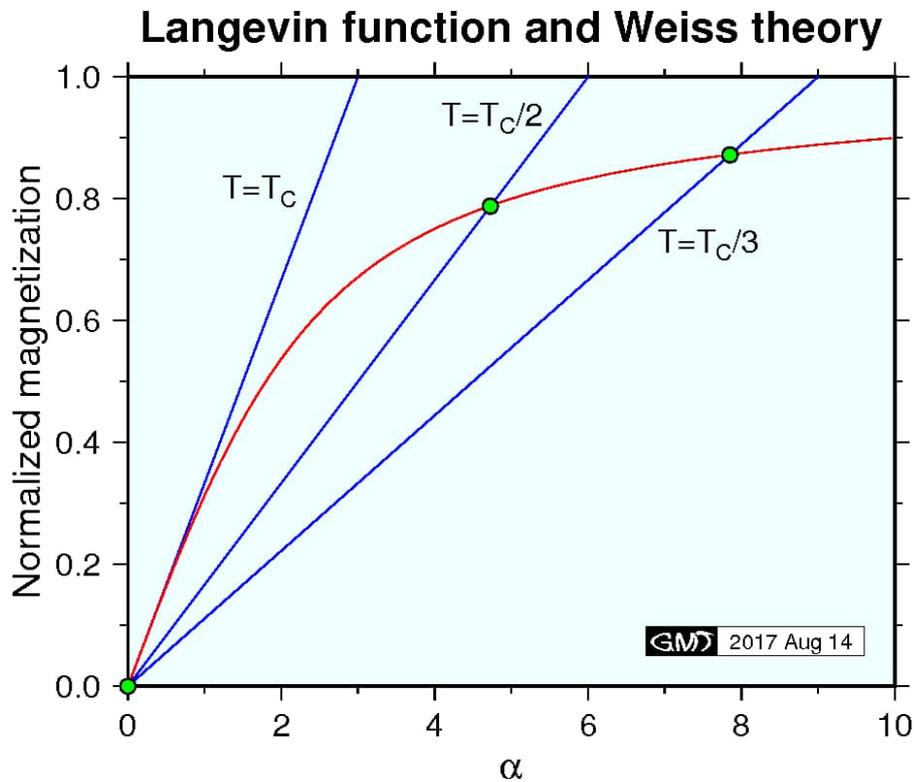


Figura 6: Solução gráfica da equação 2.46. Fonte: [6]

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

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

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 (a qual chamamos de μ), esta equação permite determinar o valor de λ ou, equivalentemente, do campo molecular de Weiss $H_W = \lambda\mu$. Supomos

que μ seja da ordem de grandeza do magneton de Bohr μ_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 [89].

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 [23]. 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], um exemplo de estrutura cristalina é apresentado na figura 7. 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 [73].

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

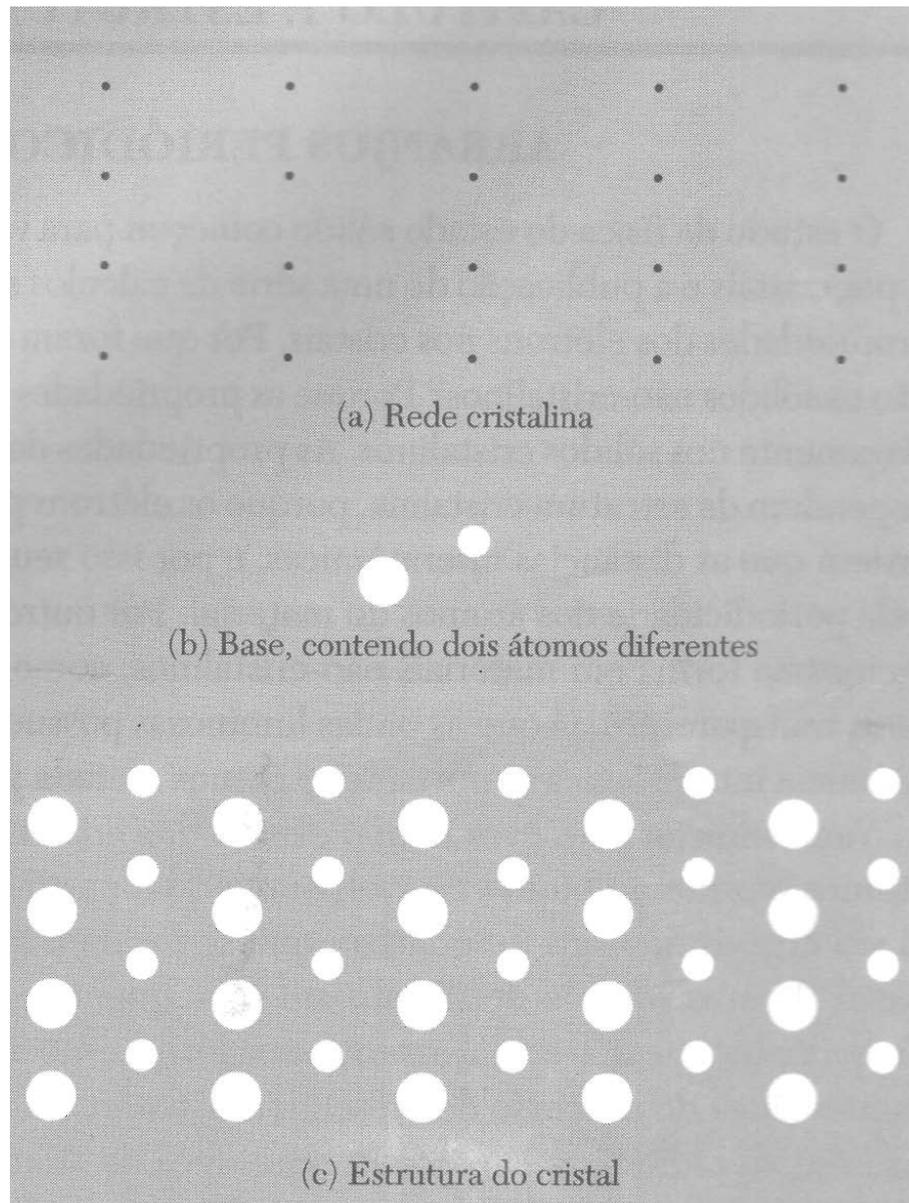


Figura 7: a) Rede Cristalina, b) Base, contendo dois átomos diferentes, c) Estrutura do Cristal. Figura retirada de [7].

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 8. 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.

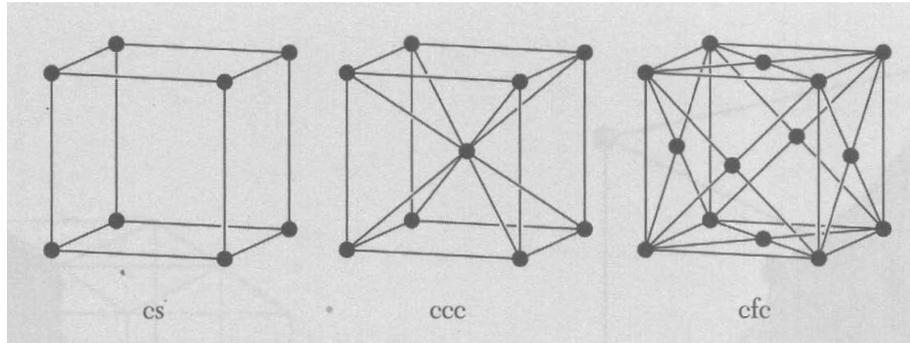


Figura 8: Rede Cúbica Simples, Rede Cúbica de Corpo Centrado e Rede Cúbica de Face Centrada. Figura retirada de [7].

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 $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ [23].

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 surgirão as bandas de energia. As bandas de energia são responsáveis pela diferenciação das propriedades condutoras de metais, isolantes e semicondutores. 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 [17,73].

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 $k = \pm \frac{\pi}{a}$ ocorrem 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 [90].

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 implicam 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 [23], 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 [91].

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, podemos afirmar que a função de onda do elétron é a combinação linear dos orbitais atômicos e através da mesma representa-se qualquer ponto da rede [17]:

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

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 consideramos estas quantidades como parâmetros a serem ajustados [17, 73, 92].

3.2.2 Modelo de Ising

O modelo de Ising é definido pelo seguinte Hamiltoniano de spin

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1} \sigma_i, \quad (3.18)$$

onde σ_i é uma variável aleatória que pode assumir valores ± 1 nos sítios $i = 1, 2, \dots, N$ em uma rede cristalina com d dimensões, que desempenha o papel de protótipo. O primeiro termo da Eq.3.18 se refere as energias de interação que sejam capazes de reproduzir um estado ferromagnético ($J > 0$) e o segundo termo se refere a interação de campo magnético aplicado H com o sistema de spins.

As variáveis de spin podem ser pensadas de várias maneiras: (i) como componentes de spin dos átomos, na mesma direção do campo magnético que podem apontar para cima ou para baixo; (ii) uma indicação de que o sítio i pode ser ocupado por um átomo A ou por um átomo B , da mesma forma que em uma liga binária do tipo AB (vizinhos iguais contribuem com energia $-J$, e vizinhos distintos contribuem com energia $+J$); (iii) como um número de ocupação, que mostra a presença ou a ausência de molécula em uma determinada célula de um gás de rede.

As várias interpretações nos mostram o quanto o modelo é geral de tal modo que é capaz de captar os aspectos essenciais do comportamento crítico.

Resolver o modelo de Ising significa escrever a função de partição canônica

$$Z_N = Z(T, H, N) = \sum_{\sigma_i} e^{(-\beta \mathcal{H})}, \quad (3.19)$$

onde a função partição da Eq.3.19 é escrita em termos da temperatura (T), do campo magnético (H) e do número total de partículas (N). $\beta \equiv \frac{1}{kT}$, onde k é constante de Boltzmann.

A soma é realizada sobre todas as variáveis de spin e o Hamiltoniano é dado pela Eq.3.18, e se pode obter a energia livre magnética por sítio,

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right]. \quad (3.20)$$

Pode-se obter g mais facilmente para uma rede unidimensional, através da técnica de matriz transferência, que também pode ser escrita para dimensões mais altas. Mas como já foi demonstrado por Ising, a solução em uma dimensão não possui relevância, pois a energia livre é perfeitamente analítica e não há transição de fase magnética.

Várias técnicas aproximadas foram desenvolvidas para resolver o modelo de Ising em duas e em três dimensões. Essas técnicas são úteis por fornecerem bons resultados para os aspectos qualitativos dos diagramas de fases e formam as poucas ferramentas disponíveis para

o estudo analítico de sistemas mais complexos [93, 94]

3.2.3 Modelo de Heisenberg

Os elétrons interagem entre si através de um potencial de Coulomb. Considere a interação coulombiana entre dois elétrons representada da seguinte forma

$$U(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (3.21)$$

onde $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ é a distância entre os 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 coulombiana independe do spin, precisaremos usar apenas a parte espacial da função de onda

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dr_1 dr_2 \quad (3.22)$$

onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1)]$. A determinação se o sinal é + ou – na expressão $\langle U \rangle$ irá depender se o estado de spin é singlete ou tripleto. Logo, a energia média depende do spin, apesar que a interação entre dois elétrons não dependa. Substituindo $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ na Eq.3.22 obtemos

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int [\phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1)] \frac{1}{r_{12}} [\phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1)] dr_1 dr_2 \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \right. \\ \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \\ \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \\ \left. + \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\langle U \rangle = \frac{2e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \pm \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \quad (3.25)$$

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

$$\left. \phi_{\alpha}^*(\vec{r}_1)\phi_{\beta}^*(\vec{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\phi_{\alpha}^*(\vec{r}_2)\phi_{\beta}^*(\vec{r}_1)dr_1dr_2 \right\}. \quad (3.26)$$

$$\langle U \rangle = E \pm J_{troca}, \quad (3.27)$$

onde

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_{\alpha}^*(\vec{r}_1)\phi_{\beta}^*(\vec{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\phi_{\alpha}(\vec{r}_1)\phi_{\beta}(\vec{r}_2)dr_1dr_2, \quad (3.28)$$

e

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_{\alpha}^*(\vec{r}_1)\phi_{\beta}^*(\vec{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\phi_{\alpha}^*(\vec{r}_2)\phi_{\beta}^*(\vec{r}_1)dr_1dr_2. \quad (3.29)$$

A Eq.3.27 mostra que a energia média depende do spin apesar de que a interação entre os elétrons não possui essa dependência. Sabemos que E é a energia 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 J_{troca} é assim chamado porque os elétrons trocam de estado, como pode ser verificado na Eq.3.29 [17, 73].

Werner Heisenberg foi o primeiro a perceber, em 1928, a importância da energia de troca para explicar a ordem magnética nos materiais [26]. Ele escreveu o Hamiltoniano de troca da seguinte forma

$$H_{troca} = -2J_{troca}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (3.30)$$

Esse é o chamado Hamiltoniano de Heisenberg que descreve o estado ferromagnético [73, 95].

3.3 Ondas de Spin em Sistemas Ferromagnéticos

Trataremos um sistema ferromagnético onde os átomos estão arranjados em uma rede cristalina. Nesse sistema os spins interagem entre si (via interação de troca) e interagem com um campo magnético externo. Iremos escrever o Hamiltoniano anisotrópico XXZ de Heisenberg e a energia para um sistema genérico de ondas de spin onde incluiremos o termo $\lambda = J^{xy}/J^z$ na mesma, e em seguida usaremos os valores de $\lambda = 1$ para obtermos o usual modelo de Heisenberg, depois alteraremos o valor para $\lambda = 0.5$ para obtermos um sistema caracterizado pelo modelo de Ising e por último faremos $\lambda = 1.15$ e obtermos o modelo XY para o sistema na região com esse valor. O parâmetro λ é responsável por regular a competição entre os spins no plano, entre os spins no espaço e os spins na direção z . O Hamiltoniano que caracteriza o sistema anisotrópico é dado por [95, 96]

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \left[J_{ij}^{xy} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{ij}^z S_i^z S_j^z \right] - h_0 \sum_i S_i^z. \quad (3.31)$$

Usando as transformações de Holstein-Primakoff para tratar os operadores de spin como operadores de criação e destruição [97]

$$S_i^x = \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i + a_i^\dagger), \quad (3.32)$$

$$S_i^y = i \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i^\dagger - a_i), \quad (3.33)$$

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad (3.34)$$

teremos

$$S_i^x S_j^x = \frac{S}{2} (a_i a_j + a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger), \quad (3.35)$$

$$S_i^y S_j^y = -\frac{S}{2} (a_i a_j - a_i a_j^\dagger - a_i^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger), \quad (3.36)$$

$$S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y = S (a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j), \quad (3.37)$$

$$S_i^z S_i^z = -S (a_i^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j) \quad (3.38)$$

$$H = -S \sum_{ij} \left(J_{ij}^{xy} - J_{ij}^z \delta_{ij} - h_0 \delta_{ij} \right) a_i^\dagger a_j \quad (3.39)$$

$$H = S \sum_{i,j} [(J_{ij}^z + h_0) \delta_{ij} - J_{ij}^{xy}] a_i^\dagger a_j, \quad (3.40)$$

$$H = \sum_{i,j} A_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad (3.41)$$

onde $A_{ij} = S[(J_{ij}^z + h_0) \delta_{ij} - J_{ij}^{xy}]$. A equação acima é mais simplificada mas 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

$$a_i = \sum_{q'} \psi_{q'}^i a_{q'}, \quad (3.42)$$

$$a_i^\dagger = \sum_q \psi_q^{i*} a_q^\dagger. \quad (3.43)$$

Substituindo essas transformações na Eq.3.41 teremos

$$H = \sum_{i,j} \sum_{q,q'} A_{ij} \psi_q^{i*} \psi_{q'}^j a_q^\dagger a_{q'}, \quad (3.44)$$

que leva o Hamiltoniano a uma forma diagonal

$$H = \sum_q E_q a_q^\dagger a_q, \quad (3.45)$$

se as autofunções satisfizerem a seguinte equação de autovalores

$$E_q \psi_q^i = \sum_j A_{ij} \psi_q^j. \quad (3.46)$$

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

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'} \quad (3.47)$$

$$[a_q, a_{q'}] = [a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] = 0. \quad (3.48)$$

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

$$\sum_i \psi_q^i \psi_{q'}^{i*} = \delta_{qq'} \quad (3.49)$$

$$\sum_q \psi_q^i \psi_q^{j*} = \delta_{ij}. \quad (3.50)$$

A transformação geral Eq.3.42 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 $\psi_q^i = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$ é solução da Eq.3.46. Assim as transformações Eq.3.42 são as transformadas de Fourier

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \quad (3.51)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}. \quad (3.52)$$

E as relações de completeza e ortogonalidade das autofunções nos fornecem

$$\sum_i e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}_i} = N \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \quad (3.53)$$

$$\sum_q e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} = N \delta_{ij}. \quad (3.54)$$

Com essas definições o Hamiltoniano Eq.3.41 fica

$$H = \sum_q A_q a_q^\dagger a_q, \quad (3.55)$$

onde $A_q = S[h_0 + J(0) - \lambda \gamma(\vec{q})]$ é a transformada de Fourier dos coeficientes A_{ij} , sendo que $\gamma(\vec{q}) = \sum_j J_{ij}^z e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$, e $\lambda = J^{xy}/J^z$. Podemos ver que $A_q = E(q)$ são autoenergias desse Hamiltoniano e são chamadas de magnons.

O fator $\gamma(\vec{q})$ é fundamental pois é ele quem caracteriza a rede que iremos trabalhar e também determina o número de vizinhos. Dessa forma, podemos escrever $\gamma_s(\vec{q}) = z_1 \eta(\vec{q})$, onde

$$\eta(\vec{q}) = \frac{1}{z_1} \sum_{\delta} e^{i\vec{q} \cdot \delta}, \quad (3.56)$$

e para o caso de uma rede quadrada simples, $z_1 = 4$ (primeiros vizinhos), teremos

$$\eta(\vec{q}) = \frac{1}{4} \left[\sum_{\delta} e^{iq_x a} + e^{-iq_x a} + e^{iq_y a} + e^{-iq_y a} \right]. \quad (3.57)$$

Usaremos a relação de Euler para desenvolver $\eta(\vec{q})$ e obteremos

$$\eta(\vec{q}) = \frac{1}{2} [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)], \quad (3.58)$$

e

$$\gamma_s(\vec{q}) = 2 [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]. \quad (3.59)$$

A energia correspondente para as ondas de spin em propagação em um sistema onde não ocorre interação entre átomos de redes distintas é dada por

$$E_l(q) = S[h_0 + J_l^z \gamma(0) - \lambda J_l^z \gamma(q)], \quad (3.60)$$

com $l = s, t$ que corresponde as redes quadrada e triangular, respectivamente.

Finalmente, a energia para as ondas de spin se propagando em uma rede quadrada fica

$$E_s(q) = S[h_0 + 4J_s^z - 2\lambda J_s^z (\cos q_x a + \cos q_y a)]. \quad (3.61)$$

Para a rede triangular, teremos $z_1 = 6$ (seis primeiros vizinhos). Escreveremos η da seguinte forma

$$\begin{aligned} \eta(\vec{q}) = & \frac{1}{6} \left[e^{iq_y a} + e^{-iq_y a} + e^{i(q_x a \sqrt{3}/2 + q_y a/2)} + e^{-i(q_x a \sqrt{3}/2 + q_y a/2)} \right. \\ & \left. + e^{i(q_x a \sqrt{3}/2 - q_y a/2)} + e^{-i(q_x a \sqrt{3}/2 - q_y a/2)} \right] \end{aligned} \quad (3.62)$$

Usando a relação de Euler para desenvolver a Eq.3.62, obteremos

$$\eta(\vec{q}) = \frac{1}{6} \left[2 \cos(q_y a) + 4 \cos(q_x a \sqrt{3}/2) \cos(q_y a/2) \right]. \quad (3.63)$$

Finalmente poderemos escrever $\gamma_i(\vec{q})$ da seguinte maneira

$$\gamma_i(\vec{q}) = 2 \left[\cos(q_y a) + 2 \cos(q_x a \sqrt{3}/2) \cos(q_y a/2) \right], \quad (3.64)$$

e montaremos a energia das ondas de spin propagando-se em uma rede triangular da seguinte maneira

$$E_t(q) = S[h_0 + 6J_t^z - 2\lambda J_t^z \left[\cos(q_y a) + 2 \cos(q_x a \sqrt{3}/2) \cos(q_y a/2) \right]]. \quad (3.65)$$

3.4 Ondas de Spin em Redes Decoradas

Iremos estudar o espectro de energia de ondas de spin em diversas redes bidimensionais. Primeiramente vamos analisar os casos da rede quadrada apenas com as variações dos valores do parâmetro λ . Em seguida iremos estudar dois casos de redes decoradas. O primeiro caso a ser estudado será o de duas redes quadradas interpenetradas que também pode ser visto como uma rede quadrada com corpo centrado deslocado. Depois analisaremos uma rede triangular, em seguida uma rede triangular decorada. 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 [98–100], e podemos mencionar, também: o modelo da rede kagomé triangular XXZ -Ising (modelo $TKLXXZ$ -Ising) formado pela inserção de pequenos triângulos (“a-trímeros”) com XXZ spin-1 dentro dos triângulos da rede kagomé (“b-trímeros”). Esse novo sistema de spin misto que pode ser resolvido exatamente transformando-se na rede kagomé com o método de transformação geral para sistemas de spin decorados [101]. Podemos observar diferentes comportamentos físicos relacionados a redes decoradas, dentre vários comportamentos podemos citar, também, a análise de propriedades magnéticas de redes decoradas do tipo kagomé 2D descritas pelo modelo de Ising, as quais foram estudadas fazendo uso da teoria de campo efetivo com correlações [102]. Encontra-se, também, na literatura o estudo de propriedades magnetoelásticas em redes planares decoradas, fazendo uso do modelo Ising-Heisenberg [103]. Além disso, podemos citar a investigação do processo de magnetização no modelo de Ising-Heisenberg de spin 1/2 resolvido exatamente para o caso da rede de Bethe decorda [104].

4 RESULTADOS

4.1 Rede Quadrada e Rede Triangular

Lembrando que para o caso de uma rede quadrada simples, temos $\gamma_s(q) = 2[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]$ de acordo como foi obtido na Eq.3.59. Para a rede triangular obtemos $\gamma(q) = 2[\cos(q_y a) + 2\cos(q_x a \sqrt{3}/2) \cos(q_y a)]$ de acordo com a Eq.3.64. Relembrando que a energia correspondente para as ondas de spin em propagação, de acordo com a Eq. 3.60, é dada por

$$E_l(q) = S[h_0 + J_l^z \gamma(0) - \lambda J_l^z \gamma(q)], \quad (4.1)$$

com $l = s, t$.

Para uma comparação futura, a relação de dispersão da onda de spin para o modelo anisotrópico de Heisenberg em uma rede quadrada (Fig.10) e triangular (Fig.11) é mostrada nas Figs. 9 (a) e (b), respectivamente, para caminhos diferentes na zona de Brillouin. O espectro da onda de spin para ambas as redes é muito diferente do esperado, mas há algo em comum. À medida que os sistemas se tornam mais semelhantes, a dispersão está se achatando, e no ponto Γ , no limite do comprimento de onda longo, $E \propto q^2$.

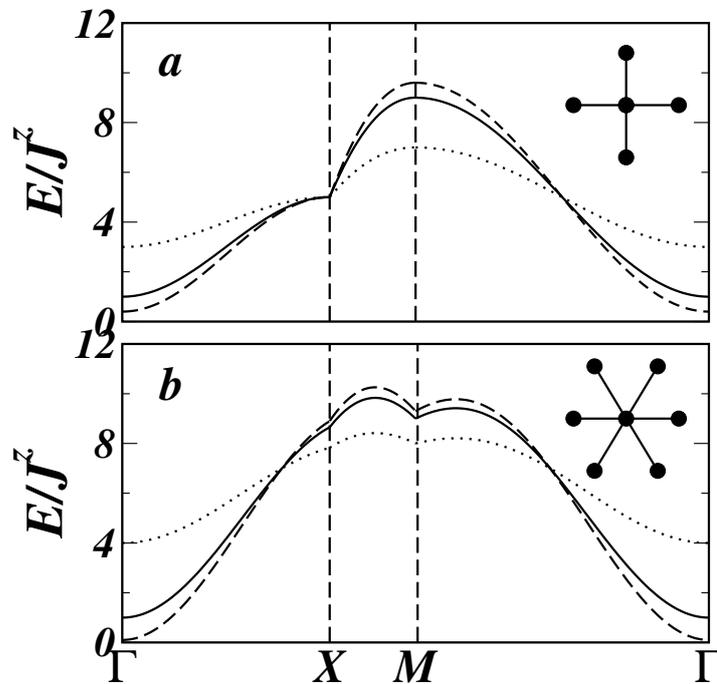


Figura 9: Relação de dispersão para a rede quadrada anisotrópica para três valores diferentes de λ . a) rede quadrada, b) rede triangular. Linhas sólidas são para $\lambda = 1.0$, linhas pontilhadas $\lambda = 0.5$, e linhas tracejadas $\lambda = 1.15$

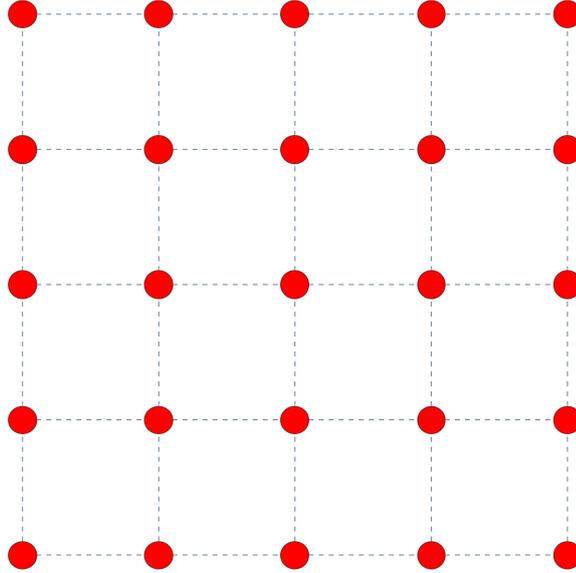


Figura 10: Rede Quadrada.

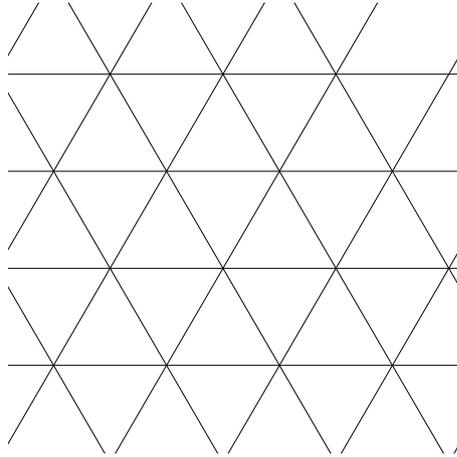


Figura 11: Rede Triangular.

4.2 Redes Decoradas

De acordo com os resultados que obtivemos no artigo que publicamos, sobre ondas de spin em redes decoradas [105], apresentaremos, aqui, o cálculo genérico utilizado para qualquer rede cuja decoração seja a superposição 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 das sub-redes a , b , e da interação entre elas. Os termos de cada sub-rede já foram calculados no capítulo anterior.

$$H^\ell = \sum_q A_q^\ell a_q^\dagger a_q, \quad (4.2)$$

onde $A_q^\ell = S [h_0^\ell + \gamma^\ell(0) - \lambda^\ell \gamma^\ell(q)]$, e $\ell = a, b$. Para a interação entre as sub-redes o Hamiltoniano é dado por

$$H^I = - \sum_{ij} \left[J_{ij}^{xyI} (S_i^{xa} S_j^{yb} + S_i^{ya} S_j^{xb}) + J_{ij}^{zI} S_i^{za} S_j^{zb} \right]. \quad (4.3)$$

Calculando agora os produtos da equação acima

$$S_i^{xa} S_j^{xb} = \frac{S}{2}(a_i b_j + a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger), \quad (4.4)$$

$$S_i^{ya} S_j^{yb} = -\frac{S}{2}(a_i b_j - a_i b_j^\dagger - a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger), \quad (4.5)$$

$$S_i^{xa} S_j^{xb} + S_i^{ya} S_j^{yb} = S(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j) \quad (4.6)$$

$$S_i^{za} S_i^{zb} = -S(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j). \quad (4.7)$$

Dessa forma temos que

$$H^I = -S \sum_{ij} \left[J_{ij}^{xyI} (a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j) - J_{ij}^{zI} (a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j) \right] \quad (4.8)$$

Transformando os operadores de campo a_i e a_i^\dagger em operadores de modos coletivos normais a_q e a_q^\dagger podemos escrever o Hamiltoniano total

$$H = \sum_q \left(A_q a_q^\dagger a_q + B_q b_q^\dagger b_q + C_q a_q^\dagger b_q + D_q a_q b_q^\dagger \right), \quad (4.9)$$

onde

$$\begin{aligned} A_q &= S \left[h_0^a + J^a(0) + J^I(0) - \lambda^a J^a(q) \right], \\ B_q &= S \left[h_0^b + J^b(0) + J^I(0) - \lambda^b J^b(q) \right], \\ C_q &= -S \lambda^I J^I(q), \\ D_q &= C_q^*. \end{aligned}$$

4.2.1 Duas redes quadradas superpostas

Duas redes quadradas que interpenetram-se, mas não ficam completamente sobrepostas. A distância entre os sítios da rede é o nosso parâmetro de controle. Nas Figs.12 e 13 ilustramos a interpenetração das duas redes quadradas.

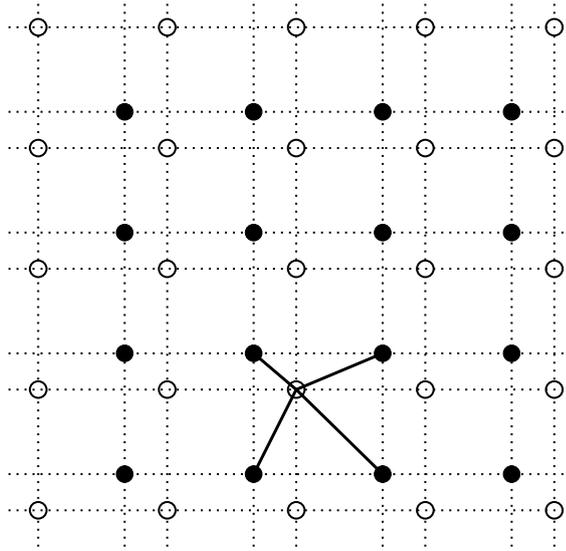


Figura 12: Duas redes quadradas interpenetradas

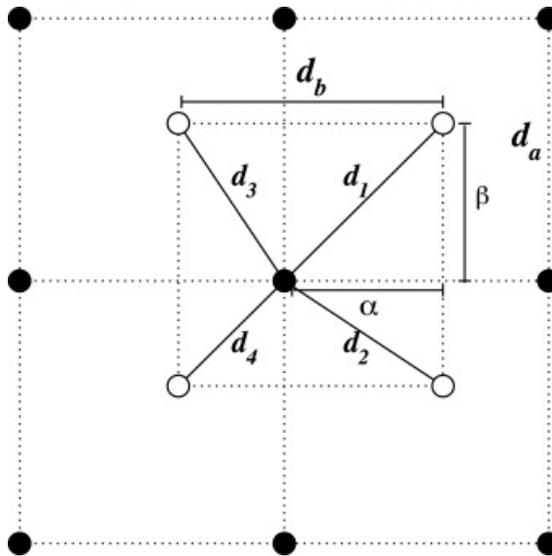


Figura 13: Duas redes quadradas interpenetradas

Na forma mais geral, os sítios da mesma rede a (b) possuem 4 primeiros vizinhos com distância d_a (d_b) enquanto que entre as redes a e b cada sítio também possui 4 primeiros vizinhos com as seguintes distâncias (ver Figs.12 e 13)

$$d_1 = d_a \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad (4.10)$$

$$d_2 = d_a \sqrt{\alpha^2 + (d_r - \beta)^2}, \quad (4.11)$$

$$d_3 = d_a \sqrt{(d_r - \alpha)^2 + \beta^2}, \quad (4.12)$$

$$d_4 = d_a \sqrt{(d_r - \alpha)^2 + (d_r - \beta)^2}. \quad (4.13)$$

Aqui α e β são os parâmetros que localizam uma rede com relação a outra, e existem no

intervalo $0 \leq \alpha \leq 1, 0 \leq \beta \leq 1$, com o vínculo $0 < (\alpha + \beta) < 2$. Isso garante que uma rede não será totalmente superposta a outra e $d_r = d_b/d_a$.

Os fatores de estrutura são

$$\begin{aligned} J^a(q) &= J^{za} \left(e^{iq_y d_a} + e^{-iq_y d_a} + e^{iq_x d_a} + e^{-iq_x d_a} \right), \\ J^b(q) &= J^{zb} \left(e^{iq_y d_b} + e^{-iq_y d_b} + e^{iq_x d_b} + e^{-iq_x d_b} \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} J^I(q) &= J_1^I \left(e^{-iq_x \alpha d_a - iq_y \beta d_a} \right) + \\ &J_2^I \left(e^{-iq_x \alpha d_a + iq_y d_a (d_r - \beta)} \right) + \\ &J_3^I \left(e^{iq_x d_a (d_r - \alpha) - iq_y \beta d_a} \right) + \\ &J_4^I \left(e^{iq_x d_a (d_r - \alpha) + iq_y d_a (d_r - \beta)} \right), \end{aligned} \quad (4.15)$$

com $\gamma^I(0) = \sum_i J_i^I$. As interações dependem das distâncias da seguinte forma $J_i^I = J^I/d_i$, onde $i = 1, 2, 3, 4$. Mais uma vez nosso objetivo é diagonalizar o Hamiltoniano da rede decorada definido pela Eq.4.9. Para isso vamos definir as seguintes matrizes

$$\tilde{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

com

$$\tilde{\mathcal{A}}^\dagger = \begin{pmatrix} a_q^\dagger & b_q^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Agora podemos então escrever o Hamiltoniano da seguinte forma

$$H = \sum_q \tilde{\mathcal{A}}^\dagger \tilde{\mathcal{X}} \tilde{\mathcal{A}}, \quad (4.18)$$

onde

$$\tilde{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix} A_q & C_q \\ D_q & B_q \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

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

$$E(q) = \frac{1}{2}(A_q + B_q) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(A_q - B_q)^2 + 4|C_q|^2}, \quad (4.20)$$

A partir da Eq.4.20 vemos facilmente que para o caso de interações entre as redes a e b existem dois ramos de energia, um para cada rede. Quando a interação está ativada a Fig.14 mostra a dispersão de energia quando o sistema está interagindo. Na Figura, a linha sólida representa um sistema Heisenberg, $\lambda = 1$, enquanto a linha tracejada é um sistema mais próximo do tipo Ising $\lambda = 0.5$. Em cada painel pode-se ver dois ramos de energia, onde o sinal positivo presente na Eq.4.20 representa a curva superior enquanto a linha inferior representa o

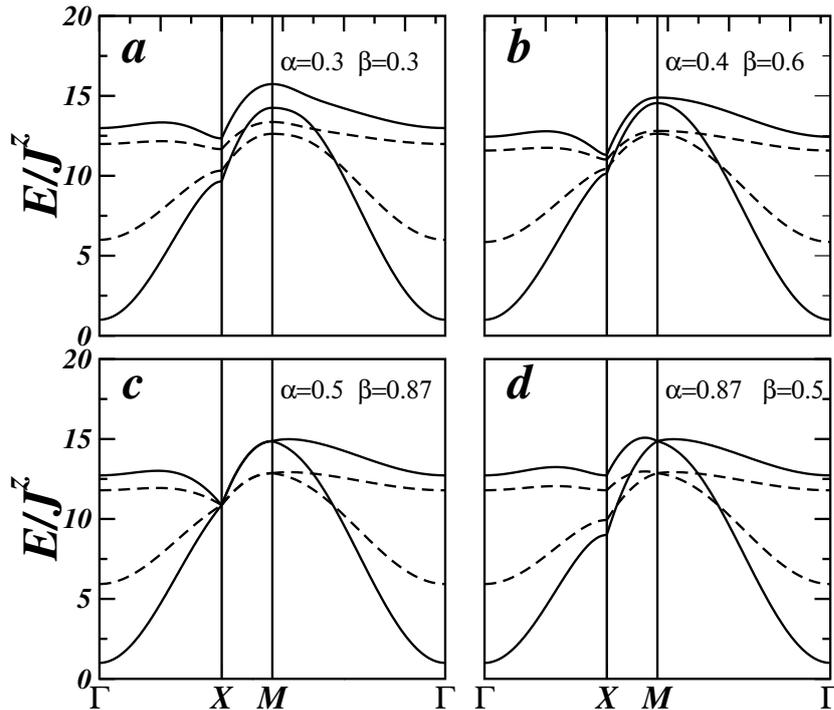


Figura 14: Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas de Heisenberg puros ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais próximo do tipo Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$)

sinal negativo. É interessante notar que dependendo da posição das duas redes a e b os ramos não se cruzam em todos os painéis, há uma degeneração completa dos modos no caminho de X para M no painel c , e eles cruzam em um ponto das linhas sólidas no painel d .

É interessante observar o comportamento da relação de dispersão ao considerar apenas a interação entre as duas redes, ou seja, $\gamma^a = \gamma^b = 0$. Isto é mostrado na Fig.15. Aqui usamos os mesmos parâmetros da Fig.14. E, novamente, a linha sólida é para o sistema Heisenberg e a linha tracejada é para o sistema mais parecido com o de Ising. Os modos das ondas de spin são simétricos e têm um comportamento muito diferente do caso anterior. No entanto, a degenerescência de um ponto e uma degenerescência de caminho inteiro ainda estão lá nos painéis d e c , respectivamente.

Para ter uma visão mais geral do comportamento das energias, a Fig.16 mostra o gráfico de contorno das energias para duas redes sobrepostas $\alpha = 0.3$ e $\beta = 0.3$. Os painéis superiores mostram a energia das ondas de spin com todas as interações de troca $\lambda^{a,b,l}$, diferentes de zero, enquanto os painéis inferiores mostram a energia das ondas de spin com apenas a interação de troca entre as redes J^l diferente de zero. Os painéis esquerdos mostram a energia das ondas de spin do ramo superior, enquanto os painéis direitos mostram a energia das ondas de spin do ramo inferior. Além disso, a energia aumenta do azul para o vermelho. É interessante notar que o gráfico de contorno mostra alguma semelhança com a simetria da rede quadrada.

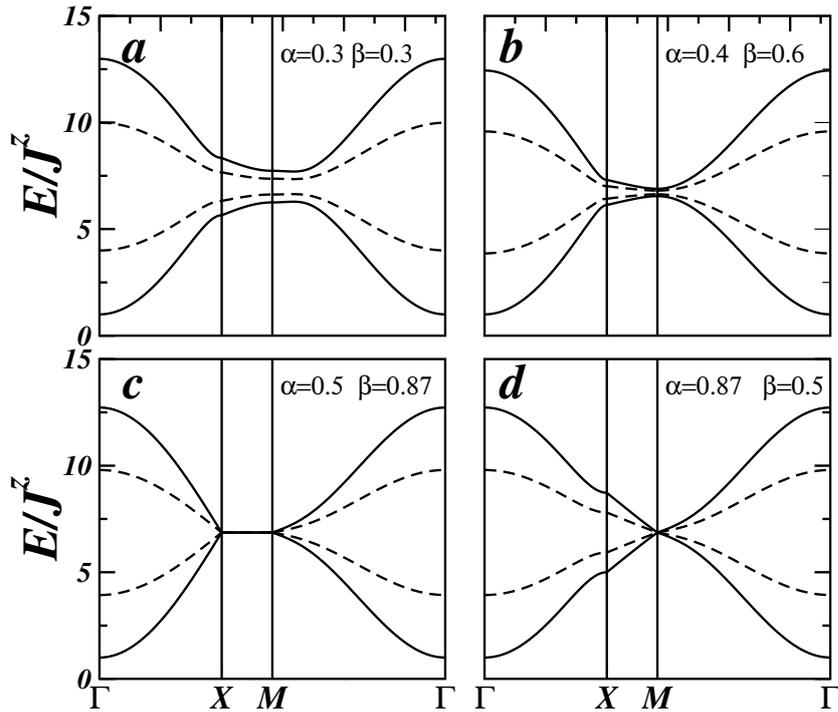


Figura 15: Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas de Heisenberg puros ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$

Os painéis inferiores refletem perfeitamente a simetria dos modos das ondas de spin mostrados na Fig.15. Também podemos observar um comportamento não parabólico próximo ao ponto M na zona de Brillouin. No entanto, para a energia das ondas de spin do ramo superior, com todas as constantes de troca diferentes de zero, não podemos mais observar claramente a simetria quadrática.

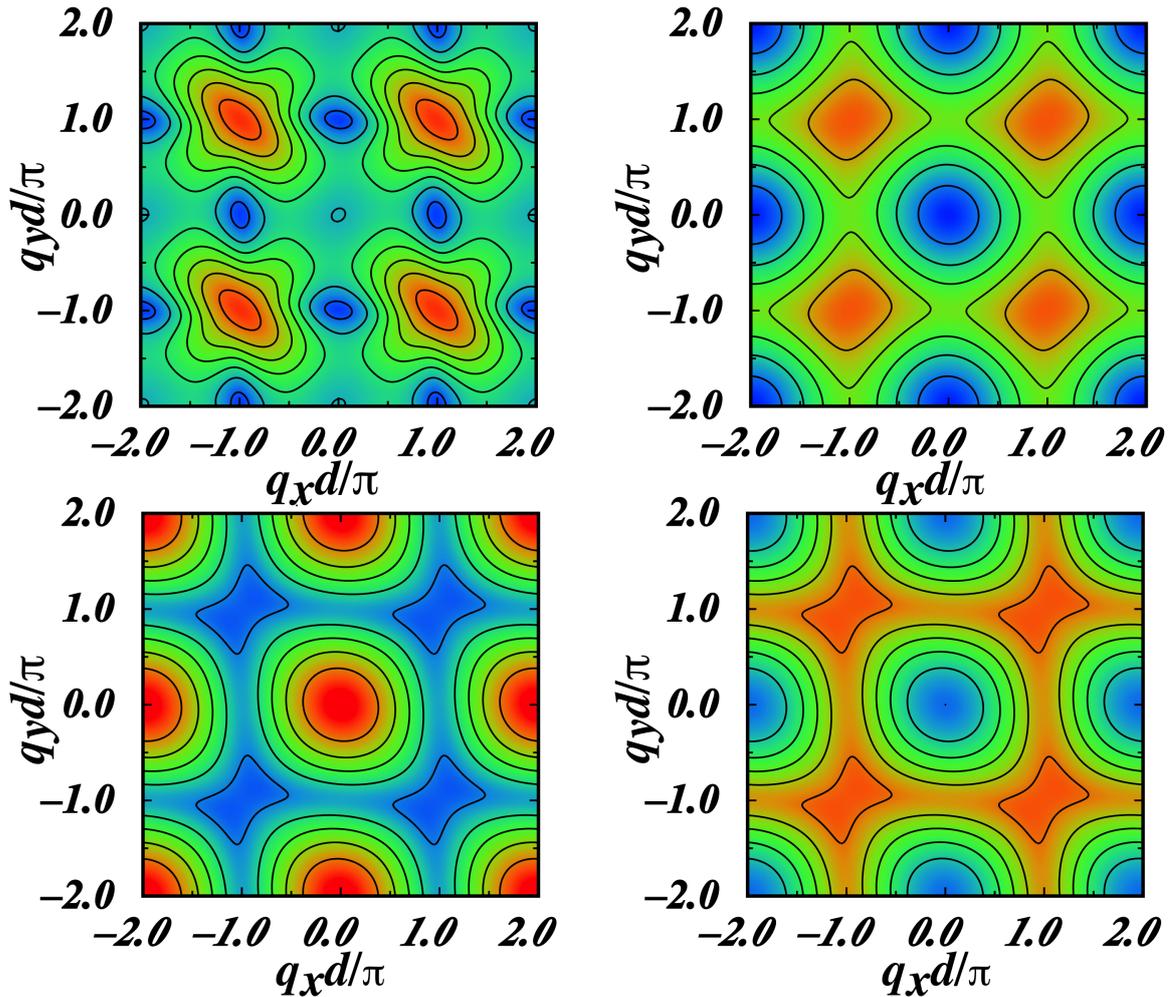


Figura 16: O gráfico de contorno da energia das ondas de spin. Para dois arranjos espaciais diferentes das redes. O painel superior para $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.87$, o painel inferior $\alpha = 0.87$ e $\beta = 0.5$. O painel esquerdo mostra o ramo superior, enquanto o painel direito mostra o ramo inferior da dispersão. As energias crescem do azul para o vermelho.

Na Fig.17 mostramos o comportamento das energias das ondas de spin ao variar a posição da rede b . Fixamos o parâmetro de altura que permitia que a posição horizontal variasse de 0.2 a 0.8. Novamente, consideramos aqui o caso com todas as interações do painel superior e apenas J^z no painel inferior. Podemos observar uma simetria da energia das ondas de spin em torno de $\alpha = 0.5$, que está relacionada à simetria de translação da rede quadrada. Pode-se observar também a forte variação da energia das ondas de spin do ramo inferior em função de $q_x d / \pi$ de acordo com a Fig.14. Além disso, os painéis inferiores refletem a simetria de energia das ondas de spin entre as ramificações superior e inferior observada na Fig.15.

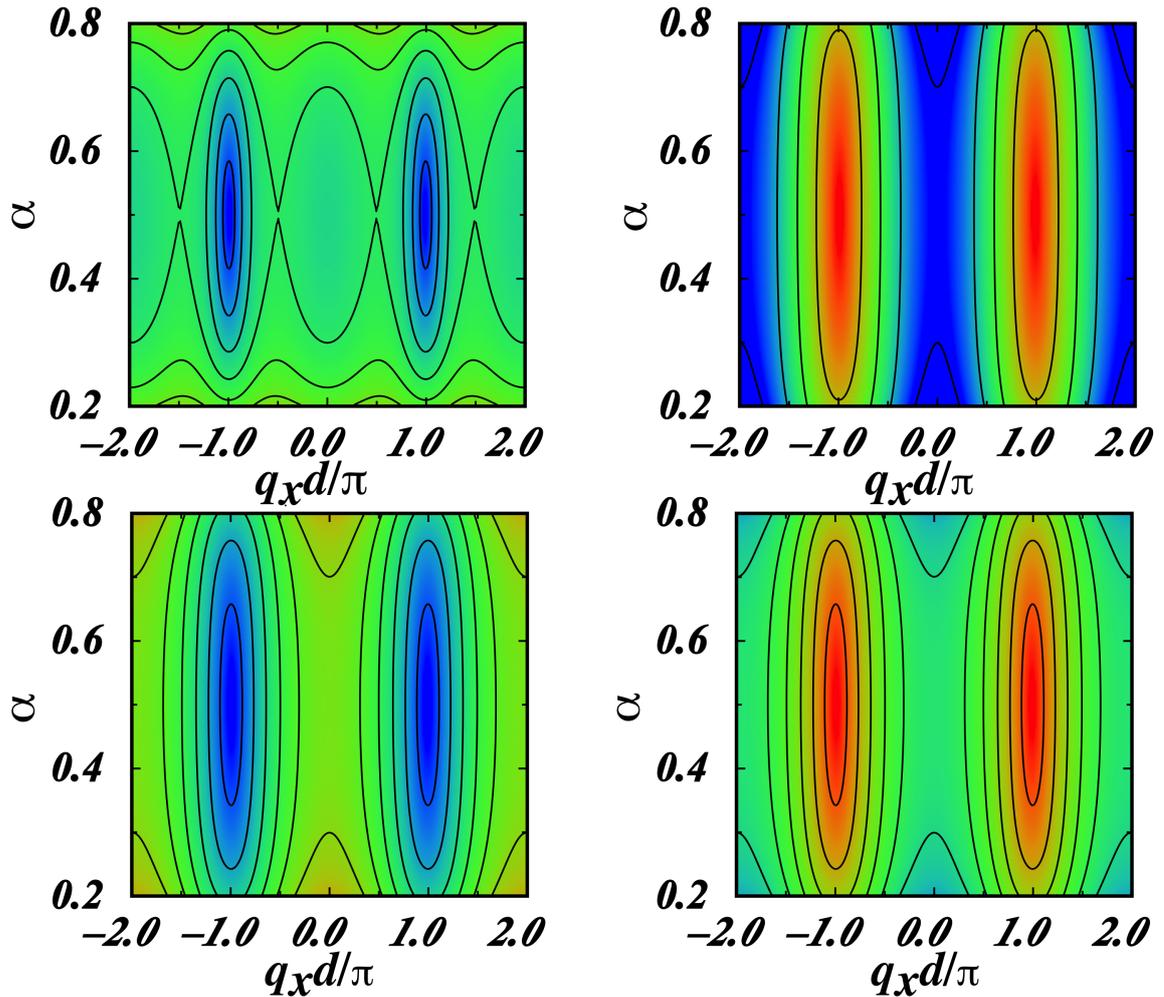


Figura 17: O gráfico de contorno das ondas de spin para o mesmo sistema da Fig. 16. Mas agora estamos deslocando uma das redes. Aqui $\beta = 0.3$, e $q_y d_a / \pi = 0$.

4.2.2 Duas redes triangulares interpenetradas

Vamos agora abordar o caso de duas redes a e b triangulares interpenetrantes como é mostrado na Fig.18. Os pontos pretos representam os sítios da rede a e os pontos brancos representam os sítios da rede b . Como no caso da rede quadrada, consideramos um sistema de Heisenberg puro (linha sólida, $\lambda = 1$) e um sistema semelhante a Ising (linha tracejada, $\lambda = 0.5$), com interação entre sítios pertencentes a redes distintas (J^{ab}) e interações entre sítios pertencentes a mesma rede (J^{aa}, J^{bb}). Quatro arranjos diferentes das redes, correspondendo a 4 pares (α, β) , foram considerados. Como se pode ver na Fig.19, os espectros de energia das ondas de spin do sistema ainda mantêm algumas das características da rede triangular pura (ver Fig.9). Em comparação com o caso da rede quadrada decorada, duas diferenças principais podem ser notadas: (i) os dois ramos das ondas de spin não se cruzam, o que significa que não há degeneração, não importa o par (α, β) e o caminho da zona de Brillouin; (ii) a posição relativa das duas redes tem um forte efeito na diferença de energia entre os ramos superior e

inferior (ver, por exemplo, o painel *d* da Fig.19).

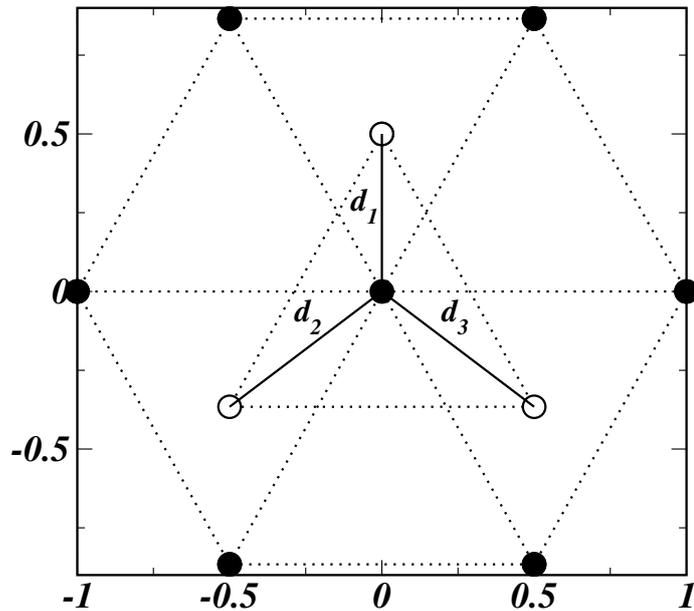


Figura 18: Duas redes triangulares superpostas.

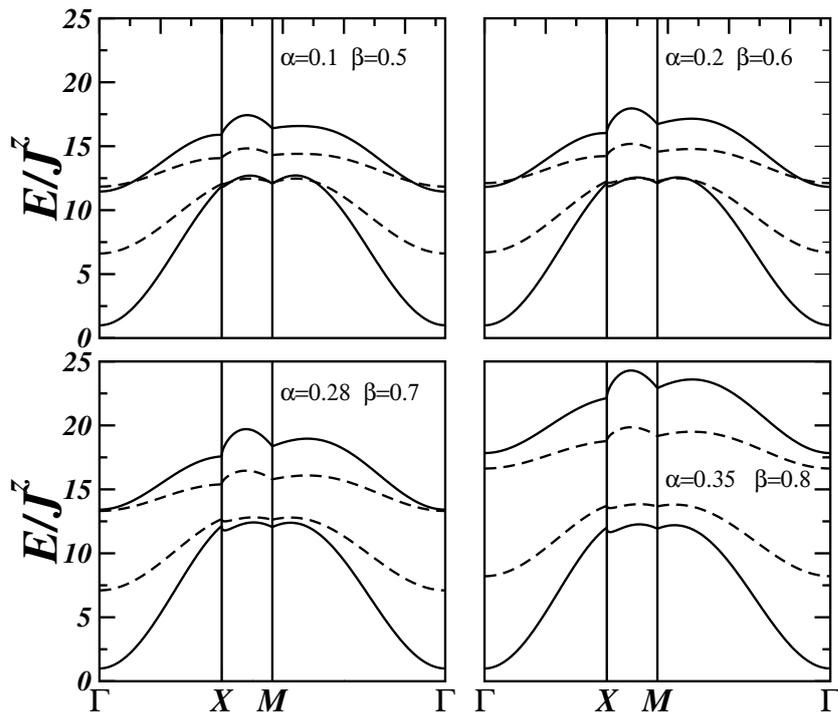


Figura 19: Relação de dispersão de duas redes triangulares interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas puros de Heisenberg ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$.

A Fig.20 mostra a dispersão das ondas de spin para a situação com apenas interação entre redes, ou seja, $\lambda_a = \lambda_b = 0$. Dependendo do deslocamento relativo das redes, esta configuração pode corresponder à rede de um favo de mel. Podemos observar que em todos os painéis os modos de vibração das ondas de spin apresentam uma simetria espelhada, como o caso da rede quadrada decorada, mas não em torno de um valor específico de E/J^z . Semelhante ao que foi observado na Fig.19, os ramos superior e inferior dos modos de vibração das ondas de spin não se cruzam de forma alguma (sem degeneração) e a posição relativa das duas redes tem forte efeito na diferença de energia entre os dois ramos, principalmente para $(\alpha = 0.35, \beta = 0.8)$.

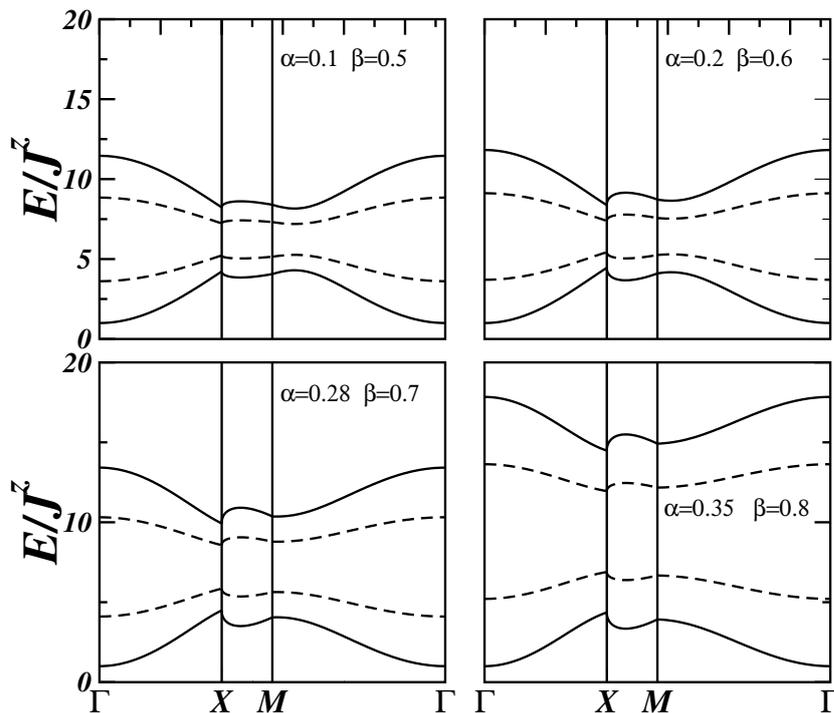


Figura 20: Relação de dispersão de duas redes quadradas interagindo para quatro arranjos diferentes da posição das redes. As linhas sólidas são os sistemas puros de Heisenberg ($\lambda^a = \lambda^b = 1$), enquanto as linhas tracejadas representam um sistema mais parecido com o de Ising ($\lambda^a = \lambda^b = 0.5$). Nesse caso, $J^{za} = J^{zb} = 0$

A Fig.21 mostra o gráfico de contorno da energia das ondas de spin do sistema composto por duas redes triangulares interpenetrantes, para interações puras (painéis inferiores) e interação entre redes apenas (painéis superiores), para o caso específico $(\alpha = 0, \beta = 0.57)$. Esta configuração corresponde exatamente a uma estrutura em favo de mel. Como antes, os painéis da esquerda mostram o ramo superior das ondas de spin e os painéis da direita mostram o ramo inferior das ondas de spin. Em ambos os casos, a energia aumenta do azul para vermelho. Podemos observar que o gráfico de contorno dos painéis superiores (com interação entre redes apenas) mostra semelhança com a simetria da rede do favo de mel. No entanto, semelhante ao sistema de rede quadrada decorada, quando todas as interações de troca são consideradas (caso de interação completa), painéis inferior, a simetria da rede do favo de mel não é mais refletida.

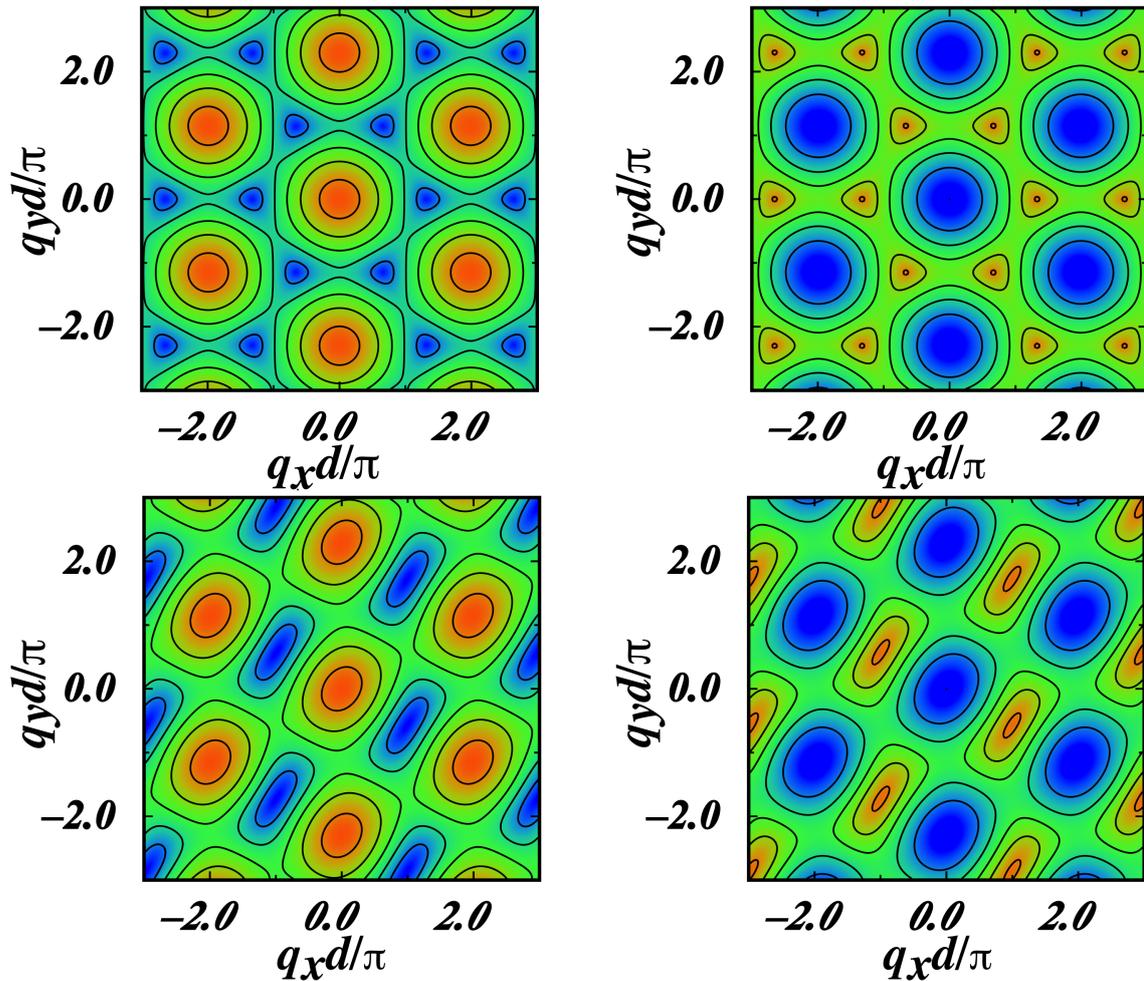


Figura 21: O gráfico de contorno da energia das ondas de spin. Para dois arranjos espaciais, diferentes, das redes. O painel superior para $J^{za} = J^{zb} = 0$, no painel inferior, a interação completa é considerada. O painel esquerdo mostra o ramo superior, enquanto o painel direito mostra o ramo inferior da dispersão, e tomamos $\alpha = 0$ e $\beta = 0.57$. As energias crescem de azul para o vermelho.

A fim de completar nossa análise das redes triangulares decoradas, a Fig.22 mostra o comportamento da energia das ondas de spin, em função da posição da rede b , para β fixo (deslocamento vertical) e α variável (deslocamento horizontal) de 0.4 a 0.7. Os painéis da esquerda mostram o ramo superior das ondas de spin e os painéis da direita mostram o ramo inferior das ondas de spin. Novamente, o caso com todas as interações é descrito no painel superior e o caso com apenas $J^z = 0$ é descrito no painel inferior. Em contraste com Fig.17, não há simetria em torno de qualquer valor de α . A simetria é, neste caso, cerca de $q_x d_a / \pi = 0.0$. Como no caso da estrutura de rede decorada, os painéis inferiores refletem a simetria entre os ramos superiores e inferiores das ondas de spin correspondentes à situação com apenas interações de troca entre redes. Também se pode observar a forte variação da energia das ondas de spin do ramo inferior em função de $q_x d_a / \pi$ de acordo com a Fig.19.

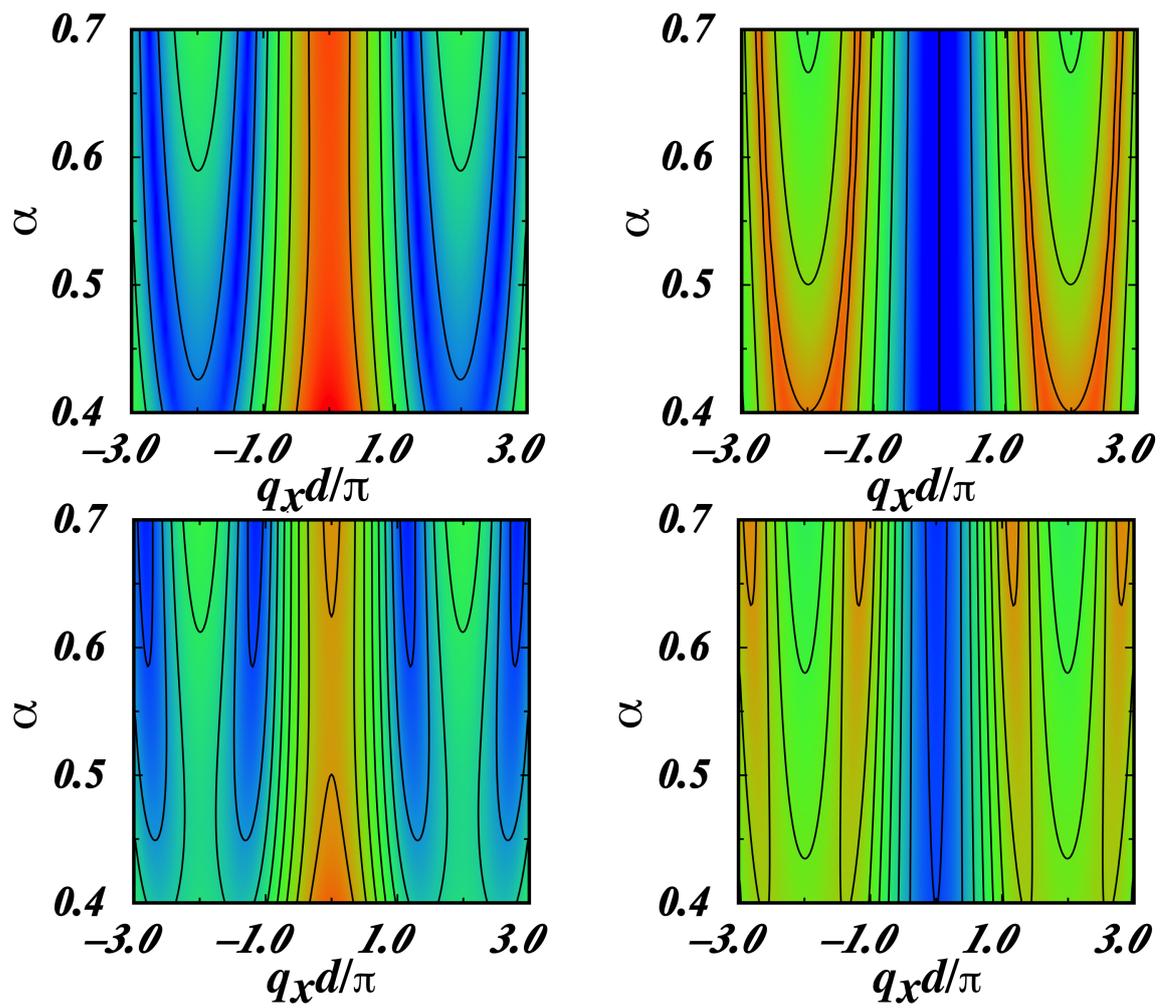


Figura 22: O gráfico de contorno das ondas de spin para o mesmo sistema da Fig. 16. Mas agora estamos deslocando uma das redes. Para $\alpha = 0$, e $q_y d_a / \pi = 0$.

5 CONCLUSÕES

Em síntese, no presente trabalho realizamos um estudo sobre o Modelo de Heisenberg XXZ para investigar os espectros da relação de dispersão de ondas de spin se propagando em redes planas quadradas e triangulares. O formalismo aplicado aqui nos permite gerar várias redes decoradas com mais de um átomo por célula unitária. Usando a transformação Holstein-Primakoff, obtivemos a relação de dispersão das ondas de spin do sistema composto por duas redes planas interpenetrando-se. Para o caso das redes quadradas decoradas nossos resultados mostram a presença de degeneração dos modos ao longo do caminho de X para M na zona de Brillouin. Para a situação com apenas energia de troca entre redes, os modos de vibração das ondas de spin apresentam uma simetria em torno $E/J^z = 0.7$, também com degeneração ao longo do caminho de X para M . Os gráficos de contorno dos modos de vibração das ondas de spin mostram uma simetria semelhante aos da rede quadrada quando apenas o acoplamento de troca entre redes é diferente de zero. No entanto, quando todas as interações de troca estão presentes, os gráficos de contorno não refletem mais a simetria quadrada da rede. No entanto, uma simetria pode ser observada no gráfico de contorno de energia em função do deslocamento horizontal α . Em contraste, a ausência de degenerescência é observada para o caso das redes triangulares decoradas. Não importa a situação, com todos os acoplamentos de troca diferentes de zero ou a situação com apenas interações entre redes. Em particular, para as redes triangulares decoradas, a diferença de energia entre os ramos superiores e inferiores são pronunciados. Além disso, para o único caso de interação entre redes, uma simetria está presente, mas não ao redor de um valor específico E/J^z . Quanto ao caso da rede quadrada decorada, os gráficos de contorno mostram uma simetria correspondente ao da rede favo de mel quando apenas as interações de troca entre redes são diferentes de zero. Pelo contrário, quando todas as interações de troca são diferentes de zero, a simetria da rede favo de mel é perdida. Também em contraste com o caso da rede quadrada, os gráficos de contorno de energia não apresentam simetria em torno do parâmetro α , mas em torno de $q_x d/\pi = 0,0$. Devemos observar que o foco do presente trabalho está no deslocamento relativo das redes interpenetrantes em relação umas às outras. No entanto, as rotações também podem ser usadas neste formalismo, bem como alinhamento magnético diferente, como antiferromagnetismo, e ambos são assuntos de uma publicação futura.

REFERÊNCIAS

- [1] SAKURAI, J. J. *Advanced quantum mechanics*. Addison Wesley, 1967. ISBN 9780201067101-0201067102. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=F95EFA7108911F08604462D3F22287BD>.
- [2] <https://slideplayer.com.br/slide/359075/>. Acesso: 09-01-2021.
- [3] <https://www.rug.nl/research/zernike/physics-of-nanodevices/research/magnonspintronics?lang=en>. Acesso: 09-01-2021.
- [4] <https://www.isis.stfc.ac.uk/Pages/A-spin-density-wave-state-in-strontium-ruthenate.aspx>. Acesso: 09-01-2021.
- [5] <http://skullsinthestars.com/2009/04/13/levitation-and-diamagnetism-or-leave-earnshaw-alone/>. Acesso: 09-01-2021.
- [6] <http://www.ne.jp/asahi/paleomagnetism.rock-magnetism/basics/rmag/atoms/atoms3E.html>. Acesso: 09-01-2021.
- [7] KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 8. ed. Wiley, 2004. ISBN 9780471415268. Disponível em: http://www.amazon.com/Introduction-Solid-Physics-Charles-Kittel/dp/047141526X/ref=dp_ob_title_bk.
- [8] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics (2nd Edition)*. 2nd. ed. [S.l.]: Pearson Prentice Hall. ISBN 0131118927.
- [9] MACHADO, K. *Eletromagnetismo*. Toda Palavra, 2016. v. 2. ISBN 9788562450303. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=hmEkngEACAAJ>.
- [10] NUSSENZVEIG, H. *Curso de Física Básica*. Edgard Bluncher. v. 3. ISBN 9788521208013. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=AtRCvgAACAAJ>.
- [11] NAVINDER, S.; ARUN, M. J. A brief history of magnetism. *arXiv: Popular Physics*, 2019.
- [12] COHEN, T. C.; DIU, B.; F., L. *Quantum mechanics*. [s.n.], 1996. v. 1. ISBN 9782705-658335. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=456B9DB3C774531BF3A4273646D1D564>.
- [13] EISBERG, R.; RESNICK, R. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. Wiley, 1985. ISBN 047187373X-9780471873730. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=32923D2C203749FAC77473F7AFD75286>.
- [14] SCHWABL, F. *Quantum mechanics*. 4th. ed. Springer, 2007. ISBN 9783540719328-3540719326. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=FA3E8FEC347BC96CCEC267ECCF4CF3B1>.
- [15] PHIPPS, T. E.; TAYLOR, J. B. The magnetic moment of the hydrogen atom. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 29, p. 309–320, Feb 1927. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.29.309>.

- [16] LIBOFF, R. L. *Introductory quantum mechanics*. Longman Higher Education, 1987. ISBN 9780201122213-0201122219. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=B19EA1E00B7756D88C339FCDCCE733EF>.
- [17] OLIVEIRA, I. *Introdução a Física do Estado Sólido*. [s.n.], 2005. ISBN 9788588325456. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=LsI3naqT7ZYC>.
- [18] FEYMAN, R. P. *The Feynman Lectures on Physics*. Addison Wesley Longman, 1970. v. 1. ISBN 0201021153-9780201021158. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=793942BED131DC6D773DBE202C0DCC2D>.
- [19] FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.; SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics*. [s.n.], 2011. v. 2. ISBN 9780465024940. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=D1DBB11081C26913D957411DF85CA330>.
- [20] RUDOLF, P. H. a. *Conductors, Semiconductors, Superconductors: An Introduction to Solid State Physics*. 1. ed. Springer International Publishing, 2015. (Undergraduate Lecture Notes in Physics). ISBN 978-3-319-09140-2-978-3-319-09141-9. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=1232250C514C6F5F6C16987E983D9866>.
- [21] SCHUBERT, C. *Magnetic Order and Coupling Phenomena: A Study of Magnetic Structure and Magnetization Reversal Processes in Rare-Earth-Transition-Metal Based Alloys and Heterostructures*. 1. ed. Springer International Publishing, 2014. (Springer Theses). ISBN 978-3-319-07105-3-978-3-319-07106-0. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=C15D6390E73D898107F95BED0C9D8C60>.
- [22] VEDENE, H. S. J.; BECKER, P. *Electron and Magnetization Densities in Molecules and Crystals*. 1. ed. Springer US, 1980. ISBN 978-1-4684-1020-4-978-1-4684-1018-1. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=12361ED8E757C5681CEB70ECCB395CB0>.
- [23] ASHCROFT, N. *Physique Des Solides [physics]*. EDP, 2002. ISBN 0-03-083993-9-2-86883-577-5. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=549365900c1aa8eff64b0a3ceadb8d4a>.
- [24] ABDULLAEV, F. K.; CAPUTO, M. P. J. G.; SORENSEN, A. H. *New Trends in Optical Soliton Transmission Systems: Proceedings of the Symposium held in Kyoto, Japan, 18–21 November 1997*. 1. ed. Springer Netherlands, 1998. ISBN 978-94-010-6161-2-978-94-011-5141-2. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=23cc6108cde472329cef0180b07f6ad5>.
- [25] SALINAS, R. A. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=cAIP3sc0K44C>.
- [26] HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 49, n. 9, p. 619–636, Sep 1928. ISSN 0044-3328. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01328601>.
- [27] BETHE, H. Zur theorie der metalle. *Zeitschrift für Physik*, v. 71, n. 3, p. 205–226, Mar 1931. ISSN 0044-3328. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01341708>.
- [28] YANG, C. N.; YANG, C. P. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. i. proof of bethe's hypothesis for ground state in a finite system. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 150, p. 321–327, Oct 1966. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.150.321>.

- [29] YANG, C. N.; YANG, C. P. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. ii. properties of the ground-state energy per lattice site for an infinite system. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 150, p. 327–339, Oct 1966. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.150.327>.
- [30] TAKHTADZHAN, L. A.; FADEEV, L. *The quantum method of the inverse problem and the Heisenberg XYZ model*. [s.n.], 1979. (Russ Math.Surv UMN 34). Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=C96B6ACDB279CF4152CA070F31294BF2>.
- [31] YANG, C. N.; YANG, C. P. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. iii. applications. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 151, p. 258–264, Nov 1966. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.151.258>.
- [32] ILAKOVAC, A. et al. Violation of the string hypothesis and the heisenberg XXZ spin chain. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 60, p. 7271–7277, Sep 1999. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.7271>.
- [33] PELED, R.; SPINKA, Y. *Lectures on the Spin and Loop $O(n)$ Models*. 2019.
- [34] KRAGG, H. In: _____. *Biographical Encyclopedia of Astronomers*. New York, NY: Springer New York, 2014. p. 1308–1309. ISBN 978-1-4419-9917-7. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9917-7_9323.
- [35] NISS, M. History of the lenz-ising model 1920–1950: From ferromagnetic to cooperative phenomena. *Archive for History of Exact Sciences*, v. 59, n. 3, p. 267–318, Mar 2005. ISSN 1432-0657. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00407-004-0088-3>.
- [36] PIERANGELI, D. et al. Noise-enhanced spatial-photonic ising machine. *Nanophotonics*, Walter de Gruyter GmbH, v. 9, n. 13, p. 4109–4116, May 2020. ISSN 2192-8606. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1515/nanoph-2020-0119>.
- [37] MCCOMB, W.; MCCOMB, S. *Renormalization Methods: A Guide For Beginners*. OUP Oxford, 2004. ISBN 9780198506942. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=OckTDAAAQBAJ>.
- [38] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>.
- [39] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 6, n. 7, p. 1181, 1973.
- [40] KOSTERLITZ, J. M. The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974.
- [41] PELED, R.; SPINKA, Y. *Lectures on the Spin and Loop $O(n)$ Models*. 2019.
- [42] JHA, R. G. Critical analysis of two-dimensional classical xy model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2020, n. 8, p. 083203, Aug 2020. ISSN 1742-5468. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/aba686>.

- [43] BIETENHOLZ, W.; GERBER, U. *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Transition and the Haldane Conjecture: Highlights of the Physics Nobel Prize 2016*. 2017.
- [44] LI, J.; RAU, C. Three-dimensional, spin-resolved structure of magnetic vortex and antivortex states in patterned Co films using scanning ion microscopy with polarization analysis. *Physical Review Letters*, v. 97, 09 2006.
- [45] WU, F.-Y. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.* 54, 1982.
- [46] OSBALDESTIN, A. H.; WOOD, D. W. Phase equilibrium in the three-state antiferromagnetic Potts model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 15, n. 11, p. 3593–3598, nov 1982.
- [47] GANIKHODJAEV, N.; MUKHAMEDOV, F.; PAH, C. H. Phase diagram of the three states Potts model with next nearest neighbour interactions on the Bethe lattice. *Physics Letters A*, v. 373, n. 1, p. 33 – 38, 2008. ISSN 0375-9601. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960108015739>.
- [48] GIBERTINI, M. et al. Magnetic 2d materials and heterostructures. *Nature Nanotechnology*, Springer Science and Business Media LLC, v. 14, n. 5, p. 408–419, May 2019. ISSN 1748-3395. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1038/s41565-019-0438-6>.
- [49] STANCIL, D.; PRABHAKAR, A. *Spin Waves: Theory and Applications*. Springer, 2009. ISBN 9780387778648. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=GGDSnQEACAAJ>.
- [50] WHITE, R. M. *Quantum Theory of Magnetism*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1983.
- [51] REZENDE, S. *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004. ISBN 9788588325272. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YN07KGEfrlYC>.
- [52] XU, Y.; AWSCHALOM, D.; NITTA, J. *Handbook of Spintronics*. Springer Netherlands, 2015. (Handbook of Spintronics). ISBN 9789400768918. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=UmAEmwEACAAJ>.
- [53] ANSELMO, D. H. A. *Espectro das ondas de spin lineares e não lineares em multicamadas magnéticas anisotrópicas*. Tese (Doutorado) — Centro de Ciências Exatas e da Terra, Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade do Rio Grande do Norte, Natal, 1999.
- [54] DEMOKRITOV, S. O. *Spin Wave Confinement*. [s.n.], 2008. ISBN 9814241067-9789814241069. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=f476f5e73acaa7b678ba791eae2f25f3>.
- [55] FUKUDA, Y. Electronic states in perturbed two-dimensional graphite lattice. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 20, n. 3, p. 353–358, 1965. Disponível em: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.20.353>.
- [56] KASTELEYN, P. W. Dimer Statistics and Phase Transitions. *Journal of Mathematical Physics*, v. 4, n. 2, p. 287–293, fev. 1963.

- [57] SALA, G. et al. *Van Hove singularity in the magnon spectrum of the antiferromagnetic quantum honeycomb lattice*. 2020.
- [58] RICHARDSON, N. V. et al. *Vibrational Spectroscopy of Molecules on Surfaces*. 1. ed. Springer US, 1987. (Methods of Surface Characterization 1). ISBN 978-1-4684-8761-9-978-1-4684-8759-6. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=e0f761189da1a4cc1a44cd7c66215c66>.
- [59] MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. Ising models of quantum frustration. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 63, p. 224401, May 2001. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.224401>.
- [60] PHANI, A.; WOODHOUSE, J.; FLECK, N. Wave propagation in two-dimensional periodic lattices. *The Journal of the Acoustical Society of America*, v. 119 4, p. 1995–2005, 2006.
- [61] MATSUSHITA, T. et al. Elastic and plastic behavior of a fluxoid lattice in the saturation region of the global pinning force in superconducting nb-ta. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 33, p. 3134–3138, Mar 1986. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.33.3134>.
- [62] MCQUISTAN, R.; HOCK, J. Transfer matrices for first-, second- and third-neighbor interactions on two-dimensional, hexagonal-cell lattices. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 175, n. 2, p. 305–326, 1991. ISSN 0378-4371. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437191904096>.
- [63] BUBLAT, T.; GOLL, D. Temperature dependence of the magnetic properties of 110-fept nanostructures and films. *Journal of Applied Physics*, v. 108, p. 113910–113910, Dec 2010.
- [64] BEZERRA, C. G.; COTTAM, M. G. Effects of the biquadratic exchange coupling on the localization and scaling laws of spin waves in fibonacci superlattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 65, p. 054412, Jan 2002. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.054412>.
- [65] WANG, Z. et al. Proximity-induced ferromagnetism in graphene revealed by the anomalous hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 114, p. 016603, Jan 2015. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.016603>.
- [66] SCHRANGHAMER, T. F.; OBEROI, A.; DAS, S. Graphene memristive synapses or high precision neuromorphic computing. *Nature Communications*, v. 11, p. 5474, out. 2020.
- [67] TOH, C.-T. et al. Synthesis and properties of free-standing monolayer amorphous carbon. *Nature*, v. 577, p. 199–203, 01 2020.
- [68] JIANG, Y. et al. Tuning a circular p–n junction in graphene from quantum confinement to optical guiding. *Nature Nanotechnology*, v. 12, n. 11, 9 2017. ISSN 1748-3387. Disponível em: <https://www.osti.gov/biblio/1539790>.
- [69] FILHO, R. N. C.; COTTAM, M. G.; FARIAS, G. A. Microscopic theory of dipole-exchange spin waves in ferromagnetic films: Linear and nonlinear processes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 62, p. 6545–6560, Sep 2000. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.6545>.

- [70] BRYANT, P.; JEFFRIES, C.; NAKAMURA, K. Spin-wave nonlinear dynamics in an yttrium iron garnet sphere. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 60, p. 1185–1188, Mar 1988. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.60.1185>.
- [71] DAVIS, E. *Quantum Theory of Open Systems*. Academic Press, 1976. ISBN 0122061500-9780122061509. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=28ba8b2e44a3b67b21828a66f576ac78>.
- [72] LI, G. *What is the Electron Spin?* Spin Pub, 2003. ISBN 9780974397498-0-9743974-9-0. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=4368ce54d0b94be94a410057a83b58bd>.
- [73] MADELUNG, O.; TAYLOR, B. *Introduction to Solid-State Theory*. Springer, 1978. (Springer Series in Solid-State Sciences). ISBN 0387085165-9780387085166-3540085165-9783540085164-354060443X-9783540604433. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=4266273837ae0e15793e410b5ff4129b>.
- [74] ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. S. *Molecular Quantum Mechanics*. 3rd ed. ed. Oxford University Press, 1999. ISBN 9780198559474-019855947X-0198559488. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=a689fe7117aa7e942ce1793c6f259cf8>.
- [75] GREINER, W.; BROMLEY, D. *Quantum Mechanics: Special Chapters*. Springer, 2004. ISBN 3540600736-9783540600732. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=cf8d6262223cdc4e0c9018079108dc1d>.
- [76] BARS, I. *Quantum mechanics*. book draft. [s.n.], 2005. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=e8eb5acb811def89c2ba9aa26e6ed5b3>.
- [77] DUAN, F.; GUOJUN, J. *Introduction to condensed matter physics*. WS, 2005. Volume 1. ISBN 9812387100. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=96fae2d9eb2d1d9a0854af79567352c5>.
- [78] WHITE, R. M. *Quantum theory of magnetism: magnetic properties of materials*. 3rd, completely rev. ed. ed. Springer, 2007. (Springer series in solid-state sciences). ISBN 9783540651161-3-540-65116-0. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=2993e3de5490daf7fa175823c8cf7ff6>.
- [79] BLUNDELL, S. *Magnetism in Condensed Matter*. 1. ed. Oxford University Press, USA, 2001. (Oxford Maser Series in Condensed Matter Physics). ISBN 9780198505914-0-19-850591-4. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=c4d8b9fbd740f952e9b6a3761750172>.
- [80] BUSCHOW, K.; BOER, F. de. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. 1. ed. Springer, 2003. ISBN 0306484080-0306474212-9780306474217. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=d6cd2b2c3b434e20f1a4fd6f6bbf4b82>.
- [81] AUERBACH, A. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer-Verlag, 1994. (Graduate texts in contemporary physics). ISBN 0387942866-9780387942865-3540942866. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=b2e34267ea08d3f0aadba5a64dd6769e>.

- [82] CALLAWAY, J. *Quantum theory of the solid state*. Academic Press Inc., U.S., 1974. part B. ISBN 9780121552022-0121552020. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=44c759f50b8f88568c3d4a6ac356934f>.
- [83] MATTIS, D. C. *The theory of magnetism I: Statics and dynamics (no preface)*. Springer, 1981. (Springer Series in Solid-State Sciences). ISBN 9783540106111-3540106111. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=b108046f3ca14920f9c4a3e341caa638>.
- [84] KRONMULLER, H.; PARKIN, S. *Handbook of magnetism and advanced magnetic materials*. 1. ed. Wiley-Interscience, 2007. ISBN 9780470022177-0470022175. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=1bc6c86906276c7e2d154e9837db2cb0>.
- [85] CRANGLE, J. *Solid · State Magnetism*. 1. ed. Springer US, 1991. ISBN 978-1-4613-6748-2-978-1-4615-3920-9. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=ad28033f0a9a778d6674fe8da76937c5>.
- [86] KITTEL, C. Physical theory of ferromagnetic domains. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 21, p. 541–583, Oct 1949. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.21.541>.
- [87] SMITH, A. Who discovered the magnetocaloric effect?. Warburg, Weiss, and the connection between magnetism and heat. *European Physical Journal H*, v. 38, n. 4, p. 507–517, set. 2013.
- [88] BACCELLI, F. et al. A mean-field limit for a class of queueing networks. *Journal of Statistical Physics*, v. 66, n. 3-4, p. 803–825, fev. 1992.
- [89] ALEXANDER, A. K. *The Pauli principle and magnetism*. 2013.
- [90] EHRENREICH, H.; SPAEPEN, F. *Solid State Physics*. Academic Press, 2006. v. 60. (Solid State Physics 60, v. 60). ISBN 0126077606-9780126077605-9780080458588. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=1d8cf23e2485a85c7387695ca7661ba3>.
- [91] WATANABE, H. A proof of the bloch theorem for lattice models. *Journal of Statistical Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 177, n. 4, p. 717–726, Sep 2019. ISSN 1572-9613. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/s10955-019-02386-1>.
- [92] NAKHAE, M.; KETABI, S. A.; PEETERS, F. M. Tight-binding studio: A technical software package to find the parameters of tight-binding hamiltonian. *Computer Physics Communications*, Elsevier BV, v. 254, p. 107379, Sep 2020. ISSN 0010-4655. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107379>.
- [93] MCCOY, B.; WU, T. T. *The two-dimensional Ising model*. Harvard University Press, 1973. ISBN 9780674914407-0674914406. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=2965f648395b171d4e1393296dc33014>.
- [94] BINEK, C. *Ising-type Antiferromagnets: Model Systems in Statistical Physics and in the Magnetism of Exchange Bias (Springer Tracts in Modern Physics)*. 1. ed. Springer, 2003. ISBN 3540404287-9783540404286. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=80b96862f245ea884918b9ccbb7b9e8c>.

- [95] SAH, C. T. *Fundamentals of solid-state electronics*. World Scientific, 1991. ISBN 9810206372-9789810206376-9810206380-9789810206383-9789810248116-9810248113. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=70ccc13ebbb8d462c446745357752b2a>.
- [96] MIHALY, L.; MARTIN, M. C. *Solid state physics: problems and solutions*. Wiley-Interscience, 1996. ISBN 0471152870-9780471152873. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=c448ac3be3b7b35a522559eb83f33e8b>.
- [97] HOLSTEIN, T.; PRIMAKOFF, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 58, p. 1098–1113, Dec 1940. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.58.1098>.
- [98] WHEELER, J. C.; GUALTIERI, J. A. Critical phenomena in a binary lattice gas. i. cluster expansions and transcriptions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 20, p. 2014–2033, Sep 1979. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.2014>.
- [99] JASCUR, M. et al. Frustration in an exactly solvable mixed-spin ising model with bilinear and three-site four-spin interactions on a decorated square lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 417, n. Supplement C, p. 92 – 99, 2016. ISSN 0304-8853. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885316306916>.
- [100] STUBNA, V.; JASCUR, M. Mixed spin-1/2 and 3/2 ising model with multi-spin interactions on a decorated square lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 442, n. Supplement C, p. 364 – 370, 2017. ISSN 0304-8853. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317302950>.
- [101] ZHOU, C. et al. xxz -ising model on the triangular kagome lattice with spin 1 on the decorated trimers. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 98, p. 012127, Jul 2018. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.012127>.
- [102] SI, N. et al. Magnetic properties of decorated 2d kagome-like lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 560, p. 125222, 2020. ISSN 0378-4371. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437120306415>.
- [103] STRECKA, J.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Spontaneous distortion in the spin-1/2 ising-heisenberg model on decorated planar lattices with a magnetoelastic coupling. *The European Physical Journal B*, Springer Science and Business Media LLC, v. 85, n. 2, Feb 2012. ISSN 1434-6036. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2011-20733-5>.
- [104] STRECKA, E. Magnetization process in the exactly solved spin-1/2 ising-heisenberg model on decorated bethe lattices. *Condensed Matter Physics*, Institute for Condensed Matter Physics, v. 15, n. 4, p. 43003, Dec 2012. ISSN 1607-324X. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.5488/CMP.15.43003>.
- [105] SILVA, W. F.; BEZERRA, C. G.; FILHO, R. N. C. Spin waves in decorated lattices. *Solid State Communications*, v. 322, p. 114065, 2020. ISSN 0038-1098. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109820305664>.