

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

MÁRCIO DA SILVA TAVARES

**ONDAS DE SPIN COM INTERAÇÃO DIPOLAR EM  
REDES HEXAGONAIS MAGNÉTICAS.**

FORTALEZA - CE

2014

MÁRCIO DA SILVA TAVARES

ONDAS DE SPIN COM INTERAÇÃO DIPOLAR EM  
REDES HEXAGONAIS MAGNÉTICAS.

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como um dos requisitos para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira  
Costa Filho

Fortaleza - CE

2014

**Márcio da Silva Tavares**  
**Ondas Spin com Interação Dipolar em Redes Hexagonais Magnéticas.**  
/ **Márcio da Silva Tavares.** - 2009  
164 f.

Orientador: **Raimundo Nogueira Costa Filho**  
Impresso por computador (fotocópia).  
Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Ceará,  
curso de **Doutorado em Física**, Fortaleza, 2014.

1. **Ondas de Spin**, 2. **Interação Dipolar**, 3. **Magnetismo em Baixas Dimensões.**

I. orient. **Raimundo N. C. Filho**,

CDU **XXX.XXX**

MÁRCIO DA SILVA TAVARES

ONDAS DE SPIN COM INTERAÇÃO DIPOLAR EM  
REDES HEXAGONAIS MAGNÉTICAS.

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como um dos requisitos para obtenção do grau de Doutor em Física.

Aprovada em        /        /

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho  
Departamento de Física  
Universidade Federal do Ceará

---

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira  
Departamento de Física  
Universidade Federal do Ceará

---

Prof. Dr. Andrey Chaves  
Departamento de Física  
Universidade Federal do Ceará

---

Prof. Dr. Dory Hélio Aires de Lima Anselmo  
Departamento de Física  
Universidade Federal do Rio Grande de Norte

---

Prof. Dr. Fábio Henrique Silva Sales  
Departamento de Física  
Instituto Federal do Maranhão

# Dedicatória

À DEUS.

À minha esposa Dayris.

Aos meus pais.

À minha irmã.

À minha pessoa.

*"As descobertas científicas evidenciam o absurdo real".*

**Márcio Tavares**

*"Grandes lutas só são dadas a grandes guerreiros".*

**Autor desconhecido**

# Agradecimentos

À Deus, por tudo que realizou na minha vida, me sustentando e dando forças sempre que precisei.

À minha esposa por sua compreensão, dedicação, apoio e presença.

À minha família.

Aos professores do departamento de Física da UFC pela formação.

Ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira C. Filho pela orientação.

À CAPES, pelas bolsa concedida para execução do trabalho e financiamento de projetos.

# Resumo

Este trabalho foi motivado pelas propriedades diversas e miríade de aplicações do magnetismo no contexto tecnológico atual, dos quais enfatizamos o papel da magnetização e ondas de spin em sistemas magnéticos bidimensionais tais com redes quadradas e hexagonais. As ondas de spin tem trazido avanços outrora não imaginados e tem favorecido em demasia a construção de dispositivos mais eficientes nos ramos da eletrônica e transporte de informações, além de fincar novas perspectivas ainda exploradas conceitualmente. Assim entende-se a importância do tema e procuramos estudar as ondas de spin em um ferromagneto bidimensional exposto a interações magnéticas de diferentes naturezas (troca, anisotrópica, Zeeman e dipolar) no intuito de montar a relação de dispersão dos modelos propostos e construir o espectro da teoria, ou seja, a relação energia/vetor de onda. Ademais, plotamos outras relações da energia com parâmetros importantes no foco de melhor entender a evolução da energia do sistema, além de que investigamos as influências da orientação da rede frente à magnetização externa.

**Palavras-chave:** Ondas de Spin, Interação Dipolar, Magnetismo em Baixa Dimensão.

# Abstract

This work was motivated by the various properties and magnetism myriad of applications in the current technological environment, which emphasize the role of magnetization and spin waves in two-dimensional magnetic systems with such square and hexagonal networks. The spin waves have brought previously unimagined advances and overused that has favored the construction of more efficient devices in the fields of electronics and transportation information, and put down new prospects yet explored conceptually. So we understand the importance of the topic and trying to study the spin waves in a location exposed to magnetic interactions of different natures (exchange, dipolar and anisotropic) in order to assemble the dispersion relation of the proposed models and build the spectrum of the theory dimensional ferromagnet, that is, the energy/wave vector. Furthermore, we plot the energy with other important relationships in focus to better understand the evolution of the energy of the system parameters, and we investigate the influence of the orientation of the magnetization relative to the external network.

**Keywords:** Spin Waves, Dipole-Dipole Interactions, Low Dimension Magnetism.

# *Sumário*

<b>Lista de Figuras</b>	p. x
<b>Lista de Tabelas</b>	p. xv
<b>1 Introdução Geral.</b>	p. 1
<b>2 Magnetismo.</b>	p. 8
2.1 Aspectos Históricos. . . . .	p. 8
2.1.1 Abordagens Macroscópica e Microscópica. . . . .	p. 13
2.1.1.1 Magnetismo Macroscópico. . . . .	p. 13
2.1.1.2 Magnetismo Microscópico. . . . .	p. 16
2.2 O Modelo de Heisenberg. . . . .	p. 18
<b>3 Ondas de Spin em Sistemas de Baixa Dimensionalidade.</b>	p. 25
3.1 Ondas de Spin e suas Interações. . . . .	p. 26
3.1.1 Ondas de Spin . . . . .	p. 26
3.1.2 Formalismo Semiclássico. . . . .	p. 27
3.1.3 Tratamento Quântico. . . . .	p. 30
3.1.4 Interações em Sistemas Magnéticos. . . . .	p. 33
3.1.4.1 Interação de Troca. . . . .	p. 33
3.1.4.2 Interação Anisotrópica. . . . .	p. 34
3.1.4.3 Interação Zeeman. . . . .	p. 36
3.1.4.4 Interação Dipolar. . . . .	p. 36

3.1.5	O Hamiltoniano. . . . .	p. 38
3.1.6	Aproximação de Holstein-Primakoff. . . . .	p. 39
<b>4</b>	<b>Ondas de Spin em uma Rede Quadrada.</b>	<b>p. 45</b>
4.1	Ondas de Spin em Redes Quadradas Infinitas sem Interação Dipolar. . .	p. 45
4.2	Resultados Numéricos. . . . .	p. 47
4.3	Ondas de Spin em Redes Quadradas Infinitas com Interação Dipolar. . .	p. 51
4.3.1	Plano $x - y$ . . . . .	p. 51
4.3.2	Plano $x - z$ . . . . .	p. 57
4.4	Ondas de Spin em Rede Quadrada Finita sem Interação Dipolar . . . .	p. 61
4.5	Ondas de Spin em Rede Quadrada Finita com Interação Dipolar . . . .	p. 64
4.6	Ondas de Spin em uma Rede Favo de Mel Infinita sem Interação Dipolar	p. 70
4.7	Rede Favo de mel infinita com interação dipolar . . . . .	p. 76
4.8	Rede favo de mel finita sem interação dipolar . . . . .	p. 85
4.9	Rede favo de mel finita com interação dipolar . . . . .	p. 88
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas.</b>	<b>p. 92</b>
<b>Apêndice A – Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Infinita no Plano 0xy.</b>		<b>p. 97</b>
<b>Apêndice B – Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Infinita no Plano 0xz.</b>		<b>p. 100</b>
<b>Apêndice C – Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Finita no Plano 0xy.</b>		<b>p. 102</b>
<b>Apêndice D – Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Finita no Plano 0xz.</b>		<b>p. 105</b>
<b>Apêndice E – Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Hexagonal Infinita</b>		

no Plano $Oxy$ .	p. 107
<b>Apêndice F - Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Hexagonal Finita</b> no Plano $Oxy$ .	p. 111
<b>Referências</b>	p. 114

# *Lista de Figuras*

1	Componente Spintrônico de Silício. . . . .	p. 4
2	Colher de Magnetita. . . . .	p. 9
3	Terrella. . . . .	p. 10
4	Histerese Magnética. . . . .	p. 15
5	Função de onda antissimétrica. . . . .	p. 19
6	Ondas de Spin . . . . .	p. 27
7	Precessão do Spin. . . . .	p. 28
8	Modo Uniforme de Propagação. . . . .	p. 30
9	Modo não Uniforme de Propagação. . . . .	p. 30
10	Spins Antiparalelos (a) e Spins Paralelos (b). . . . .	p. 33
11	Representação da rede quadrada infinita. . . . .	p. 45
12	Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 9$ . . . . .	p. 48
13	A zona de Brillouin para uma rede quadrada mostrando os pontos $\Gamma$ , $X$ , e $M$ . . . . .	p. 48
14	Relação de dispersão das ondas de spin ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . . . . .	p. 49
15	Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 9$ . Aqui consideramos segundos vizinhos: a) $J_2/J_1 = 0, 1$ , b) $J_2/J_1 = 0, 2$ , c) $J_2/J_1 = 0, 3$ , d) $J_2/J_1 = 0, 4$ . . . . .	p. 49
16	Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 14$ . Aqui consideramos $q_y = 0$ no painel da esquerda e $q_y = \pi a$ no painel da direita. . . . .	p. 50

17	Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . A linha solida $J_2 = 0$ , a linha pontilhada é para $J_2 = 0.1J_1$ , o caso onde $J_2 = 0.2$ é representado pela tracejada, a linha tracejada longa corresponde a $J_2 = 0.3J_1$ , e a linha tracejada pontilhada indica o caso onde $J_2 = 0.4J_1$ . . . . .	p. 50
18	A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem segundos vizinhos, a curva pontilhada representa o caso onde $J_2 = 0,1J_1$ , e a curva tracejada é para o caso onde $J_s = 0,4J_1$ . . . . .	p. 51
19	Rede quadrada Infinita em Ambas as Direções no plano $x - y$ . . . . .	p. 52
20	Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 10$ . . . . .	p. 55
21	Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 9.5$ . O painel da direita $q_y = 0$ e $q_y = \pi/a$ no painel da direita. . . . .	p. 55
22	Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . A linha solida $4\pi g\mu_B M = 0$ , a linha pontilhada é para $4\pi g\mu_B M = 1$ , o caso onde $4\pi g\mu_B M = 2$ é representado pela tracejada longa, e a linha tracejada pontilhada indica o caso onde $4\pi g\mu_B M = 3$ . A direita temos a diferença de energia das ondas de spin para $4\pi\mu_B M = 0$ e $4\pi\mu_B M = 1$ ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . . . . .	p. 56
23	A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem interação dipolar, a curva pontilhada representa o caso onde $4\pi\mu_B M = 1$ , a curva tracejada é para o caso onde $4\pi\mu_B M = 2$ , a curva tracejada-pontilhada é para o caso $4\pi\mu_B M = 3$ . . . . .	p. 57
24	Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar no plano $x - z$ . A energia cresce do azul até o vermelho $0 < E/J_1 < 10$ : a) $4\pi\mu_B M = 0$ , b) $4\pi\mu_B M = 1$ , c) $4\pi\mu_B M = 2$ , d) $4\pi\mu_B M = 3$ . . . . .	p. 59

25	Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho no intervalo $0 < E/J_1 < 10$ . O painel da esquerda $q_x = 0$ e $q_x = \pi a$ no painel da direita. . . . .	p. 59
26	Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos e interação dipolar ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . A linha solida $4\pi g\mu_B M = 0$ , a linha pontilhada é para $4\pi g\mu_B M = 1$ , o caso onde $4\pi g\mu_B M = 2$ é representado pela tracejada longa, e a linha tracejada-pontilhada indica o caso onde $4\pi g\mu_B M = 3$ . A direita a temos a diferença de energia entre as ondas de spin para $4\pi\mu_B M = 0$ e $4\pi\mu_B M = 1$ ao longo dos caminhos $\Delta$ , $Z$ , e $\Sigma$ . . . . .	p. 60
27	A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem interação dipolar, a curva pontilhada representa o caso onde $4\pi\mu_B M = 1$ , a curva tracejada é para o caso onde $4\pi\mu_B M = 2$ , a curva tracejada-pontilhada é para o caso $4\pi\mu_B M = 3$ . . . . .	p. 60
28	Fita Magnética Finita em uma Direção. . . . .	p. 61
29	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da interação de troca de segundos vizinhos: a) $J_2/J_1 = 0$ , b) $J_2/J_1 = 0, 1$ , c) $J_2/J_1 = 0, 2$ , e $J_2/J_1 = 0, 3$ . . . . .	p. 63
30	Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos $J_2$ para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a) $q_x = 0$ , b) $q_x = 0, 5\pi a$ , e c) $q_x = \pi a$ . . . . .	p. 64
31	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a) $4\pi M = 0$ , b) $4\pi M = 1$ , c) $4\pi M = 2$ , d) $4\pi M = 3$ . . . . .	p. 66
32	Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos $J_2$ para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a) $q_x = 0$ , b) $q_x = 0, 5\pi a$ , e c) $q_x = \pi a$ . . . . .	p. 66
33	Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos $J_2$ para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a) $q_x = 0$ , b) $q_x = 0, 5\pi a$ , e c) $q_x = \pi a$ . . . . .	p. 67

34	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar para o sistema no plano $x - z$ : a) $4\pi M = 0$ , b) $4\pi M = 1$ , c) $4\pi M = 2$ , d) $4\pi M = 3$ . . . . .	p. 69
35	Relação entre energia e interação dipolar para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ) no plano $x - z$ : a) $q_z = 0$ , b) $q_z = 0,5\pi a$ , e c) $q_z = \pi a$ . . . . .	p. 69
36	Os modos de mais baixa energia para um sistema no plano $x - y$ linha sólida e no plano $x - z$ linha tracejada. A curva para o plano $x - z$ pode ser fitada por uma função linear como mostra a legenda. . . . .	p. 70
37	Fita Magnética Finita em uma Direção. . . . .	p. 70
38	Curva de contorno para as energias de ondas de spin em uma rede favo de mel para diferentes valores da interação de segundos vizinhos a) $J_2 = 0$ , b) $J_2 = 0,1J_1$ , c) $J_2 = 0,2J_1$ , e d) $J_2 = 0,3J_1$ . A energia cresce do azul até o vermelho $2 < E/J_1 < 6$ . . . . .	p. 74
39	Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede favo de mel sem interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho $2 < E/J_1 < 6$ . O painel da direita $q_y = 0$ e $q_y = \pi/a$ no painel da direita. . . . .	p. 74
40	A relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel ao longo dos caminhos $\Gamma - K$ , $K - M$ , $M - \Gamma$ para diferentes valores da interação de segundos vizinhos $J_2$ . No painel da direita temos a diferença entre os modos com $J_2 = 0$ e $J_2 = 0,1J_1$ . . . . .	p. 75
41	A densidade de estados $\sigma$ para a rede favo de mel infinita sem interação dipolar. . . . .	p. 75
42	Curva de contorno para as energias de ondas de spin para uma rede favo de mel: a) $4\pi M = 0$ , b) $4\pi M = 1$ , c) $4\pi M = 2$ , d) $4\pi M = 3$ . A energia cresce do azul até o vermelho $2 < E/J_1 < 6$ . . . . .	p. 83
43	Curva de contorno para as energias de ondas de spin para valores fixos de $q_y$ . O painel da direita é para $q_y = 0$ , enquanto que o painel da esquerda é para $q_y = 2\pi/3a$ . A energia cresce do azul até o vermelho $2 < E/J_1 < 6$ . . . . .	p. 83

44	A relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel ao longo dos caminhos $\Gamma - K$ , $K - M$ , $M - \Gamma$ para diferentes valores da interação dipolar $M_S$ . No painel da direita temos a diferença entre os modos com $M_S = 0$ e $M_S = 1$ . . . . .	p. 84
45	A densidade de estados $\sigma$ para a rede favo de mel infinita com interação dipolar. . . . .	p. 84
46	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da de segundos vizinhos para uma fita com $N = 10$ linhas atômicas: a) $J_2 = 0$ , b) $J_2 = 0, 1J_1$ , c) $J_2 = 0, 2J_1$ , d) $J_2 = 0, 3J_1$ . . . . .	p. 86
47	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da de segundos vizinhos para uma fita com $N = 11$ linhas atômicas: a) $J_2 = 0$ , b) $J_2 = 0, 1J_1$ , c) $J_2 = 0, 2J_1$ , d) $J_2 = 0, 3J_1$ . . . . .	p. 87
48	A relação de dispersão de ondas de spin variando a intensidade da interação de troca de segundos vizinhos: a) $N = 10$ e $q_x = 0$ , b) $N = 11$ e $q_x = 0$ , c) $N = 10$ e $q_x = 2\pi/3a$ , d) $N = 11$ e $q_x = 2\pi/3a$ . . . . .	p. 87
49	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a) $M_S = 0$ , b) $M_S = 1$ , c) $M_S = 2$ , d) $M_S = 3$ . . . . .	p. 90
50	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a) $M_S = 0$ , b) $M_S = 1$ , c) $M_S = 2$ , d) $M_S = 3$ . . . . .	p. 90
51	A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a) $N = 10$ e $q_x = 0$ , b) $N = 11$ e $q_x = 0$ , c) $N = 10$ e $q_x = 2\pi/3a$ , d) $N = 11$ e $q_x = 2\pi/3a$ . . . . .	p. 91

# *Lista de Tabelas*

1	Componentes e Autoestados de Spin- $\frac{1}{2}$ . . . . .	p. 20
---	--	-------

# *1 Introdução Geral.*

A ciência é responsável por grande parte do conhecimento do homem a cerca da natureza, e essa conquista é fruto de séculos de pesquisa o que nos remete às civilizações antigas. Todo esse entendimento hoje compõe quatro grandes áreas da física: Eletromagnetismo, Gravitacional, Nuclear Forte e Fraca. Há algum tempo têm-se tentado elaborar uma "teoria de tudo" que seria regida por uma super-força que governaria a natureza. Estas tentativas até os dias atuais ainda não lograram êxito devido a algumas questões como por exemplo, as complicações na elaboração de uma teoria quântica gravitacional.

Embora ainda não tenhamos obtido sucesso na formulação de tal teoria, os avanços obtidos tem elevado o homem a patamares cada vez mais profundos no tocante à compreensão do mundo macro e micro que nos rodeia; resultando em avanços tecnológicos que vem a passos largos otimizando a vida social. A exemplo disso podemos citar o magnetismo, o qual possui posição de destaque no cenário tecnológico, principalmente na era da informatização em que vivemos.

O magnetismo foi observado a séculos antes de Cristo, e tem desde então sido foco de muitas descobertas responsáveis por uma série de conquistas em diversos ramos como na medicina, informática, telecomunicações, etc. Esse grande leque de aplicações se deve aos materiais magnéticos que apresentam propriedades importantes e com finalidades bem definidas.

Toda matéria é composta por átomos que possuem partículas fundamentais detentoras de propriedades intrínsecas como carga, massa e spin. Alguns desses átomos apresentam características magnéticas provenientes da presença de momentos de dipolo magnéticos, os quais são responsáveis pela formação de campos magnéticos. A resposta desses materiais aos campos magnéticos externos é fruto da presença desses dipolos magnéticos e de suas interações; e como consequência a vasta aplicabilidade desses materiais se deve ao tipo de reação a esse campo, além de outros fatores posteriormente discutidos.

O alinhamento ordenado dos dipolos magnéticos é responsável pela classificação dos

materiais em paramagnéticos, quando os momentos, a priori, estão desorientados e se alinham com o campo externo, forçando o vetor magnetização a ter mesma orientação. Os diamagnéticos, quando os dipolos se alinham de forma antiparalela ao campo e são fracamente atraídos por ele. Além disso, há aqueles em que os dipolos magnéticos apresentam uma propriedade de "congelamento" na ausência do campo que os alinhou, estes denominados ferromagnéticos.

Os antiferromagnetos correspondem a outro exemplo de materiais magnéticos em que o alinhamento dos dipolos ocorre de forma antiparalela, ou seja, os momentos se alinham na mesma direção e sentidos opostos, e como consequência disso a magnetização macroscópica é nula. Similarmente temos um material conhecido como ferrimagnetos, os quais apresentam dois tipos diferentes de íons magnéticos (por exemplo  $Ni^{++}$  e  $Fe^{+++}$ ) neles existindo interações eletromagnéticas similares ao antiferromagnetismo, porém, pela presença dos íons com módulos diferentes no momento dipolo magnético, a magnetização macroscópica não é nula. Além destes, podemos citar ainda os metamagnetos que correspondem a compostos que ora apresentam comportamento ferromagnético ora antiferromagnético.

O vetor magnetização que fora citado assume papel importante no eletromagnetismo clássico, expressando a densidade de momentos de dipolo magnéticos permanentes ou induzidos em um material magnético. Como consequência disso, a magnetização descreve como um material responde a um campo magnético, além de que pode ser usada para calcular as forças que resultam da interação entre material e campo externo aplicado. Dessa forma podemos associar a magnetização ao seu análogo elétrico, a polarização que é a medida da reação de um material correspondente à aplicação de um campo elétrico em eletrostática. Matematicamente podemos escrever

$$M = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{Nm}{\Delta V},$$

onde  $N$  é o número de momentos magnéticos ( $m$ ) na amostra e  $V$  o volume.

A origem dos momentos magnéticos responsáveis pela magnetização, do ponto de vista clássico, está no momento angular orbital e de spin do elétron. Apesar de termos relatos de que o spin foi introduzido a algum tempo por Compton, num artigo sobre espalhamento de raios-X por átomos em 1921 (1), onde sugeriu a ideia do elétron que girava em torno de si mesmo como uma explicação possível para a unidade natural do magnetismo; o real mérito de inserção do spin do elétron é atribuído aos físicos George Eugene Uhlenbeck e Samuel Abraham Goudsmit em 1925, os quais como estudantes de pós-graduação estavam

interessados em compreender o porque do desdobramento das linhas espectrais no átomo de hidrogênio e átomos alcalinos, o que era conhecido como estrutura fina.

Essa estrutura fina havia sido tratada por Sommerfeld, o qual utilizando o modelo de Bohr chegou à conclusão desta ser o desdobramento dos níveis de energia atômicos resultantes de uma pequena contribuição ( $10^{-4}$ ) à energia total, advinda da variação relativa da massa do elétron devida à sua velocidade relativística em torno do núcleo do átomo de Hidrogênio. Porém, tal teoria não logrou êxito na explicação de tais efeitos em átomos alcalinos, resultando em suspeitas quanto à validade de sua teoria para a origem dessa estrutura fina.

Nesse ínterim, dentre outras tentativas, Goudsmit e Uhlenbeck propuseram a existência de um momento angular e momento de dipolo magnético, cujas componentes  $z$  seriam especificadas por um quarto número quântico  $m_s$ , que assumiria dois valores  $\pm\frac{1}{2}$ . Este estaria associado não ao conhecido momento angular orbital, mas sim, a um novo momento angular chamado spin, que haveria de ser comprovado empiricamente em 1927 por Phipps e Taylor quando através da técnica de Stern-Gerlach utilizando átomos de hidrogênio (no estado fundamental) verificaram ser este um momento angular real intrínseco ao elétron.

Como podemos ver, estas conclusões foram contemporâneas à descoberta da mecânica quântica, e a ideia do spin traria efeitos sem análogo clássico. Portanto as influências do spin podem ser descritas através das teorias da mecânica quântica como a de Schrödinger, que pela equação de Schrödinger-Pauli,  $[\frac{1}{2m}(\sigma \cdot (p - qA))^2 + q\phi]|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle$ , revela o comportamento de um sistema composto por partículas de spin ( $\frac{1}{2}$ ) interagindo com o campo eletromagnético em um regime não relativístico. Já em escalas de altas energias a teoria da mecânica quântica relativística, elaborada por Dirac em 1928, assume ser uma formidável ferramenta de pesquisa.

Pelo que foi descrito acima, podemos concluir que a introdução desse novo número quântico apresenta efeitos que de maneira nenhuma são sutis, como exemplo a própria magnetização que é fruto da precessão em mesma frequência e fase dos momentos individuais, ou seja, dos spins.

Outro ponto importante acerca desse tema faz luz sobre um sistema magnético que agrupa muitos spins. Estes sistemas ligeiramente perturbados acima do estado fundamental definem um modo de propagação uniforme e revelam as ondas de spin, primeiramente definidas por F. Bloch (2). As ondas de spin tem aquecido o cenário de pesquisas e se tornou ponto de suma importância em vários ramos do desenvolvimento tecnológico. Essa importância é fruto da miríade de aplicações que visam avanços nas tecnologias onde

materiais magnéticos são utilizados; daí a necessidade de se conhecer mais sobre essas excitações coletivas, o que é um dos focos de estudo da spintrônica.

A spintrônica é uma tecnologia que vem explorando o papel do spin eletrônico e/ou nuclear na física do estado sólido, em outras palavras podemos dizer que é uma eletrônica dos spins, que tem como objetivo controlar o fluxo de corrente em um dispositivo não somente pela carga dos elétrons, mas também pelo o spin. A carga do elétron é afetada pela ação de campos elétricos, mas o spin é perturbado por campos magnéticos. Essa nova proposta poderá produzir dispositivos mais rápidos e que dissipem menos energia.

A exemplo podemos citar a elaboração de dispositivo spintrônico baseado no Silício (3), vide Figura 1, o qual já tem sido utilizado na elaboração de computadores em que as informações são armazenadas no spin. Além disso pesquisas recentes (4) vem explorando as propriedades de transporte das ondas de spin em cristais, visando aplicações como a retirada de calor do interior dos processadores eletrônicos convencionais, estudo este foco da caloritrônica, ramo emergente da spintrônica.

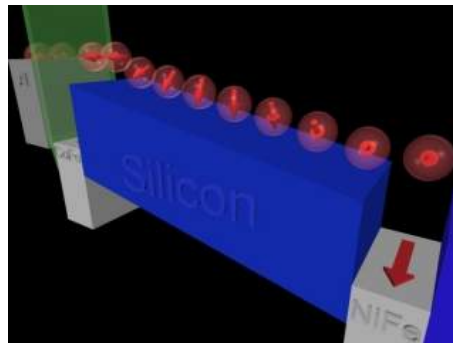


Figura 1: Componente Spintrônico de Silício.

A descoberta de uma propriedade inusitada como o spin levou a uma melhor compreensão dos fenômenos magnéticos e estes permitiram o desenvolvimento de novas formas de processar, manipular e armazenar informações. Em telecomunicações podemos citar a criação de dispositivos de emissão de ondas eletromagnéticas e mais recentemente a utilização do spin no processamento de informações que permitirá o desenvolvimento de novos algoritmos de computação, os quais utilizarão as propriedades quânticas do spin. Esse novo ramo de conhecimento chama-se de computação quântica.

No palco dessas discussões podemos ressaltar também os filmes finos e os sistemas multicamadas, conceitos estes que surgiram em 1970 com a proposta de Esaki e Tsu (5) de crescimento de bicamadas múltiplas monocristalinas de dois diferentes semicondutores. O interesse de sintetizar tais estruturas não se limitou, entretanto, aos materiais semicondutores e foi ampliado com muito sucesso aos materiais magnéticos.

Um filme fino é entendido como uma estrutura onde as propriedades de interesse são influenciadas por efeitos de interface. Sua espessura não é bem definida, sendo esta estabelecida pelos tipos de materiais componentes e as propriedades em questão. Uma bicamada de filmes finos é composta por duas camadas de filmes sobrepostas, sendo classificada de multicamada a partir de uma quantidade igual ou superior a três camadas de filmes (6).

Nos dias atuais colhe-se os frutos de técnicas muito eficientes no tocante ao crescimento de materiais magnéticos, possibilitando assim a fabricação de filmes finos adequados às aplicações no nicho da eletrônica. Como exemplos dessas técnicas podemos citar a Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e a Decomposição por Vapor Químico de Metais Orgânicos (MOCVD), proporcionando a fabricação de sistemas multicamadas com espaçamentos de alta qualidade gozando de dimensões na ordem do comprimento de onda de *de Broglie* ou próximo do livre caminho médio eletrônico (7).

A vasta aplicabilidade tecnológica justifica-se na manipulação de propriedades dos filmes finos magnéticos, tais como a magnetorresistência gigante (MRG) de cujos efeitos foram pioneiramente observados por Baibichi et al.(8), em 1988 em multicamadas magnéticas do tipo FM/NM/FM (Fe/Cr/Fe) acopladas antiferromagneticamente e produzidas por epitaxia de feixe molecular, e pela adequação da anisotropia magnética (9). Essas aplicações se estendem desde o cunho prático com a elaboração de discos rígidos e flexíveis para gravação de dados (10), no desenvolvimento de uma nova e promissora eletrônica dos spins (11), até o cunho teórico que apesar das primeiras teorias de transporte eletrônico em filmes finos metálicos vir de longas datas com trabalhos clássicos de Fuchs (12), Chambers (13) e Sondheimer (14), o tema recentemente tem incorporado novos enfoques de investigação, como por exemplo, efeitos quânticos (15), interrelacionamento com propriedades magnéticas (16), fenômenos de localização (17), etc.

Em suma, esses materiais abrem portas para novas perspectivas e tratam de otimizar as dimensões dos dispositivos, aumentando a velocidade e baixando a voltagem de operação. Atualmente, estes filmes vem sendo tratados em dimensões cada vez mais reduzidas, atingindo o ponto de serem elaboradas em  $2D$  (quase-bidimensionais) e  $1D$  (fios magnéticos).

A exemplo de tais investigações podemos citar os efeitos magnéticos inerentes às partículas de multidomínio e do tipo monodomínio (18), levando em conta a presença das interações de troca com e sem a participação das interações dipolares. Estas últimas, apesar de serem, em média,  $10^3$  vezes mais fracas que os efeitos de troca e serem responsáveis

por um trato matemático complicado, tem se tornado cada mais frequentes nas pesquisas, devido aos notórios avanços a uma descrição mais realística dos sistemas físicos.

De maneira a agregar valor ao estudo em baixas dimensões, além do interesse em partículas isoladas, os estudos de redes regulares planares, também tem recebido mais atenção nos últimos anos, e compreender como o espaçamento e a interação dipolar entre as partículas afeta as propriedades magnéticas dos sistemas é relevante no entendimento e interpretação dos resultados experimentais. Outro fator de suma importância para a resposta física do sistema a estímulos externos é refletido pela geometria da rede magnética, a qual é explorada nesse trabalho.

Finalmente, percebe-se que na vitrine das pesquisas atuais os sistemas de baixa dimensionalidade ganham força, e na perspectiva da miniaturização dos equipamentos e dispositivos utilizados em circuitos eletrônicos com capacidade cada vez maiores, a busca por materiais novos vem ganhando notoriedade. Nesse palco os principais protagonistas tem sido os filmes finos magnéticos e agora o grafeno, dos quais com o controle de suas propriedades podemos estender a novas direções, permitindo a criação de sistemas com robusta características supercondutoras e magnéticas (19).

Embora esse campo de estudo esteja apenas no começo, as possibilidades tecnológicas e científicas parecem ser imensas. O entendimento e o controle das propriedades desses materiais podem abrir portas para uma nova fronteira no setor eletrônico.

A estrutura desse trabalho está organizada da seguinte forma: No capítulo 2 faremos uma abordagem histórica sobre o magnetismo, ressaltando seus aspectos macro e microscópicos. Enfatizamos o caráter quântico do magnetismo através do modelo de Heisenberg, modelo que será base para as análises neste trabalho.

No capítulo que se segue estudamos as ondas de spin em redes magnéticas, onde abordamos os aspectos históricos associados a esse conceito e analisamos as perspectivas semi-clássica e quântica. Discutimos temas correlacionados de interesse como as diferentes interações nos sistemas magnéticos tipo Troca, Zeeman e Dipolar. Acrescentamos uma discussão mais detalhada sobre o modelo de Heisenberg, o qual estará sujeito à famosa transformação de Holstein-Primakoff, na qual os operadores de spin são escritos em termos dos operadores de criação e aniquilação de magnons, garantindo a visualização dos modos das ondas de spin como um gás bosônico.

No capítulo 4 realizamos um estudo em baixa dimensão das Ondas de Spin em Redes Quadrada e Hexagonais Infinita e Finitas sem e com Interação Dipolar. Exploramos a

importância da orientação dos planos à magnetização externa na rede quadrada infinita com dipolar, e realizamos um estudo numéricos para a obtenção das soluções da relação de dispersão e densidade de estados inerentes aos casos. Por fim, no capítulo 5 observamos as conclusões e perspectivas desse trabalho.

## 2 *Magnetismo.*

### 2.1 Aspectos Históricos.

O conhecimento sobre o magnetismo é de muito tempo atrás, séculos antes de Cristo, mas que só veio atingir um patamar de compreensão mais moderno no final do século XIX, como reflexo do trabalho de alguns notáveis.

Na evolução dos fatos, a história conta que o magnetismo foi pioneiramente observado por um pastor cretense por nome Magnes (20), que ao pastorear com um cajado de ponta de ferro, tocou em uma rocha, a qual por alguns instantes manifestou uma força atrativa. Este fato chegou ao conhecimento do filósofo Thales que concluiu ser esta uma rocha com origem divina, baseado na suposição dela possuir alma.

Na tentativa de explicar a situação Thales se reportou à busca por outros materiais ou exemplares que possuíssem o mesmo comportamento da *magnetita*, e dentre seus achados relata-se uma resina vegetal amarelada e translúcida (o *âmbar*) que após ser atritada expelia aroma e mostrava-se com capacidade de atrair pedaços de papel, felpo, bolas de cortiça, etc; dentre os quais não se incluía o ferro. No ínterim das descobertas, Thales não chegou a uma compreensão precisa e convincente acerca das propriedades da magnetita, e agora também deparava-se com a incerteza sobre a similaridade com o comportamento do *âmbar*.

Posteriormente, os filósofos mecanicistas ou atomistas, tentaram através de diversas concepções metafísicas compreender estes e outros fenômenos naturais. No cenário do que fora discutido, atribuíram a existência de umidade no ferro da qual a magnetita se alimentava. É interessante notar que mesmo se tratando de pensamentos sem constatações experimentais, baseadas apenas em avaliações subjetivas, já havia a ideia dos contrários, ou seja, elementos opostos que se completavam.

Platão e Lucrécio foram os primeiros atomistas a perceber que as interações advindas tanto da *magnetita* quanto do *âmbar* não eram restritos à atração, porém suas conclusões

eram fundamentadas somente ao campo das ideias (21). Isto só viria a ser concebido experimentalmente por Niccolo Cabeo já no século XVI, principalmente no que tange aos efeitos elétricos. Cabeo concebeu o conceito da "esfera de influência", que teria caráter imaterial e ocuparia o espaço ao redor do imã, manifestando uma propriedade latente capaz de atrair o ferro, quando este se aproximava. Este conceito seria muito similar ao do *effluvium*, que corresponderia a uma espécie de "campo mecânico material" que ao se propagar traria, à distância, a conexão entre corpos atritados, fazendo com que ambos se atraíssem.

Estes fatos citados foram a gênese da percepção do homem acerca dos fenômenos magnéticos e elétricos. Os magnéticos vinculados às interações explícitas pela *magnetita* e os elétricos devido ao *âmbar* (*eléktron*, em grego). Há indícios de que os chineses conheciam o magnetismo há mais tempo que os gregos, e já se utilizavam de suas propriedades. No início da era Cristã, os chineses faziam uso da colher de *magnetita* Figura 2, que apoiada em um pino apontava com seu cabo para o sul geográfico. Daí tinha-se a primeira concepção da bússola (utilizada em navegações a partir do século X ou XI) que atrelava-se ao conceito do imã, palavra que surgiria mais tarde derivada do termo francês "*aimant*", amante (22).



Figura 2: Colher de Magnetita.

Muito embora atrasados em relação aos chineses na utilização da bússola nas navegações, os europeus foram os primeiros a realizar estudos experimentais do magnetismo de natureza científica. Pierre Pélerin de Maricourt, engenheiro militar francês, entrou para a história por sua importante tentativa empírica de entender o magnetismo; o que resultou em dos maiores tratados de física experimental, em 1269. Dentre seus feitos, realizou experimentos com a *magnetita* esférica espalhando pedaços de imã ao seu redor, conseguindo desta forma traçar as linhas de campo magnético que se interceptam em dois pontos os quais foram definidos como pólos (23). Dentre outros feitos, Petrus Peregrinus, como também era conhecido, observou que a agulha da bússola não apontava exatamente

para o norte geográfico da Terra; relatou que a aproximação de dois ímãs pelos pólos de mesmo nome se repeliam e por pólos opostos se atraem; mostrou que um ímã particionado matem a polaridade do ímã original, ou seja, cada divisão do ímã gera outros ímãs (ênfatizando a inexistência do monopólo magnético).

Desde então não há relatos de grandes avanços sobre o entendimento do magnetismo, o que só veio a ser registrado a partir do século XVI, com William Gilbert, filósofo natural e médico particular da rainha da Inglaterra, Elizabeth I. Gilbert estudando as propriedades medicinais do âmbar, retomou as observações e resultados experimentais de Maricourt. Desta forma reuniu suas conclusões em um tratado que definitivamente fincou posição de evidencia entre as grandes literaturas em física, a saber, "*De Magnetiscisque Corporibus et de Magno Magnete Tellure Physiologia nova*" (Sobre o ímã e os corpos magnéticos, e sobre o grande ímã a Terra), mais comumente chamado "*De Magnete*".

Nessa obra dentre outras informações ressaltamos a descoberta da imantação por indução, e provavelmente o primeiro relato de que a Terra seria um grande ímã. Para ilustrar tal ideia, construiu um ímã em forma de esfera, denominado Terrella, Figura 3, que simulava a ação magnética da Terra sobre as bússolas, justificando portanto o por que dos mesmos apontarem para o norte geográfico. Devido às suas contribuições na área, Gilbert é considerado "Pai do magnetismo", além de seu nome estar associado à unidade de medida da força magnetomotriz (24).



Figura 3: Terrella.

Depois da publicação do "*De Magnete*", já no século XVIII testemunhou-se um grande progresso no entendimento dos fenômenos elétricos e magnéticos, resultado dos estudos feitos por Benjamin Franklin, o qual percebeu a existência de uma dualidade inerente às cargas elétricas, estas assumindo ser positivas ou negativas. Em seguida, Charles Coulomb (25) determinou experimentalmente a dependência com a distância das interações

atrativas e repulsivas entre as cargas elétricas.

Já o século XIX foi um marco na produtividade científica, a qual trouxe aditivos a diversas áreas do conhecimento, incluindo o magnetismo. Mesmo depois de Gilbert concluir que o magnetismo e a eletricidade configuravam fenômenos diferentes, persistia a ideia de que de alguma forma estes se relacionavam.

Essa perspectiva ganhou status com pesquisas de aparente importância no cenário científico, das quais podemos citar: em 1820 Hans Oersted descobriu a interação bússola/corrente elétrica e Biot-Savart descreveram matematicamente o campo magnético produzido por uma distribuição de corrente; Ampère formulou em 1826 a lei que relaciona campo magnético com a intensidade de corrente no fio (motor elétrico); 1831, foi o ano em que Michael Faraday descobriu que um campo magnético variável induz uma corrente elétrica em um circuito (gerador elétrico); James C. Maxwell em seu livro, "*Treatise on Electricity and Magnetism*" (26) e (27), escreve as equações do eletromagnetismo. Estas últimas sacramentam a unidade entre a eletricidade e magnetismo como fenômenos realmente distintos que fazem parte de um contexto único, a luz.

O século XX toma destaque por duas grandes revelações, a teoria da relatividade e a mecânica quântica. A última possibilitando assim o entendimento moderno do magnetismo. Este entendimento foi intimamente ligado ao desenvolvimento da mecânica estatística e teoria de transições de fase termodinâmicas (27), que consagrou a mecânica estatística como uma das ferramentas mais bem sucedidas para estudo do estado sólido (28).

Do ponto de vista clássico duas importantes contribuições surgiram: A primeira foi a teoria moderna do magnetismo com o conceito de campo molecular de Pierre Weiss, em 1907 (28), mesmo que o valor do campo molecular não tenha explicação clássica; e ainda podemos citar o teorema de Van Leeuwen: "Quando a mecânica estatística e clássica são aplicadas consistentemente, a média térmica da magnetização é sempre zero". Isto garante que o magnetismo não pode ser explicado pela física clássica sendo, portanto, intrinsecamente quântico (21).

Historicamente, foi entre os anos de 1900 e 1925 que os primeiros indícios da física quântica vieram à tona como resultados de pesquisas tanto de cunho experimental como teórico; e com sua descoberta o ponto de vista de se ver a natureza e nós mesmos mudou significativamente. No que tange ao magnetismo, esse novo ângulo de visão trouxe uma explicação à origem dos momentos magnéticos atômicos baseados no modelo de Bohr, estabelecendo a unidade fundamental do momento magnético, denominado Magneton de Bohr ( $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ ).

Paralelo a esses feitos, no ano de 1921 H. Compton (1), propôs que o elétron possuía um momento magnético intrínseco, fato este que reservara novas perspectivas vindouras no nicho da mecânica quântica. Tudo isto se concretizou com dois alunos de pós-graduação de Ehrenfest, por nomes George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit que utilizaram a então recente teoria de Landé (29) dos momentos angulares semi-inteiros, que resultou em sucesso na explicação do efeito Zeeman anômalo e no cálculo do fator giro magnético ( $g_S = 2$ ) (vide equações 2.1), na tentativa de elaborar uma teoria efetiva para a estrutura fina do átomo de Hidrogênio e átomos alcalinos associando esse novo número quântico a mais um grau de liberdade, a rotação do elétron em torno de si.

$$\begin{cases} \mu_l = -\frac{g_l \mu_B L}{\hbar}, & \text{se } g_l = 1; \\ \mu_s = -\frac{g_s \mu_B S}{\hbar}, & \text{se } g_s = 2. \end{cases} \quad (2.1)$$

Foi Dirac quem mostrou, ao substituir a equação da energia pela sua forma relativística, que um elétron precisa ter momento angular intrínseco ( $\frac{1}{2}$ ), o que evidencia o fato de que o conceito de spin está intimamente ligado com a relatividade (30). Com todas essas descobertas, finalmente pôde-se descrever o spin do elétron, o ferromagnetismo e a origem do campo de Weiss através da chamada interação de troca, que é uma consequência da repulsão coulombiana, quando se faz uma combinação linear dos orbitais atômicos localizados em átomos vizinhos, levando-se em conta o princípio de exclusão de Pauli (21).

A partir de 1925, em 4 anos, Hatree, Fock, Heitler, London, Slater, Van Vleck, e outros, fizeram cálculos de nível atômico e molecular resolvendo quase todos os problemas pendentes como dados espectroscópicos, regras de Hund, os momentos magnéticos dos átomos e íons, o efeito Zeeman, etc (21), e no magnetismo não seria diferente.

Como já dito anteriormente, nesse trabalho, o magnetismo detêm colocação de destaque nos avanços tecnológicos, como os relés que são empregados nos telégrafos, nos fones e microfones (23), sistemas de geração e distribuição de energia, conversão eletromecânica, eletrônica, informática, transdutores, medicina e engenharia biomédica, automação industrial, etc (31); de tal modo que atualmente estamos ilhados por aplicações do magnetismo (32).

Em linhas gerais o magnetismo pode ser abordado de duas formas: Macro e microscopicamente. De forma bem sucinta discutiremos pontos relevantes dessas abordagens.

## 2.1.1 Abordagens Macroscópica e Microscópica.

### 2.1.1.1 Magnetismo Macroscópico.

Comumente quando pensamos em eletromagnetismo a primeira coisa que nos vêm à mente são as equações de Maxwell.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot D = \rho; \\ \nabla \cdot B = 0; \\ \nabla \times E = -\partial_t B; \\ \nabla \times H = j + \partial_t D. \end{array} \right. \quad (2.2)$$

Estas são um grupo de equações diferenciais parciais que juntamente com a lei da força de Lorentz, compõem a base do eletromagnetismo clássico, o qual engloba todos os fenômenos da óptica clássica. A elaboração desta teoria foi um marco para o desenvolvimento tecnológico do século XIX. Como dissemos, a abordagem do eletromagnetismo pode ser feita por duas vertentes: a microscópica, onde são usados os conceitos de carga e corrente totais a nível atômico, as quais são comumente difíceis de calcular; e a macroscópica, representada pelas equações (2.2), que definem dois campos auxiliares, evitando a necessidade do conhecimento de tais cargas e correntes em dimensões atômicas. Pelo termo eletromagnetismo podemos ver o sucesso da especulação outrora citada, de que os fenômenos elétricos e magnéticos, apesar de diferentes são os protagonistas de um único fenômeno, a luz; de tal maneira que seu escopo de estudo é o campo elétrico, magnético e suas relações.

Na ênfase do entendimento sobre magnetismo podemos citar a importância de três quantidades em sua descrição macroscópica: O campo magnético ( $H$ ), a indução magnética ( $B$ ) e a magnetização ( $M$ ). Campos magnéticos são gerados por corrente elétrica (cargas dinâmicas) e campos elétricos com dependência temporal. No vácuo, a indução magnética é diretamente proporcional ao campo magnético,

$$B = \mu_0 H, \quad (2.3)$$

sendo a constante de proporcionalidade a permeabilidade do vácuo,  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{H}{m}$ .

Tanto a quantidade  $B$  quanto  $H$  na equação (2.3), quando observadas no vácuo, estão relacionadas à densidade de corrente elétrica da fonte  $J$ , de modo que do conhecimento dessa distribuição pode-se escrever:

$$B(r) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{J(r') \times (r - r')}{|r - r'|^3} d^3r',$$

onde a integração é feita sobre a região da corrente. Já a relação entre as quantidades físicas  $M$ ,  $B$  e  $H$  é

$$B = \mu_0(H + M), \quad (2.4)$$

que na condição da magnetização ( $M$ ) não nula, revela que  $H$  não dependerá apenas das correntes externas, mas haverá uma explícita relação com a magnetização, como podemos ver na equação (2.5) abaixo,

$$H = \int \frac{J(r') \times (r - r')}{|r - r'|^3} d^3r' - \frac{1}{4\pi} \int_V \nabla \cdot M(r') \frac{(r - r')}{|r - r'|^3} d^3r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S M(r') \cdot \hat{n} \frac{(r - r')}{|r - r'|^3} dS' \quad (2.5)$$

Na equação (2.5) a integral de superfície é realizada sobre a região limítrofe do volume  $V$ , ou seja, onde  $H \neq 0$  e  $\hat{n}$  é o versor normal à superfície. As quantidades  $\rho_M = -\nabla \cdot M(r')$  e  $\sigma_M = M(r') \cdot \hat{n}$  são chamadas de polo magnético e densidade superficial de intensidade magnética, respectivamente. A integral realizada na superfície do material cria uma dependência de  $H$  com a forma geométrica do mesmo, portanto, não se pode comparar diretamente o valor de  $H$  em sistemas distintos, sem antes considerar o fator do efeito geométrico.

De relevância experimental as curvas  $M \times H$  ou  $B \times H$  trazem informações sobre a natureza magnética do material, como por exemplo, sua anisotropia cristalina, campo de coercitividade, magnetização remanescente, dentre outras. A Figura 4, mostra um exemplo, onde o campo magnético aplicado de forma crescente, após atingir seu valor de saturação faz com que  $M$  e  $B$  não retornem sobre o mesmo caminho quando  $H_0$  é reduzido. A este efeito chamamos histerese magnética.

É interessante ainda observar a dependência térmica, e o pioneiro em realizar uma investigação sistemática das propriedades térmicas de substâncias magnéticas foi Pierre Curie (33, 34). Os resultados destas pesquisas indicaram que materiais magneticamente ordenados o deixa de ser a uma temperatura suficientemente elevada. A essa temperatura limítrofe ordem/desordem chamamos temperatura crítica ( $T_C$ ), sendo portanto, um parâmetro muito importante, tanto do ponto de vista das aplicações técnicas, quanto das teorias que tentam descrever a seu comportamento entrópico.

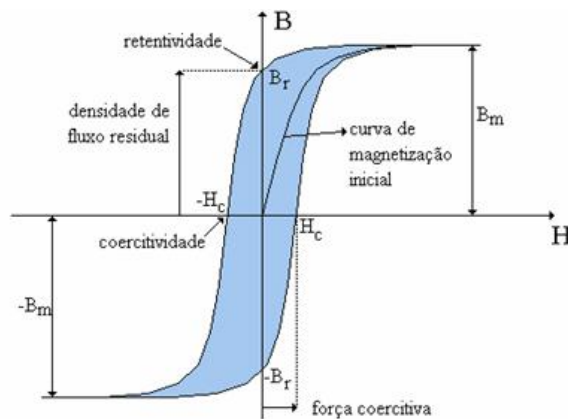


Figura 4: Histerese Magnética.

Em analogia à equação (2.3), a equação (2.4) pode ser escrita como

$$B = \mu H,$$

onde  $\mu = \mu_0(1 + \chi)$ , e  $\chi$  assume ser a susceptibilidade magnética. Geralmente essa quantidade aparece na equação que relaciona o vetor magnetização ao campo magnético, ou seja,

$$M = \chi H, \quad (2.6)$$

cuja unidade no SI é  $\frac{A}{m}$ , para  $M$  e  $H$ , enquanto  $B$ , indução magnética, é dada por Tesla (T).

Os materiais magnéticos, tradicionalmente podem ser classificados de acordo com a sua resposta à campos magnéticos. Macroscopicamente essa resposta pode ser quantificada através da susceptibilidade magnética, ou seja, os materiais diamagnéticos são caracterizados por um valor pequeno de  $\chi$ , de sinal negativo, ou seja, o campo de magnetização opoe-se ao campo aplicado e desaparece quando de sua retirada. Como exemplos desses materiais temos *Zn, Cd, Cu, Ag, Sn*.

O diamagnetismo está presente em todos os materiais, porém este se revela muito fraco diante de outros tipos de comportamentos magnéticos, o que torna seus efeitos imperceptíveis. Dentre estes podemos citar o paramagnetismo, caracterizado por uma susceptibilidade positiva que varia linearmente com o inverso da temperatura (lei de Curie), tendo uma magnetização que desaparece na retirada do campo aplicado. Alguns materiais que se comportam dessa forma são: *Al, Ca, Pt, Ti*, etc.

Já os materiais ferromagnéticos são marcados por uma ordem magnética espontânea

abaixo de uma temperatura crítica, e também por uma dependência linear da  $\chi$  com  $\frac{1}{T}$  acima desta temperatura, de forma que o campo magnetização mantêm-se quando se remove o campo aplicado (ex: *Fe, Co, Ni*). Outros materiais são os antiferromagnéticos, descobertos em 1930 e estabelecidos pelos estados Néel, (*Mn, Cr*). São entendidos por apresentarem  $\chi = 0$ , onde os dipolos se alinham antiparalelamente, respondem fracamente aos campos magnéticos e possuem uma fase ordenada caracterizada por um momento magnético líquido nulo.

Já os ferrimagnéticos como as ferrites, magnetites, em geral óxidos metálicos, apresentam íons com dipolos magnéticos com intensidades diferentes, culminando num momento resultante. Existem outras classificações dos materiais magnéticos como materiais multi-ferrícos, paramagnéticos de Pauli, etc; tema que foge do escopo deste trabalho.

### 2.1.1.2 Magnetismo Microscópico.

Na seção anterior abordamos aspectos macroscópicos do magnetismo, os quais são baseados no vetor magnetização que se relaciona com a indução magnética por meio de parâmetros determinados experimentalmente. No entanto, mesmo com tal descrição é muito útil o seu entendimento microscópico, ou seja, estudo do comportamento a nível atômico e a observação de suas respostas frente à aplicação de um algum tipo de perturbação.

Os materiais magnéticos possuem em sua constituição momentos magnéticos responsáveis por gerar campo magnético natural. Estes materiais serão objeto de estudo no que tange à descrição microscópica do magnetismo, onde o ponto de partida é o momento magnético atômico, o qual admitiremos se conservar no estado cristalino. A nível microscópico o campo magnético é dado pela equação (2.7), a qual é conhecida como campo local ou simplesmente de campo indução magnético microscópico e corresponde ao campo na posição da molécula (ou átomo) gerado por todas as outras moléculas (ou átomos) e fontes externas.

$$B_m = \mu_0 H_m. \quad (2.7)$$

Este campo pode ser quantificado tomando-se uma amostra pequena do material, deixando uma cavidade esférica ao redor do ponto onde será calculado o campo. No intuito de medirmos o campo, devemos conhecer as contribuições inerentes a cada molécula, as quais serão redistribuídas uma a uma na cavidade com finalidade de preenche-la quase

que totalmente na excessão da posição onde se medirá o campo. O campo mensurado tem a mesma forma da equação (2.5), que contará com a contribuição de termos adicionais da superfície da cavidade e dos dipolos da cavidade, expressos por

$$\vec{H}_m = \vec{H} + \vec{H}_S + \vec{H}', \quad (2.8)$$

onde  $H_S$  corresponde à contribuição dos pólos sobre a superfície da cavidade e  $H'$  lê-se como contribuição dos diversos dipolos no interior da cavidade. Fisicamente sabe-se que  $\vec{H}_S = \frac{1}{3}\vec{M}$ , e  $H'$  assume ser a contribuição dipolar já conhecidas dos livros texto.

Por simplicidade limitando-nos à classe numerosa de materiais para os quais a interação dipolar se anula, a equação (2.8) pode ser reduzida a

$$\vec{H}_m = \vec{H} + \vec{H}_S \equiv \vec{H} + \frac{1}{3}\vec{M}, \quad (2.9)$$

esta frequentemente nomeada como campo molecular de Weiss, outrora citado.

A classificação dos materiais magnéticos é consequência da interação dos momentos de dipolo, que têm sua gênese no momento angular orbital e no spin dos elétrons nos íons ou átomos que formam a matéria (35), e da resposta dos mesmos a campo externos. De forma sucinta temos o diamagnetismo que resulta de um fenômeno traduzido pela lei de Lenz operando em escala atômica, o que manifesta uma alteração das correntes eletrônicas em cada átomo (pela aplicação de um campo magnético) de tal maneira que a influência desse campo nessas correntes diminui grandemente. Já o paramagnetismo, se manifesta na tentativa de alinhamento dos momentos moleculares, anteriormente desordenados, na presença do campo magnético externo. Porém, o torque gerado nesse contexto não atinge o alinhamento em sua plenitude conseguindo apenas um movimento precessional dos  $m_i$  em torno de  $H$ .

Em materiais ferromagnéticos, os momentos magnéticos moleculares (ou atômicos) estão quase alinhados, mesmo na ausência do campo externo. A causa desse alinhamento é o campo molecular  $H_m$  que não se anula quando o  $H = 0$ , a não ser que a magnetização também seja nula ( $M = 0$ ). Isto se deve à equação (2.9), generalizada posteriormente por Heisenberg em  $\vec{H}_m = \vec{H} + \vec{H}_S \equiv \vec{H} + \gamma\vec{M}$ , onde  $\gamma$  em casos simples de campos que atendam as condições anteriores se iguala a  $\frac{1}{3}$ . Com essa equação, Weiss valorizou o desempenho dos campos moleculares, o que apresentou boa concordância com os resultados experimentais.

No estudo dos aspectos quânticos do magnetismo, alguns modelos são usados e deles podemos listar: modelo de Ising, Hubbard e Heisenberg. Este último é um dos modelos

mais utilizados para o estudo do magnetismo em sistemas de baixa dimensionalidade, levando em consideração a interação dos momentos magnéticos localizados dos materiais isolantes com momentos vizinhos, bem como a interação desses spins com campos magnéticos externos aplicados. Termos dipolares e anisotrópicos também podem ser incluídos ao formalismo, na finalidade de se obter uma descrição melhor do fenômeno e propriedades magnéticas.

Dentre as opções citadas, esse trabalho toma como ferramenta o modelo de Heisenberg em que enfatizamos as respostas do sistema sem e com a presença de termos dipolares.

## 2.2 O Modelo de Heisenberg.

Na solução de um problema físico pretende-se entendê-lo em um nível mais profundo possível, mas para isto deveríamos ter condições de responder exatamente as perguntas inerentes a cada partícula presente, levando-se em consideração a existência de campos envolvidos e as interações de cada partícula com esses campos à luz da mecânica quântica. Essa compreensão dificilmente é atingida, pois os sistemas físicos reais sempre envolvem um número muito grande de partículas, algo em torno do número de Avogadro  $10^{23}/\text{cm}^3$ . Um exemplo desses sistemas é o magnético, que como fora dito pode ser tratado de forma quântica por alguns modelos tradicionais. Na escolha do modelo de Heisenberg como ferramenta de pesquisa nesse trabalho, enfatizamos que não se fornece uma solução para cada ente (spins), mas uma solução média para todos eles.

O modelo proposto por Heisenberg (36, 37) em 1926, foi um dos primeiros a considerar a interação entre spins como sendo responsável pelo magnetismo espontâneo, e ainda hoje é bastante explorado no estudo das propriedades magnéticas, sendo aplicado tanto na física como na química (38, 39).

Embora quase 90 anos tenham se passado desde sua proposição, a única solução analítica para este modelo que é conhecida se refere às cadeias homogêneas, isto é, aquelas em que todos os sítios da rede são equivalentes, lineares e de spin  $\frac{1}{2}$ , solucionado através do *ansatz* de Bethe (40). Em se tratando de um spin qualquer ( $S$ ) temos soluções aproximadas, como as obtidas via Grupos de Renormalização de Matriz de Densidade (41); Teoria Funcional Densidade (DFT) (42); Segunda Quantização (43).

Esta bem claro que a maneira mais natural de classificarmos as propriedades magnéticas de um material é por sua resposta a um campo magnético aplicado e que esta resposta é

mensurada pela susceptibilidade ( $\chi$ ), como na equação (2.6)

$$M = \chi H$$

Dentre essa classificação o ferromagneto talvez seja o material mais simples magneticamente ordenado, onde seus momentos magnéticos atômicos alinham-se na direção do campo e geram um momento magnético macroscópico diferente de zero. O conhecimento desses materiais é de longas datas e hoje suas aplicações tecnológicas são aparentes em vários setores. Para explicar a ordem magnética e a localização da temperatura crítica, é necessário um modelo que descreva as interações responsáveis pelo comportamento cooperativo entre os átomos e uma análise estatística apropriada a uma sistema de muitos corpos sujeitos a essas interações.

A princípio a magnetização espontânea foi encontrada como reflexo das interações entre os átomos magnéticos. Esta proposta feita por Pierre Weiss em 1907 (44) se mostrou insatisfatória, pois especulava interações dipolares insuficientes ( $10^{-4} eV$ ) para levar em consideração as temperaturas de transição de materiais como ferro e cobalto. Apenas com o nascimento da teoria quântica que pôde-se mostrar a origem das interações como sendo de cunho eletrostático e portanto, assumindo ser consequência da interação coulombiana entre elétrons e da restrição imposta à função de onda pelo princípio de exclusão de Pauli, segundo o qual a função de onda eletrônica total deve ser antissimétrica Figura(5), em relação a troca das coordenadas espaciais e de spin de um par de elétrons. Tal imposição faz com que a energia do sistema seja dependente da orientação dos spins.

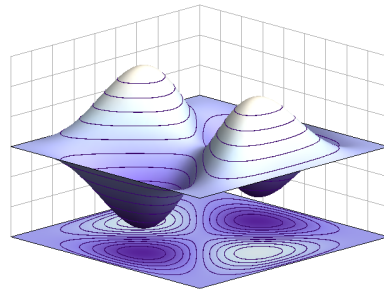


Figura 5: Função de onda antissimétrica.

Para melhor percebermos a manifestação da mecânica quântica na natureza eletrostática da interação, vamos considerar um sistema simples composto por dois elétrons (45). A representação desse sistema é dado pelo seguinte hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V_1 + V_2 + \frac{e^2}{r_{12}} \equiv \hat{H}_0 + \hat{U}_{int}, \quad (2.10)$$

onde os subscritos 1 e 2 indicam respectivamente as coordenadas espaciais dos elétrons,  $V$  é o potencial ao qual estão sujeitos,  $r_{12}$  a separação entre eles e  $\hat{U}_{int}$  é a interação elétron-elétron coulombiana.

Quando no sistema as interações elétron-elétron não são consideradas, mantendo-se as interações de outra natureza, podemos reescrever a equação (2.10) como

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 + V_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V_2 \quad (2.11)$$

Sabemos que no tratamento quântico de sistemas para os quais possamos representá-los via um hamiltoniano descrito por uma soma independente, a função de onda total será o produto das soluções individuais, ou seja,

$$\begin{cases} E^{(0)} &= E_i + E_j & , & i \neq j; \\ \psi &= \psi_i(1)\psi_j(2) & , & \end{cases} \quad (2.12)$$

com  $\psi_i$  e  $\psi_j$  soluções para o problema de um único elétron.

Na consideração do efeito interativo  $U_{int}$ , podemos tratar o problema através da teoria de perturbação. Em primeira ordem a energia corrigida se torna:

$$E = E^{(0)} + \int \psi_i^*(1)\psi_j^*(2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_i(1)\psi_j(2)d^3r \equiv E^0 + C_{ij}, \quad (2.13)$$

onde  $C_{ij}$  representa a integral que relaciona os estados  $i$  e  $j$  da interação coulombiana entre dois elétrons.

Existe uma pequena inconsistência no cálculo anterior no que tange a ausência da consideração do princípio de exclusão de Pauli, que requer a antissimetria da função de onda total na variáveis espaciais e de spin.

A mecânica quântica mostra que para a parte de spin, a álgebra dos momentos angulares para dois spins  $\frac{1}{2}$  nos fornece quatro estados caracterizados pelo seu spin total  $S$ , vide tabela (1), o qual enfatiza que sob permuta de coordenadas de spin, o estado tripleto ( $S = 1$ ) é simétrico e o singlete ( $S = 0$ ) é antissimétrico.

$S = 0$	$S_z = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle -  \downarrow\uparrow\rangle)$
$S = 1$	$S_z = -1$	$ \downarrow\downarrow\rangle$
	$S_z = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle +  \downarrow\uparrow\rangle)$
	$S_z = 1$	$ \uparrow\uparrow\rangle$

Tabela 1: Componentes e Autoestados de Spin- $\frac{1}{2}$

Haja vista que o hamiltoniano não depende das coordenadas de spin,  $[H, S^2] = 0$  e  $[H, S_z] = 0$ , podemos escrever a função de onda de onda total como produto direto entre as funções de onda da parte espacial e spin, ou seja,

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_i(1)\Psi_j(2) + \Psi_i(2)\Psi_j(1)]\Phi_0 \quad (2.14)$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_i(1)\Psi_j(2) - \Psi_i(2)\Psi_j(1)]\Phi_1 \quad (2.15)$$

sendo que  $\Psi_A$  é antissimétrico e  $\Psi_S$ , é simétrico pela troca do spin-1 pelo spin-2.

No caso de desconsideração do termo  $U_{int}$  de interação as equações (2.14) e (2.15) resultam em uma mesma energia (estados degenerados). Levando-se em consideração esta interação, obtemos por teoria de perturbação de primeira ordem

$$\begin{cases} E_S &= E^0 + C_{ij} + J_{ij} & ; \\ E_{AS} &= E^0 + C_{ij} - J_{ij} & , \end{cases} \quad (2.16)$$

onde

$$J_{ij} = \int \Psi_i^*(1)\Psi_j^*(2)\frac{e^2}{r_{12}}\Psi_i(2)\Psi_j(1)d^3r \quad (2.17)$$

A equação (2.17) é denominada de energia de troca de dois elétrons nos estados  $i$  e  $j$ . Sendo assim o estado singleto (spins antiparalelos) e o tripleto (spins paralelos) possuem energias diferentes e o estado fundamental depende do sinal do termo  $J_{ij}$ ; onde  $J_{ij} > 0$  indica ordenamento ferromagnético e  $J_{ij} < 0$  é representativo do antiferromagnetismo. Este tipo de cálculo foi desenvolvido pioneiramente por Pauli para o átomo de Hélio e por Heitler e London para uma molécula de hidrogênio. Em ambos os casos  $J_{ij} < 0$  e, conseqüentemente, os estados de singleto são os fundamentais. Este tratamento mostra que mesmo o hamiltoniano não dependendo explicitamente das coordenadas dos spins, é a orientação relativa destes quem dita a energia do estado fundamental.

A energia dos quatro estados descritos na tabela (1) pode ser explícitas pelo hamiltoniano

$$H = E_S + c(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2, \quad (2.18)$$

onde  $c$  é uma constante proporcional à diferença energética dos estados singleto e tripleto

$\frac{(E_t - E_S)}{2}$ , ou seja, proporcional a  $J_{ij}$ , escolhida para que quando o estado do spin total  $S$  for igual a  $\hbar$ , o hamiltoniano assume o valor  $E_t$ . Expandindo o quadrado em (2.18) encontra-se

$$H = E_S + c\mathbf{S}_1^2 + c\mathbf{S}_2^2 + 2c\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.19)$$

Na equação (2.19) os três primeiros termos do lado direito são constantes absorvíveis por uma redefinição do zero de energia. Daí o hamiltoniano se torna:

$$H = 2c\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.20)$$

com  $J = J_{12}$  no caso de dois elétrons.

A energia de troca é especialmente forte para os elétrons do mesmo átomo. Já para o acoplamento entre os átomos vizinhos, a interação de troca decai exponencialmente para distâncias maiores que o raio das órbitas atômicas (daí o por que da aproximação entre os primeiros vizinhos). De fato, a interação de troca direta (um único elétron com os demais), dificilmente definirá a ordem magnética para sistemas com spin localizados, o que faz sentido uma vez que esta interação está associada com a indistinguibilidade de partículas idênticas, que por sua vez, só tem consequências apreciáveis quando as funções de onda começam a se superpor.

Dirac, em 1928 (46), mostrou que para o caso especial de elétrons localizados em orbitais ortogonais, o efeito do princípio de Pauli poderia ser levado em conta adicionando ao hamiltoniano um termo da forma

$$\sum_{i < j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.21)$$

com  $S_i$  um operador de spin atuando no  $i$ -ésimo sítio da rede.

Portanto a dependência energética com o spin, advinda do princípio de Pauli, pode ser contabilizada por uma interação spin-spin da forma

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.22)$$

Deduções mais formais para a interação de troca podem ser encontradas em vários livros textos, vide referência (47). A equação (2.22) define o hamiltoniano de Heisenberg,

que é amplamente utilizado para descrever propriedades de materiais magnéticos (48), embora sua forma tenha sido deduzida pela primeira vez por Dirac e utilizada na teoria magnética por Van Vleck (49).

Pode-se ainda notar que o hamiltoniano da equação (2.22) não leva em consideração alguns fatores importantes na determinação de propriedades magnéticas em cristais reais, como as contribuições dos momentos magnéticos orbitais, efeitos de campo cristalino (que geram anisotropia magnética), efeitos desmagnetizantes, etc. Dependendo do caso específico, esses fatores podem assumir destaque na obtenção de respostas de tais sistemas, mas sua consideração pode trazer complicações matemáticas intratáveis.

No modelo de Heisenberg uma aproximação muito utilizada é a semiclássica, na qual o spin das partículas magnéticas são considerados como vetores clássicos com suas três componentes conhecidas. Além disso, as interações de troca entre os primeiros vizinhos será dita  $J_1$  enquanto a interação com segundos vizinhos admitir-se-á  $J_2$ . Enfatizamos neste trabalho situações com e sem a participação dos segundos vizinhos no intuito de verificarmos as contribuições efetivas desses sítios no espectro da teoria.

Outro ponto importante que podemos ressaltar sobre o modelo de Heisenberg é seu alto grau de simetria, sendo invariante sob qualquer rotação em seus spins, desde que essa transformação ocorra em todos os spins da rede. Além disso, é sabido que este modelo não apresenta ordenamento de longo alcance em duas dimensões a qualquer temperatura diferente de zero; fato este rigorosamente provado por Mermin e Wagner em 1966 (50).

Quando falamos de interação de longo alcance estamos nos reportando àquelas em que se vá além do raio orbital; e a exemplo destes podemos citar as interações dipolares. Nesse contexto, essa interação, de origem puramente eletromagnética, se deve ao campo magnético dos dipolos do próprio material. Como se sabe (51) o campo magnético criado por um dipolo magnético  $\mathbf{m}$  a uma distância  $\mathbf{r}$  destes, é dado por

$$B_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{m}], \quad (2.23)$$

onde  $\mathbf{r}$  é o vetor unitário que vai da posição do dipolo  $\mathbf{m}$  ao ponto de medida.

Prever a configuração do estado fundamental de um sistema com interações dipolares não é uma tarefa fácil, pois esta interação depende da complicada forma do posicionamento de cada um dos momentos magnéticos na rede. É essa dependência com a posição de cada um desses spins que dá origem à chamada anisotropia de forma.

Anisotropia é uma característica de uma substância quando esta possui propriedade fi-

sica que varia com a direção. As interações de troca, além dos campos internos produzidos pela própria formação da rede cristalina e quebras de simetrias (presença de interfaces), podem ser responsáveis pelo surgimento de uma direção privilegiada, em outras palavras, uma anisotropia. Devido às características originárias da anisotropia, apesar de que seus efeitos sejam os mesmos, ela pode ser classificada em magnetocristalina devida às direções cristalográficas do material; magnetoelástica, fruto de aplicação de tensão na rede; anisotropia de superfície, resultado da quebra de simetria na superfície do material, prevista por Néel (52) que relacionou à quebra da simetria translacional de superfície a geração desta anisotropia; magnetostática ou de forma, a qual depende diretamente das interações dipolares devido à sua dependência na posição de cada um dos spins.

Recentemente foi verificado que a anisotropia de forma produz efeitos muito interessantes em materiais magnéticos nanoestruturados, como o aparecimento de vórtices em discos magnéticos (53); surgimento de "monopólos magnéticos" em gelos de spin (54); além de ser uma das interações responsáveis pelo aparecimento da transição de reorientação (55). Nesse ínterim, se faz necessária a compreensão dos efeitos das interações dipolares em redes magnéticas, as quais serão abordadas com uso do modelo de Heisenberg.

### *3 Ondas de Spin em Sistemas de Baixa Dimensionalidade.*

Ondas de spin são distúrbios ordenados que se propagam em materiais magnéticos, ou em outras palavras, são os estados excitados de menor energia dos sistemas de spin acoplados por interações de troca. Estas baixas excitações coletivas ocorrem em redes magnéticas com simetria contínua e estão associadas a excitações magnéticas elementares acima do estado fundamental ferromagnético.

Em se tratando de excitações elementares, podemos nos reportar ao ponto de vista das quasi-partículas, onde as ondas spin, similarmente às excitações em redes cristalinas (fônons), são conhecidas como magnons. Estes últimos são modos bosônicos da rede de spin, os quais estão suscetíveis a efeitos entrópicos, ou seja, com o aumento da temperatura o comportamento termodinâmico das ondas de spin reduzem a magnetização espontânea do ferromagneto.

Estas ondas constituem de fato uma fenomenologia, pois já foram observadas experimentalmente através de algumas técnicas das quais podemos citar: Espalhamento inelástico de neutrons, espalhamento inelástico da luz como Raman e Brillouin, Espalhamento inelástico de elétrons e Raios-X, Ressonância de ondas de spin (ressonância ferromagnética).

Existem muitas razões pelas quais se justifica o interesse pelo tema, onde algumas delas são: a sua observação experimental que a qualifica no rol das fenomenologias observáveis; devido a serem mais sensíveis termicamente falando frente aos fônons, acabam dominando o comportamento térmico do sistema a baixas temperaturas possibilitando o cálculo das propriedades termodinâmicas como a energia livre total, temperatura crítica de materiais, condutividade térmica e elétrica, etc. Portanto, abordaremos um pouco mais sobre o assunto.

## 3.1 Ondas de Spin e suas Interações.

### 3.1.1 Ondas de Spin

A ideia de ondas de spin como excitações elementares em materiais magnéticos ordenados foi inicialmente proposta por Bloch (2) onde afirmou ser esta uma distribuição coerente de um spin invertido sobre um grande número de outros spins atômicos alinhados em uma rede cristalina. Além disto evidenciou que os estados excitados de baixa energia de um ferromagneto obtidos da teoria estavam em bom acordo com os resultados termodinâmicos experimentais.

A exemplo podemos citar o surpreendente cálculo da expressão para a magnetização espontânea:  $M(T)/M(0) = 1 - aT^{3/2}$ , com  $a > 0$ , conhecida como lei  $T^{3/2}$  da magnetização, o que é muito próximo aos resultados experimentais para uma larga faixa de temperatura ( $0 \leq T \leq 0,5T_C$ ) (56). Esse resultado foi obtido com a utilização de um modelo simples de cadeia linear de spin  $\frac{1}{2}$  e na aproximação de pequenos momentos. Desde então os resultados experimentais tem acumulado muito sucesso, como atesta Keffer (57).

Estamos falando de uma teoria linearizada, pois Bloch admitiu que a densidade de spins invertidos é tão pequena que seus efeitos de obstrução e interação entre duas ou mais ondas de spin podem ser negligenciados. Essa aproximação é dita boa em baixas temperaturas, perdendo essa qualidade gradativamente com o aumento da mesma.

Ainda na ênfase da teoria linear de Bloch, outras pesquisas de destaque teórico foram realizadas, como as de Herring e Kittel (58) responsáveis pela elaboração de uma teoria de ondas de spin fenomenologicamente mais simples, a qual não estava submetida à estrutura atômica subjacente do ferromagneto em questão. Destas constatações emergiu uma pergunta natural: Como uma teoria aproximada conseguiria prever resultados experimentais tão precisos? E até que ponto esta seria válida?. No intuito de resolver estas e outras questões, houveram muitas pesquisas de marcante importância como a feita por Hans Bethe em 1931 (40), o qual realizou um estudo do efeito das interações das ondas de spin numa cadeia unidimensional dessas ondas (onde não se constata o ferromagnetismo), mostrando que em adição às ondas de spin elementares de Bloch existem excitações das quais suas interações são provenientes de dois ou mais spins invertidos. Outro que podemos citar seria Möller que em 1933 (59) generalizou o método de Bloch, mas pouco acrescentou à compreensão teórica.

Como resultado desse cenário, hoje existem diversas formas de abordagens ao estudo

das ondas de spin, como por exemplo: a teoria Semiclássica, que trata os spins como vetores precessionantes. Este ponto de vista é particularmente útil na obtenção de uma interpretação física (ou geométrica) das ondas de spin, que são ilustradas esquematicamente para um ferromagneto na Figura 6,

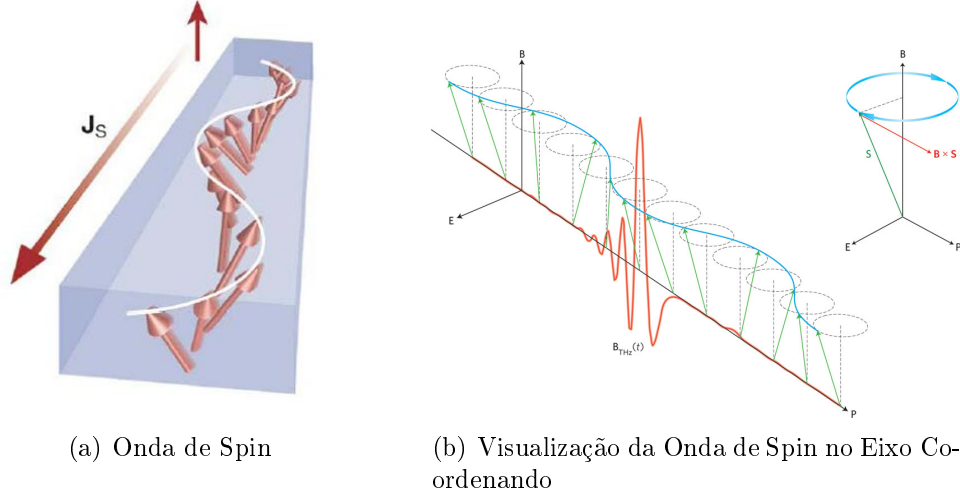


Figura 6: Ondas de Spin

Outras representações de mesmo cunho para o spin precessionante podem ser admitidas para outros ordenamentos, incluindo antiferromagnéticos e ferrimagnéticos. Apesar de que nesse trabalho enfatizamos o tratamento quântico das ondas de spin; se mostra útil discutirmos de forma sucinta alguns aspectos da abordagem semiclássica.

### 3.1.2 Formalismo Semiclássico.

O ponto de partida para uma análise semiclássica é o movimento natural de um spin eletrônico num campo magnético. A precessão do spin à busca da posição de equilíbrio nesse campo  $H$ , é mostrado na Figura 7 da qual percebe-se que o equilíbrio é garantido na orientação paralela ao campo. Isto se deve ao fato do torque, equação (3.1), associado ao spin ser exercido pelo campo sobre o momento magnético  $\vec{\mu} = g\mu_B\vec{S}$ :

$$\vec{T} = g_B\vec{S} \times \vec{H}, \quad (3.1)$$

sendo nulo nesta posição. Naturalmente este paralelismo traduz o mínimo de energia do momento magnético no campo dada por:

$$E_M = g\mu_B\vec{S} \cdot \vec{H}, \quad (3.2)$$

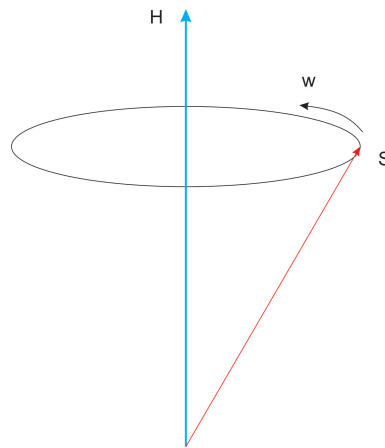


Figura 7: Precessão do Spin.

onde admite-se que o sentido do momento magnético é oposto ao do spin devido à carga negativa do elétron.

Se o spin for desviado da posição de equilíbrio, por exemplo pela ação de um campo externo transversal ou excitação térmica, ele passará a precessionar em torno de  $H$ , como ilustrado na Figura 7. Este movimento resulta do fato de que quando o spin está desviado da direção de  $H$ , o torque que atua sobre ele, dado pela equação (3.1), é perpendicular ao plano formado por  $S$  e  $H$ . Este torque produz uma variação de momento angular dada pela lei de Newton

$$\frac{dJ}{dt} = T, \quad (3.3)$$

que promove uma rotação do plano  $SH$  em torno de  $H$ , correspondendo à precessão de  $S$  em torno de  $H$ . Como o momento angular é proporcional ao spin,  $\vec{J} = \hbar\vec{S}$ , pode-se combinar (3.1) e (3.3) para se obter a equação para o momento angular de spin

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \gamma\vec{S} \times \vec{H}, \quad (3.4)$$

onde  $\gamma = g\mu_B/\hbar$ , é o fator giromagnético, no sistema gaussiano de unidades. A solução da equação (3.4) num campo  $H$  estático traduz um movimento de precessão do spin em torno do campo, com frequência angular dada por

$$w_0 = \gamma H. \quad (3.5)$$

Para  $g = 2$ , o valor de  $\gamma$  é  $(2\pi)2,8 \text{ GHz}/\text{Koe}$ , portanto, para campos com intensidades de alguns  $\text{Koe}$ , como em eletromagnetos típicos de laboratórios, a frequência situa-se

na faixa de microondas. É nessa escala que se realiza alguns experimentos como o da ressonância ferromagnética, ou FMR (*ferromagnetic resonance*) onde se aplica um campo de microondas numa amostra situada num campo magnético estático  $H_0$  e se observa as linhas de absorção ressonante. Nesse experimento o campo magnético da radiação de microondas é aplicado perpendicularmente ao campo estático de modo que ele tende a perturbar os spins e desvia-os da posição de equilíbrio. Já para frequências de radiação próximas a do modo uniforme, o campo em radio frequência (RF) produz movimento de precessão dos spins e a amostra absorve energia da radiação.

A referida ressonância é caracterizada por uma linha de absorção, cuja largura cede informações sobre o mecanismo microscópico de reflexão dos magnons. Esses comportamentos são mensurados pela abordagem semiclássica da ressonância, que é baseada na equação de movimento da magnetização macroscópica definida como o momento magnético por unidade de volume

$$\vec{M} = \sum_i \frac{g\mu_B}{V} \vec{S}_i, \quad (3.6)$$

e a descrição do movimento é obtida diretamente das equações (3.4 e 3.6), concedendo a seguinte representação matemática

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}_{ef}, \quad (3.7)$$

sendo  $H_{ef}$  o campo magnético efetivo que atua sobre os spins. Este campo contém, além dos campos externos aplicados à amostra, campos efetivos que representam os torques internos que atuam sobre os spins. Resumidamente, podemos dizer que a abordagem semiclássica baseia-se na equação (3.7).

No mais, como já mencionamos, o tratamento semiclássico é só mais uma das diversas formas de obtenção do espectro das ondas de spin. Outras análises são possíveis tais como a abordagem *hopping*, que enfatiza o caráter pontual dos spins onde a dinâmica dos efeitos interativos provenientes de alterações nos estados dos spins, avaliados via mecânica quântica e obedecendo o princípio de exclusão de Pauli e a lei de conservação do spins, configuram o estado fundamental.

Por último, mas não menos importante, realçamos a transformação de Holstein-Primakoff (método utilizado nesse trabalho) que enfatiza o aspecto quântico, justificando sua discussão.

### 3.1.3 Tratamento Quântico.

Certas características do sistema de spin não aparecem no tratamento semiclássico porque são de natureza intrinsecamente quântica. Um exemplo disso são as consequências das interações de troca, que governam as ondas de spin, as quais em sistemas ferromagnéticos, por exemplo, são responsáveis pelo acoplamento entre spins vizinhos. Isto tudo resulta em excitações do sistema de spins que correspondem a precessões coletivas em torno da posição de equilíbrio. A excitação de menor energia é o chamado modo uniforme no qual os spins precessionam em torno de  $H$  mantendo-se paralelos uns em relação aos outros, ou seja, com mesma frequência e fase, como mostrado na Figura 8. Neste caso a interação não contribui para a frequência de precessão que é dada pela mesma expressão da equação (3.5).

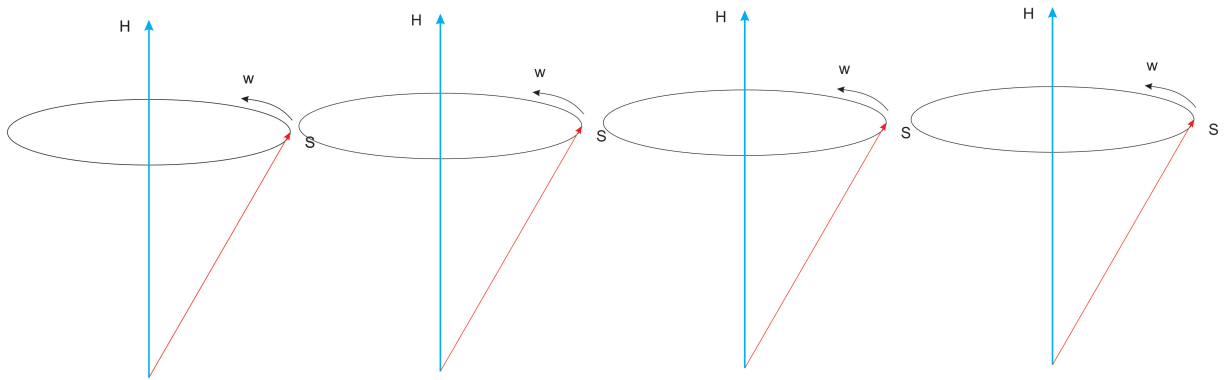


Figura 8: Modo Uniforme de Propagação.

Devido à interação entre os spins, o sistema também possui modos coletivos nos quais a fase de precessão varia no espaço, a estas chamamos Ondas de Spin, ou seja, o modo uniforme no qual os spins precessionam em fase ao longo da amostra corresponde a apenas um dos modos naturais de excitação do sistema, permitindo a existência de modos como os mostrados na Figura 9.

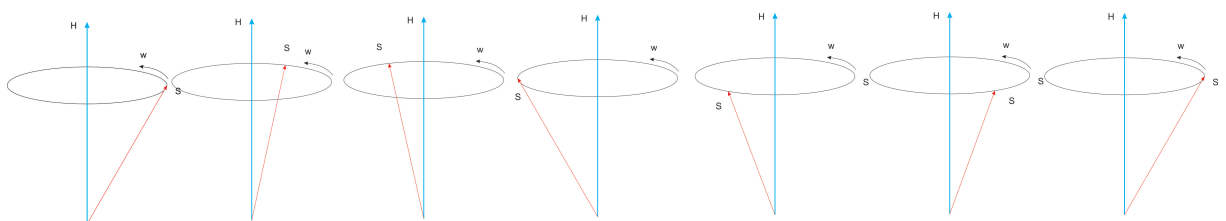


Figura 9: Modo não Uniforme de Propagação.

Essa fenomenologia é muito comum em materiais ferro, ferri ou antiferromagnéticos; na Figura 9 percebemos uma diferença de fase do primeiro ao último spin sendo de  $2\pi$ ,

correspondendo a um comprimento de onda. Nessa óptica entendemos que o modo uniforme é na realidade uma onda de spin de comprimento de onda infinito, e à medida que essa quantidade diminui resulta em um aumento do ângulo entre spins vizinhos, e por conseguinte acresce a contribuição da energia de troca para a energia de excitação.

A abordagem quântica escolhida para o trato do problema está baseada na técnica de segunda quantização, na qual as energias do sistema que dependem dos operadores de spin são expressos em termos de operadores de criação e destruição de quanta de ondas de spin (os magnons), ou seja, em teorias quânticas uma onda de spin pode ser pensada como sendo um quantum de inversão de spin que se "espalha" coerentemente sobre todo o cristal (2).

Esses magnons são quase-partículas que estão sujeitas a efeitos de temperatura e obedecem a estatística de Bose-Einstein (já que são excitações coletivas e portanto permitem a existência de mais de um quantum se propagando com mesma frequência). Porém, pode-se constatar que os magnons não são modos normais exatos do sistema magnético, e isto acarreta interações entre estes, evidenciando efeitos não-lineares.

Nesse ínterim, a abordagem de Holstein-Primakoff em 1940 (60), já citada, assume um papel de destaque. Estes foram os pioneiros na elaboração de um formalismo matemático coerente, relacionando os operadores quânticos de spin e os bosônicos, em outra palavras, uma transformação com finalidade de conectar operadores dos espaço de Hilbert com dimensionalidades diferentes. Eles consideraram o comportamento de uma matriz de spin ferromagnética tridimensional em um campo magnético externo, analisando as contribuições advindas dos termos dipolares entre os spins. Tudo isto, pode ser feito pela definição de um conjunto de coordenadas as quais descrevem exatamente os estados quânticos do sistema e que possui aparência de "amplitude das ondas de spin".

Em termos dessas coordenadas o hamiltoniano se divide em duas partes essenciais: uma quadrática em suas amplitudes indicando o comportamento da teoria linear de Bloch onde se observa a porção não interagente da teoria, e a não bilinear responsável pelos efeitos das interações destas ondas. Nesse contexto é apropriado analisar o sistema interagente das ondas de spin, quando submetido a campos magnéticos externos fortes, tratando a contribuição bilinear como sendo uma primeira aproximação e a parte não quadrática pela teoria de perturbação.

Como vimos este é um método não linear aproximado e reservado de resultados exatos. Na época o estudo da real contribuição das interações das ondas de spin aos modos livres de Bloch se tornou ponto de evidência; o que na década de 50 resultou numa série de conclusões discrepantes a respeito da ordem desta contribuição, como exemplo, na expansão da magnetização espontânea em termos da temperatura. Opechowski em 1937 (61) havia estimado uma contribuição da ordem de  $T^2$ . Entretanto, Schafroth em 1954 (62) usando o formalismo de Holstein-Primakoff encontrou um termo na ordem de  $T^{\frac{7}{4}}$  com correção positiva, ao passo que Van Kranendonk em 1955 (63) fazendo uso de outro método obteve um termo de mesma ordem, porém com um coeficiente diverso.

Foi exatamente este cenário que incentivou Dyson em 1956 (58) à elaboração de dois trabalhos que também assumiram papel de destaque na compreensão dos efeitos das interações das onda de spin. Este verificou que houve por parte dos trabalhos outrora citados uma superestima dos efeitos interativos frente aos modos de Bloch, perspectiva essa que apesar de interessante, fazia uso de aproximações que não retratavam um ferromagneto real.

A aproximação de Holstein-Primakoff, na utilização de  $\frac{a^\dagger a}{S} \ll 1$  (64), se mostra de grande utilidade no estudo das propriedades quânticas das ondas de spin, pois através desta fica clara a contribuição dos efeitos bilineares e não quadráticos, o que nos permite uma visão de alguns fenômenos interessantes como a interação magnon-magnon, bombeamentos e atenuação de ondas de spin, cálculos de renormalização, produção de sólitons, etc.

Face a tudo que fora discutido percebemos a importância do papel das interações nesses sistemas, e a esse tema dedicamos um pouco de atenção.

### 3.1.4 Interações em Sistemas Magnéticos.

Um material ferromagnético após sofrer um aquecimento acima de  $T_C$  seguido de um resfriamento apresenta a formação espontânea de domínios de spin nos quais os momentos magnéticos estão alinhados de forma paralela na ausência de uma magnetização resultante devido ao caracter estatístico desses domínios que apontam de forma aleatória em todas as direções.

A justificativa para tal efeito é o balanço energético envolvido no processo, representado pelas interações que ocorrem no interior do sistema. Portanto discutiremos um pouco sobre algumas interações inerentes aos mesmos.

#### 3.1.4.1 Interação de Troca.

De uma maneira geral as ondas de spin sofrem influência de efeitos térmicos, dipolares, de orientação cristalográfica, da geometria do cristal, do campo magnético, da interação de troca, etc. Esta última consiste de uma interação eletrostática pertinente a dois campos que interagem à distância. Essa interação é responsável por uma espécie de energia denominada energia de troca de curto alcance pois diminui fortemente seu poder de ação à medida que nos afastamos do domínio do raio orbital, portanto sendo essencialmente relevante no processo interativo envolvendo os primeiros vizinhos.

Este tipo de interação pode ser melhor entendida na consideração de um sistema com dois elétrons, cada um detentor de um spin bem determinado  $S_1$  e  $S_2$ . Daí, ao observarmos as duas configurações antissimétricas possíveis mostradas na Figura 10 constatamos que suas energias são diferentes, o que se deve ao princípio de exclusão de Pauli (65).

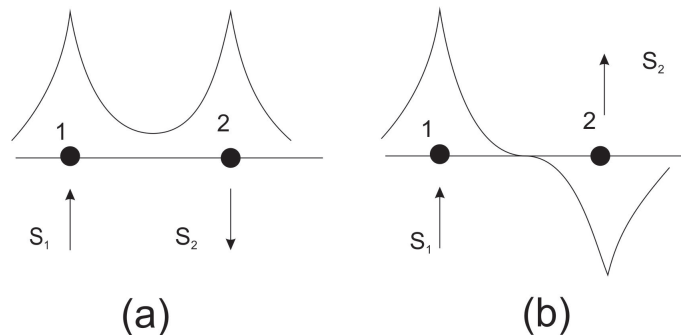


Figura 10: Spins Antiparalelos (a) e Spins Paralelos (b).

Finalmente somos expostos ao fato de que a diferença de energia entre as duas configurações é representada pela energia de troca do sistema, ou seja, essa energia é a responsável

pela manutenção do estado fundamental com os spins alinhados, e portanto a toda intenção de alteração do mesmo, o agente externo deverá empregar uma energia pelo menos idêntica à de troca.

Este termo depende do vetor de onda da excitação e para grandes intensidades dos mesmos existe uma maior contribuição à energia total do sistema, sendo responsável pelo carácter ferromagnético que venha apresentar. Essas conclusões são relativamente fáceis de serem tiradas quando se estuda um sistema de dois elétrons, porém na perspectiva de sistemas mais complexos que gozem da presença de três ou mais elétrons, o hamiltoniano de Heisenberg deve ser escrito como:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (3.8)$$

onde o somatório corre sobre todas as interações possíveis do sistema. Nesta equação notamos a presença do termo  $\frac{1}{2}$ , que aparece com a finalidade de cancelar interações duplicadas do sistema. Em outras palavras, a interação de  $S_1$  com  $S_2$  e a de  $S_2$  com  $S_1$  apareceriam após a efetuação dos somatórios, porém existe apenas um valor deste tipo de interação para cada spin, em seus respectivos sítios. E como na equação temos um produto escalar, não há relevância alguma na permuta dos termos.

#### 3.1.4.2 Interação Anisotrópica.

Quando um sistema magnético é dito isotrópico, seus spins podem rotacionar em qualquer direção sem que haja a necessidade do gasto energético. Isto reflete que a magnetização é livre, tendo a possibilidade de apontar em qualquer direção ou sentido. Porém, devido ao fato das funções de onda atômicas dos íons magnéticos muitas vezes não serem esféricas (tipo "d" em metais de transição e "f" em terras raras), estas procuram se acomodar segundo o campo magnético cristalino no sítio em que se encontram. Como decorrência disto, existem eixos preferenciais ao longo dos quais os momentos magnéticos se alinham, estes chamados de eixos de fácil magnetização (66).

As direções opostas aos dos eixos de fácil magnetização são aquelas em que os momentos magnéticos atômicos não "apreciam" apontar, pois custaria muita energia ao sistema, o que justifica sua nomenclatura de eixos duros. A este fenômeno chamamos de anisotropia magnética (67), que surge via interação Spin-Órbita (68), e deve ser expressa no hamiltoniano em questão.

Os materiais ferromagnéticos, por exemplo, não gozam de uma perfeita simetria no que

diz respeito às suas propriedades magnéticas. Estes geralmente apresentam diferenças entre as direções possíveis, refletindo em consequências muito importantes como a influência da anisotropia ser maior (menor), gerando uma maior (menor) magnetização, envolvendo uma maior (menor) quantidade de energia em uma determinada direção do que em outra, dependendo apenas da dificuldade que esta venha a ter em girar na direção da referida magnetização (69).

De maneira específica, nos filmes finos a espessura do material pode provocar uma intensificação dos efeitos causados pela anisotropia. As assimetrias locais de superfície e interfaces são mais relevantes, tornando-se fundamentais para definição do comportamento magnético, o que não acontece em amostras massivas (*Bulk*), onde os efeitos da anisotropia realmente não são de grande relevância (70). Assim vale ressaltar a importância da descrição do sistema de baixa dimensionalidade via um hamiltoniano que contenha termos representativos das influências anisotrópicas em suas energias livres. Esses efeitos podem ser computados mediante aplicação de campos magnéticos externos em um material de mesma natureza em que sua curva de magnetização sofre intensas alterações.

A anisotropia pode ser causada por diversos fatores: como aplicação de um *stress*, de um gradiente de temperatura, por sua estrutura cristalina, etc. Este último reflete sobre as simetrias cristalinas, que dependendo do caso, a existência de um ou mais eixos de anisotropia (fácil magnetização), o que não configura uma anisotropia uniaxial.

Anisotropias uniaxiais são aquelas que apresentam um único eixo de fácil magnetização como as que acontecem em cristais com simetrias hexagonais, tetragonais e trigonais, cujas energias anisotrópicas podem ser descritas em forma de série de potência (68).

$$E_A = -K_1 \cos^2(\theta) - K_2 \cos^4(\theta) - \dots \quad (3.9)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre o eixo fácil e o momento magnético, e  $K_1$  e  $K_2$  são as constantes de anisotropia uniaxial de primeira e segunda ordem, respectivamente. Pela equação (3.9) constatamos que se  $K_1$  e  $K_2$  forem positivas, a energia é mínima quando o momento magnético estiver na direção  $\theta = 0, \pi$  (eixo fácil). Por outro lado, se  $K_1$  e  $K_2$  forem negativos, a energia será mínima quando  $\theta = \frac{\pi}{2}$ , caracterizando um plano fácil de magnetização, perpendicular ao eixo de simetria.

Em nosso trabalho, em que supomos uma amostra ferromagnética, as energias associadas à anisotropia são representadas pelo Hamiltoniano que se segue:

$$H_{anis} = g\mu_B \sum_i H_{Ai} S_i^z \quad (3.10)$$

### 3.1.4.3 Interação Zeeman.

Nos materiais ditos magnéticos admite-se a existência de momentos magnéticos bem definidos que através de sua interação estabelecem uma ordem ao sistema. Como sabemos, se um dipolo magnético  $\vec{\mu}$  é colocado sob a influência de um campo magnético  $\vec{h}_0$ , este dipolo estará sujeito a um torque  $T$ , dado por

$$T = -\mu H \sin(\theta), \quad (3.11)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\mu$  e  $h_0$ .

Daí a ação do campo uniforme é tentar girar o dipolo até que este fique paralelo ao campo. Em mecânica quântica, o momento magnético  $\mu$  de um átomo está diretamente relacionado ao seu momento angular  $J$

$$\mu = g\mu_B J, \quad (3.12)$$

com  $\mu_B$  sendo o magneton de Bohr, a unidade de medida dos momentos magnéticos, e o fator  $g$  é conhecido como fator de Landé e se mede

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

Estes efeitos estão intimamente ligados ao efeito Zeeman descoberto pelo físico holandês Peter Zeeman em 1896, o qual estudava as influências do campo magnético sobre os estados de polarização da luz. De forma resumida, o efeito Zeeman se concretiza no descobrimento das linhas espectrais de um sistema quando este sofre influência de um campo magnético similar ao que acontece no efeito *Stark* na presença de campos elétricos. Após sua descoberta experimental, foi Lorentz em 1897 (71) quem lançou mão de sua explicação teórica.

### 3.1.4.4 Interação Dipolar.

Conjuntamente as interações isotrópicas que são consideradas no balanço energético, pode-se levar em conta as anisotropias de várias origens, como a exemplo as que já citamos.

Porém, ainda é de relevância comentarmos as interações de ordem mais baixa, a saber, as dipolares descritas como

$$H_{dip} = \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_{ij} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (3.13)$$

que representam a interação dipolo-dipolo magnético, isto é, o potencial magnetostático de cada spin imerso no campo dos outros (72).

Esta interação esta presente em todos os sistemas reais, onde o somatório é calculado sobre todos os possíveis pares de sítios na rede e  $\vec{r}_{ij}$  é o vetor que conecta o sítio  $i$  e ao sítio  $j$ .

Em muitas situações de pesquisa teórica essas interações são desprezadas por sua baixa intensidade frente as interações de troca (curto alcance), porém quando lidamos com situações em que o sistema está em baixas temperaturas, estas devem ser consideradas. Percebe-se que estados de baixa dimensionalidades (1-D e 2-D) a interação dipolar assume papel de importância na pesquisas das propriedades magnéticas, além de que as interações entre dois spins quaisquer decaem lentamente com a distância e depende diretamente da orientação relativa dos mesmos e de suas respectivas orientações ao vetor que os liga aos sítios. Conseqüentemente o estado fundamental de uma sistema que é determinado apenas com as interações de troca é diferente daquele em que se leva em consideração as interações dipolares.

Dessas colocações justificamos as perspectivas dos cálculos das relações de dispersão, em sistemas de baixa dimensionalidades, como as fitas de spin magnéticas descritas pelo modelo de Heisenberg à baixas temperaturas. Nas análises montamos um modelo de Heisenberg que ora goza da presença dos termos dipolares ora não, no intuito de verificarmos as diferentes perspectivas nos resultados explícitos em suas relações de dispersão, que revelam o comportamento espectral do sistema físico.

### 3.1.5 O Hamiltoniano.

O objeto físico aqui é um sistema de baixa dimensionalidade (2-D), uma fita de spins magnética, que será tratada via hamiltoniano de Heisenberg no limite de baixas temperaturas ( $T < T_C$ ). O hamiltoniano de um sistema físico é uma quantidade de suma importância para a compreensão do que se passa no mesmo. Através dele podemos de primeira mão conhecer o que está envolvido na situação e nos revela o que será de relevância para a análise. De maneira bem simples podemos dizer que o hamiltoniano tanto na mecânica clássica quanto quântica é um operador que engloba todas as características do sistema, revelando a energia inerente a ele através da soma de todas elas.

O nosso escopo de estudo aqui se encaixa perfeitamente nesse cenário, pois lidamos com um sistema de muitos entes (os spins) que são taxados como idênticos, alinhados, e com interação de troca isotrópica entre si. Sistema este que será estudado com uso do formalismo de Heisenberg representado pelo hamiltoniano

$$H = H_{ex} + H_z + H_{anis} + H_{dip}, \quad (3.14)$$

onde cada um dos termos associa-se a um tipo de energia diferente.

Na especificação dos termos da equação (3.14) identificamos o primeiro ( $H_{ex}$ ) como sendo responsável pelas interações de troca e por essa razão ele é conhecido como energia de troca. Essas interações são de curto alcance, e enfatizam os vizinhos mais próximos. Esse hamiltoniano é dado por

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (3.15)$$

onde o termo  $J_{ij}$  é conhecido como termo de troca e  $S_i$  é o operador de spin no sítio  $i$ , o qual é tratado como um vetor 3D.

A segunda parcela da equação (3.14) é também conhecido como termo Zeeman e representa a energia envolvida devido as interações entre cada um dos spins e um campo magnético externo  $h_0$  aplicado ao sistema e orientado para o sentido positivo do eixo  $z$ . Este se escreve como

$$H_z = -g\mu_B h_0 \sum_i S_i^z. \quad (3.16)$$

Já a terceira porção,  $H_{Anis}$ , como dissemos é a conhecida interação anisotrópica, e o

quarto termo devido aos dipolos magnéticos pode ser escrita como

$$H_{dip} = \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (3.17)$$

onde  $\bar{D}_{ij}^{\alpha\beta}$  representa a contribuição dipolar das interações, as quais são de longo alcance e se tornam de fundamental importância em se tratando de vínculos entre sítios localizados à distâncias maiores que o raio orbital. Este pode ser matematicamente explícito por

$$\bar{D}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\delta^{\alpha\beta}}{r_{ij}^3} - \frac{3r^\alpha r^\beta}{r_{ij}^5} \bar{\delta}_{\alpha z} \bar{\delta}_{\beta z} \quad (3.18)$$

onde  $\bar{\delta}_{\alpha z} = \delta_{\alpha z} - 1$  e  $\bar{\delta}_{\beta z} = \delta_{\beta z} - 1$ .

Na observação das equações (3.10) e (3.16), vemos a possibilidade de escrevermos

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \sum_i (H_0) S_i^z + \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (3.19)$$

onde  $H_0 = H_A - h_0$ , fazendo  $H_{Ai} = H_A$  constante.

Apesar desse hamiltoniano assumir ser muito satisfatório para o trato do problema, ainda seria conveniente mais uma alteração, pois estamos trabalhando com magnons, e o hamiltoniano de Heisenberg está escrito em função de operadores não bosônicos. Nesse intuito utilizaremos a aproximação de Holstein-Primakoff.

### 3.1.6 Aproximação de Holstein-Primakoff.

Dentre os vários métodos existentes para expressar o hamiltoniano de Heisenberg em função dos operadores bosônicos, iremos utilizar a transformação de Holstein-Primakoff. Com essa finalidade podemos escrever os operadores de spin na forma de operadores "ladder" (73), como segue:

$$\begin{cases} S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y; \\ S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y. \end{cases}$$

onde as componentes dos operadores de spin atendem à seguinte relação de comutação

$$[S_i^l, S_j^m] = i\varepsilon^{lmn} \delta_{ij} S_k^n, \quad (3.20)$$

com as letras  $l$ ,  $m$  e  $n$  simbolizando os eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$

Já os operadores "ladder" atendem à seguinte álgebra

$$\begin{cases} [S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij}S_i^z; \\ [S_i^z, S_j^\pm] = \delta_{ij}S_j^\pm. \end{cases} \quad (3.21)$$

Na utilização das equações dos operadores ladder (3.21) podemos escrever

$$S_j^x = \frac{1}{2}(S_j^+ + S_j^-) \quad (3.22)$$

$$S_j^y = \frac{1}{2i}(S_j^+ - S_j^-), \quad (3.23)$$

assim na montagem do hamiltoniano de Heisenberg o termo  $H_{ex}$  fica

$$\begin{aligned} H_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \\ H_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Por simplicidade trataremos isoladamente o argumento da equação (3.24), então

$$J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = J_{ij} \left[ \frac{1}{4} (S_i^+ + S_i^-)(S_j^+ + S_j^-) - \frac{1}{4} (S_i^+ - S_i^-)(S_j^+ - S_j^-) + S_i^z S_j^z \right]$$

$$J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right]$$

Desta forma o hamiltoniano (3.24) assume

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] \quad (3.25)$$

Os outros termos da equação (3.14) são dependentes do operador  $S_z$  e portanto nos permite sua reescrita

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^z - \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^*. \quad (3.26)$$

onde  $\bar{D}_{ij}^* = \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^{\alpha\beta}$ .

Agora estamos em condições de utilizar as transformações de Holstein-Primakoff as quais estão expressas abaixo:

$$S_j^+ = \sqrt{2S\hbar} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a_j, \quad (3.27)$$

$$S_j^- = \sqrt{2S\hbar} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.28)$$

$$S_j^z = \hbar(S - a_j^\dagger a_j), \quad (3.29)$$

tendo  $a_j$  e  $a_j^\dagger$  como os operadores de aniquilação e criação, respectivamente.

Esses operadores descritos acima obedecem uma algebra que atendem as seguintes relações de comutação

$$\begin{cases} [a_i, a_j^\dagger] & = \delta_{ij}; \\ [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] & = 0. \end{cases} \quad (3.30)$$

É conveniente a utilização da desigualdade  $2S \gg a_j^\dagger a_j$ , pois o operador número  $a^\dagger a$  possui autovalores  $0, 1, 2, 3, \dots$ , enquanto  $S^z$  possui apenas  $-s, -s + 1, \dots, s$ . Esse limite torna a análise mais simples resultando numa expansão que nos permite um estudo bem mais detalhado das contribuições energéticas advindas do hamiltoniano. Essa aproximação se justifica em sistemas de baixas temperaturas, onde o valor esperado do número de desvios do spin ( $a_j^\dagger a_j = S - S_j^z$ ) é realmente pequeno. Assim da escolha do sistema a ser analisado nesse trabalho em um regime de temperatura que atende a ( $T \ll T_C$ ) legitima o uso da aproximação supracitada e que resulta em

$$\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} \approx 1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S} + \dots \quad (3.31)$$

Logo do hamiltoniano (3.26) e das equações (3.27, 3.28 e 3.29) obtemos

$$\begin{aligned} H = & - \frac{S^2}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} - \frac{S}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i] - \\ & - g\mu_B H_0 \sum_i S + g\mu_B H_0 \sum_i a_i^\dagger a_i - S^2 \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* + \\ & + 2S \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* a_i^\dagger a_i - \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Usando as relações (3.30) podemos reescrever a equação (3.32) como

$$\begin{aligned}
H = & s^2 \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} - \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* \right] - g\mu_B H_0 \sum_i S - \\
& - \frac{1}{2} S \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i - a_i^\dagger a_j] - \\
& - \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* a_i^\dagger a_i - \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i + \\
& + 2S \sum_{ij} \bar{D}_{ij}^* a_i^\dagger a_i + g\mu_B \sum_i a_i^\dagger a_i, \tag{3.33}
\end{aligned}$$

onde estamos fazendo  $\hbar = 1$ .

De forma explícita, a contribuição do termo dipolar faz o hamiltoniano (3.33) assumir o seguinte aspecto

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)} + H^{(3)} + H^{(4)} + \dots, \tag{3.34}$$

onde  $H^{(0)}$  é o termo independente dos operadores bosônicos  $a_i$  e  $a_i^\dagger$ ,

$$H^{(0)} = -g\mu_B H_0 N_T - \frac{s^2}{2} \sum_{ij} [J_{ij} + (g\mu_B)^2 \left( \frac{1}{|r_{ij}|^3} - 3 \frac{Z^2}{|r_{ij}|^5} \right)], \tag{3.35}$$

e representa fisicamente o estado de mais baixa energia do sistema, onde  $N_T$  é o número total de sítios da rede em questão.

O segundo fator da equação (3.34)  $H^{(1)}$  se atribui aos termos dependentes apenas de um operador e fornecem a energia que causa um pequeno efeito no estado fundamental da configuração de spin. Dependendo da estrutura da rede ou geometria da amostra, pode-se desprezar este termo frente aos bilineares, desaparecendo pela simetria na soma  $\sum_{ij}$  ou podemos dizer que simplesmente a energia inerente a ele foi absorvida pelo estado fundamental, vide equação abaixo

$$\begin{aligned}
H^{(1)} = & - \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 S \sqrt{2S} \sum_{ij} \frac{3}{|r_{ij}|^5} [XZ(a_i + a_i^\dagger) - \\
& - iYZ(a_i - a_i^\dagger)] + \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 S \sqrt{2S} \sum_{ij} \frac{3}{|r_{ij}|^5} \times \\
& \times [XZ(a_i - a_i^\dagger) - iYZ(a_i + a_i^\dagger)]. \tag{3.36}
\end{aligned}$$

Tem-se ainda o termo com dependência quadrática nos operadores bosônicos, ou seja,

$$\begin{aligned}
H^{(2)} &= g\mu_B H_0 \sum_i a_i^\dagger a_i + S \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (a_i^\dagger a_i - a_i a_j^\dagger) + \frac{S}{2} (g\mu_B)^2 \times \\
&\times \sum_{ij} \left[ \frac{2}{|r_{ij}|^3} (a_i a_j^\dagger - a_i^\dagger a_i) - \frac{3}{|r_{ij}|^5} \times \right. \\
&\times \left( \frac{X^2}{2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger - 2a_i a_j^\dagger) - \frac{Y^2}{2} \times \right. \\
&\times (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger - 2a_i a_j^\dagger) - 2SZ^2 a_i^\dagger a_i^\dagger - \\
&\left. \left. - iXY S (a_i a_j - a_i^\dagger a_j^\dagger) \right) \right]. \tag{3.37}
\end{aligned}$$

Este termo expresso na equação (3.37) combinado com  $H^{(0)}$  representa a energia não renormalizada do sistema, pois caracteriza um sistema de modos coletivos independentes. Outra energia inerente à situação é expressa pelo termo  $H^{(3)}$ , vinculado à presença dos termos dipolares, e representa o processo que envolve a interação de três magnons, ou seja,

$$\begin{aligned}
H^{(3)} &= \frac{1}{2} (g\mu)^2 \sum_{\langle ij \rangle} \frac{3\sqrt{2S}}{4|r_{ij}|^5} [XZ (a_i^\dagger a_i a_i + a_i^\dagger a_i^\dagger a_i + \\
&+ 4a_i a_j^\dagger a_j + 4a_i^\dagger a_j^\dagger a_j) + iYZ (a_i^\dagger a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i a_i + \\
&+ 4a_i^\dagger a_j^\dagger a_j - 4a_i a_j^\dagger a_j)]. \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Finalmente, o termo com dependência em quatro operadores  $H^{(4)}$  dependem tanto da interação dipolar quanto da interação de troca e está associado ao processo de espalhamento entre magnons. Este é quantificado como

$$\begin{aligned}
H^{(4)} &= \sum_{ij} J_{ij} (a_i a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i a_i a_j^\dagger - 2a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j) + \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \sum_{ij} \left\{ \frac{1}{|r_{ij}|^3} [a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \times \right. \\
&\times (a_i a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i a_i a_j^\dagger)] + \frac{3}{|r_{ij}|^5} \left[ \frac{X^2}{8} \times \right. \\
&\times (a_i a_j^\dagger a_j a_j + a_i^\dagger a_i a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger \times a_i^\dagger a_i a_j^\dagger + 2a_i a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + 2a_i^\dagger a_i a_i a_j^\dagger) + \frac{Y^2}{8} \times \\
&\times (a_i a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger \times a_i^\dagger a_i a_j^\dagger - 2a_i a_j^\dagger a_j^\dagger a_j - 2a_i^\dagger a_i a_i a_j^\dagger) + Z^2 a_i^\dagger \times \\
&\times \left. a_i a_j^\dagger a_j - \frac{iXY}{4} (a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_j^\dagger - a_i a_j^\dagger a_j a_j - a_i^\dagger a_i a_i a_j) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

E desta forma segue a expansão em termos de produtos em ordem maior nos operadores bosônicos, sendo aqui omitidos. Estas expressões acima determinadas se aplicam ao hamiltoniano (3.34) e podem ser utilizadas no estudo de sistemas físicos com disposição de spins em geometria diferenciadas. Esse será nosso objetivo a partir de agora, e começaremos por uma fita magnética quadrada infinita sem a participação da interação de longo alcance.

## 4 Ondas de Spin em uma Rede Quadrada.

O primeiro exemplo do formalismo desenvolvido na capítulo anterior será o de ondas de spin em uma rede quadrada mostrada na Figura 11. Iniciaremos com essa rede devido a sua simplicidade. E a justificativa para trabalharmos em duas dimensões se dá devido ao fato de queremos focar em materiais de baixa dimensionalidade.

### 4.1 Ondas de Spin em Redes Quadradas Infinitas sem Interação Dipolar.

Vamos iniciar com o hamiltoniano de Heisenberg mais simples sem interação dipolar.

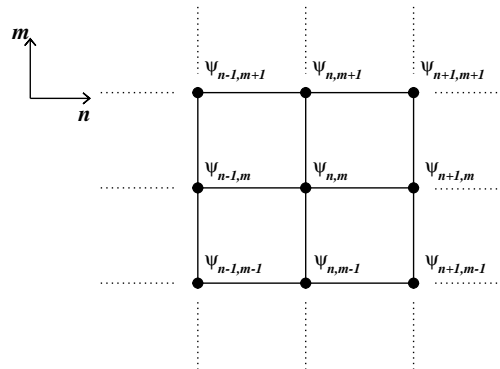


Figura 11: Representação da rede quadrada infinita.

Para ilustrar uma forma de fazer o cálculo das energias vamos denotamos as funções de onda em cada sítio da rede como  $\psi_{n,m}$ , onde  $n$  e  $m$  são inteiros. Por hora, iniciamos a observação dos primeiros vizinhos, que são responsáveis pela seguinte representação matemática

$$(E - g\mu_B H_0 - 2K)\psi_{n,m} = -J_1\psi_{n+1,m} - J_1\psi_{n-1,m} - J_1\psi_{n,m+1} - J_1\psi_{n,m-1}. \quad (4.1)$$

Como a rede é infinita, podemos escrever a função de onda para cada ponto como:

$$\psi_{n,m} = \exp(iq_x n) \exp(iq_y m). \quad (4.2)$$

Daí substituindo (4.2) na equação (4.1), temos

$$\begin{aligned} (E - h_0) \exp(iq_y m) \exp(iq_x n) &= -J_1 \{ \exp(iq_x(n+a)) \exp(iq_y m) + \\ &+ \exp(iq_x(n-a)) \exp(iq_y m) + \exp(iq_x(n)) \exp(iq_y(m+a)) + \\ &+ \exp(iq_x(n)) \exp(iq_y(m-a)) \}, \end{aligned}$$

onde  $h_0 = g\mu_B H_0 + 2K$  que resulta em

$$E = -J_1 \{ \exp(iq_x a) + \exp(-iq_x a) + \exp(iq_y a) + \exp(-iq_y a) \} + h_0,$$

a qual fornece

$$E = -2J_1 [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)] + h_0. \quad (4.3)$$

Esta é a relação de dispersão do modelo contemplando a interação entre primeiros vizinhos na ausência da interação dipolar. Por fim, vejamos o aporte advindo dos segundos vizinhos, e para isto tomamos a seguinte relação

$$E\psi_{n,m} = -J_2\psi_{n+1,m+1} - J_2\psi_{n+1,m-1} - J_2\psi_{n-1,m+1} - J_2\psi_{n-1,m-1}. \quad (4.4)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} E \exp[iq_x n] \exp[iq_y m] &= -J_2 \{ \exp[iq_x(n+a)] \exp[iq_y(m+a)] + \\ &+ \exp[iq_x(n+a)] \exp[iq_y(m-a)] + \exp[iq_x(n-a)] \exp[iq_y(m+a)] + \\ &+ \exp[iq_x(n-a)] \exp[iq_y(m-a)] \}. \end{aligned}$$

Após algumas manipulações algébricas encontramos

$$E = -J_2\{2 \cos(q_x a) \exp[iq_y a] + 2 \cos(q_x a) \exp[-iq_y a]\},$$

que resulta em

$$E = -4J_2 \cos(q_x a) \cos(q_y a). \quad (4.5)$$

Finalmente das equações (4.3 e 4.5), definimos a relação de dispersão

$$E = -2[J_1 \sigma_1(q) + 2J_2 \sigma_2(q)] + h_0, \quad (4.6)$$

onde foram usadas as seguintes definições  $\sigma_1 \equiv \cos(q_x a) + \cos(q_y a)$  e  $\sigma_2 \equiv \cos(q_x a) \cos(q_y a)$ .

## 4.2 Resultados Numéricos.

Vamos agora apresentar os resultados para a Equação (4.6). Em todos os cálculos vamos usar  $h_0 = 1$ . Vale mencionar aqui que o termo de Zeeman e de anisotropia são importantes para garantir uma magnetização finita quando  $\vec{q} \rightarrow 0$ , ou seja, garante a estabilidade da fase ferromagnética. A Figura 12 mostra as energias para as ondas de spin de uma rede quadrada simples em duas dimensões sem interação dipolar. A figura não leva em conta os segundos vizinhos. Na figura as cores variam do azul até o vermelho representando intervalo de energia  $0 < E/J_1 < 9$ . Como usamos  $h_0 = 1$  a menor energia do sistema é  $E/J_1 = 1$ , por isso o azul não é tão forte na figura. É importante notar que o gráfico mostra a simetria da rede quadrada. Para pequenos vetores de onda, notamos que as linhas de contorno são esféricas o que implica que a energia cresce da mesma forma em qualquer direção do vetor de onda. A medida que esse vetor de onda cresce, essa isotropia da energia é quebrada e ela cresce de forma diferenciada de acordo com a direção na zona de Brillouin.

Nesse sentido mostramos na Figura 13 a zona de Brillouin de uma rede quadrada onde mostramos os pontos  $\Gamma$ ,  $X$ , e  $M$ . E na Figura 14 mostramos a relação de dispersão ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ . É possível notar na figura o diferente comportamento das curvas para os diferentes caminhos tomados.

Consideramos agora o efeito dos segundos vizinhos no sistema descrito acima. Em geral interação segundo vizinho é bem menor que  $J_1$ . Aqui para fazermos um estudo

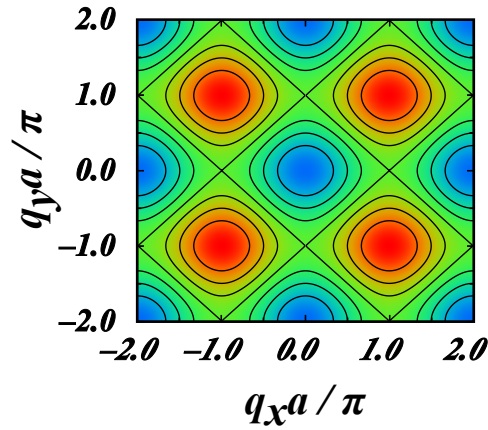


Figura 12: Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 9$ .

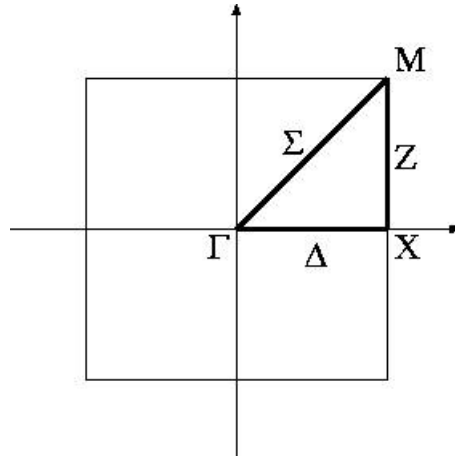


Figura 13: A zona de Brillouin para uma rede quadrada mostrando os pontos  $\Gamma$ ,  $X$ , e  $M$ .

mais completo vamos estudar o sistema para vários valores de  $J_2$  até o limite de  $J_2 = J_1$ . Podemos ver da Figura 15 que com o aumento cadenciado da intensidade dos segundos vizinhos, a relação de dispersão das ondas de spin sofrem uma gradual modificação, as quais trazem contribuições ao espectro que aumentam as energias para os vetores de onda maiores. Para termos uma visão ainda mais clara do efeito de segundos vizinhos vamos fixar um vetor de onda em  $q_y = 0$  e em  $q_y = \pi a$  e variar continuamente  $J_2/J_1$  de zero até 1. Isso é mostrado na Figura 16. Na figura podemos ver como a interação com os segundos vizinhos atua de forma diferente para os diferentes valores de  $q_x$  e  $q_y$ . No painel a esquerda da figura quando fixamos  $q_y = 0$  vemos que a influência do  $J_2$  é mais significativa em torno de  $q_x = \pm\pi/a$ . Nessa região a energia cresce com o  $J_2$  como podemos ver pelo gradiente de cores que cresce até o vermelho, aqui o valor máximo é  $E/J_1 = 14$ ; porém, para  $q_x = 0$ ,  $J_2$  quase não influencia o valor de energia. É interessante notar que para  $q_y = \pi a$  o painel da direita na Figura mostra um comportamento oposto. Agora  $J_2$  influencia nas regiões próximas a  $q_x = \pm 2n\pi a$ , onde  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Enquanto que agora a região próxima de

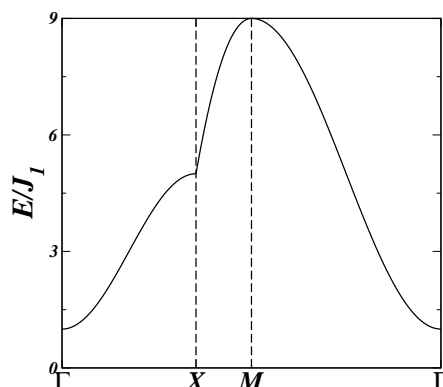


Figura 14: Relação de dispersão das ondas de spin ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ .

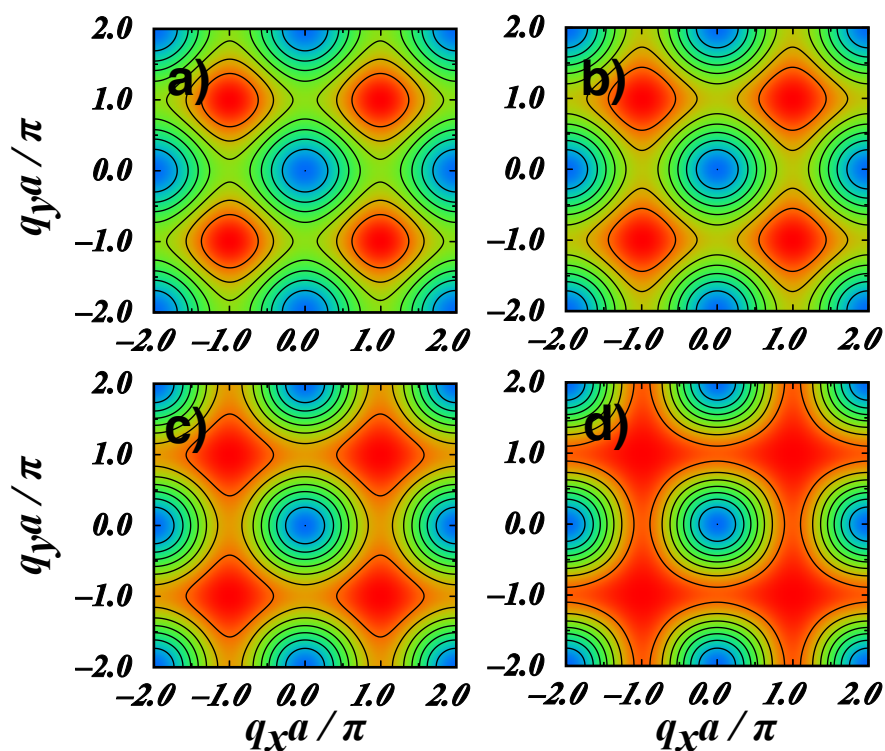


Figura 15: Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 9$ . Aqui consideramos segundos vizinhos: a)  $J_2/J_1 = 0, 1$ , b)  $J_2/J_1 = 0, 2$ , c)  $J_2/J_1 = 0, 3$ , d)  $J_2/J_1 = 0, 4$

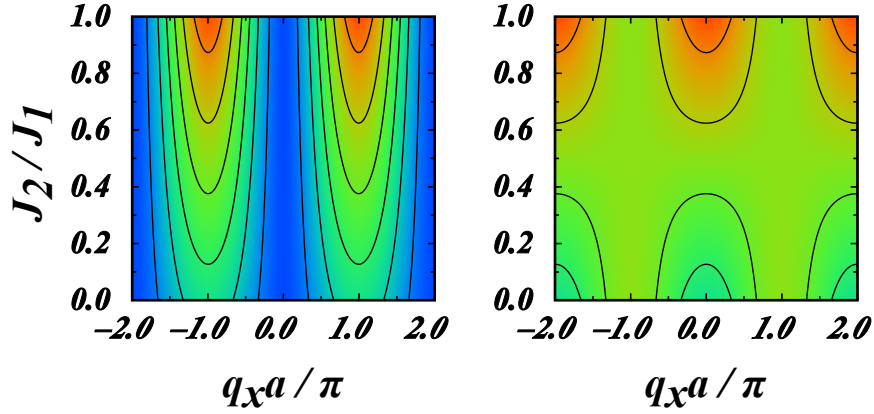


Figura 16: Curva de contorno para as energias de ondas de spin. A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 14$ . Aqui consideramos  $q_y = 0$  no painel da esquerda e  $q_y = \pi a$  no painel da direita.

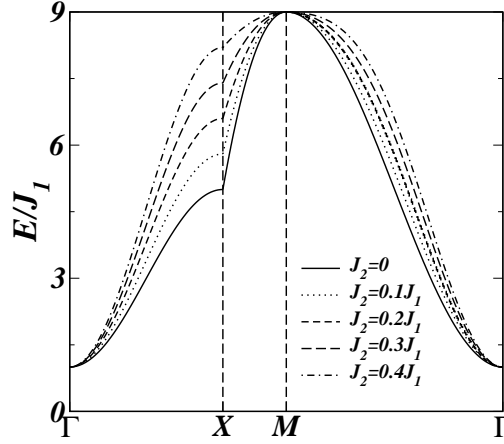


Figura 17: Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ . A linha solida  $J_2 = 0$ , a linha pontilhada é para  $J_2 = 0.1J_1$ , o caso onde  $J_2 = 0.2$  é representado pela tracejada, a linha tracejada longa corresponde a  $J_2 = 0.3J_1$ , e a linha tracejada pontilhada indica o caso onde  $J_2 = 0.4J_1$ .

$q_x = \pm(2n + 1)\pi a$  fica com o espectro inalterado.

A Figura 17 corrobora o que foi dito acima. Nela mostramos a relação de dispersão para as ondas de spin ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$  da zona de Brillouin. Todas as curvas tem mesmo valor de energia no ponto  $\Gamma$  ( $q_x = 0$  e  $q_y = 0$ ). O efeito mais evidente de  $J_2$  acontece no ponto  $X$  ( $q_x = \pi a$  e  $q_y = 0$ ), e mais uma vez nenhum efeito é causado pelos segundos vizinhos quando estamos no ponto  $M$  ( $q_x = \pi a$  e  $q_y = \pi a$ ).

Para concluir a análise de uma rede quadrada sem interação dipolar mostramos na Figura 18 a densidade de estados  $\sigma$  para uma rede quadrada sem considerar a interação de segundos, com  $J_2 = 0,1J_1$ , e com  $J_2 = 0,4J_1$ . A figura mostra mais um efeito da interação de segundos vizinhos, ela faz com que o pico da densidade de energia se desloque

para energias mais altas. Isso causa um efeito direto nas propriedades macroscópicas do sistema como magnetização, susceptibilidade, e calor específico.

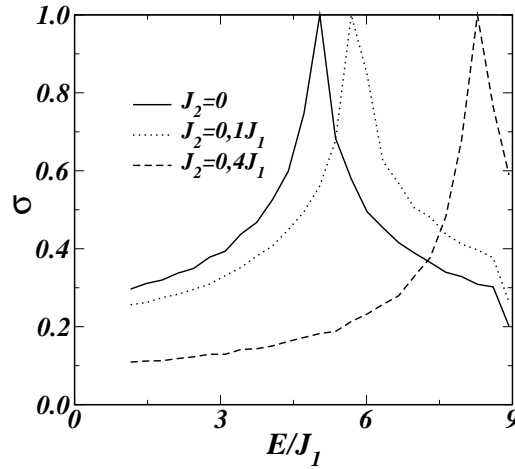


Figura 18: A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem segundos vizinhos, a curva pontilhada representa o caso onde  $J_2 = 0, 1J_1$ , e a curva tracejada é para o caso onde  $J_s = 0, 4J_1$ .

### 4.3 Ondas de Spin em Redes Quadradas Infinitas com Interação Dipolar.

Seguindo a seqüência mostrada no capítulo 3 vamos agora analisar os efeitos da interação dipolar entre os spins numa rede quadrada em duas dimensões. Como vimos anteriormente o campo externo aplicado (termo de Zeeman) provoca um acréscimo na energia das ondas de spin. Esse termo faz com que os spins se alinhem na direção desse campo. A interação dipolar depende dessa orientação do campo aplicado. Por isso vamos analisar aqui dois casos. O primeiro é o caso onde o campo aplicado (magnetização) perpendicular ao plano que contem os spins e o segundo caso onde esse campo é aplicado ao longo de uma das direções do plano.

#### 4.3.1 Plano $x - y$ .

Vamos iniciar com a rede quadrada infinita lotada no plano  $x - y$  representado pela Figura 19. Este sistema físico fica bem representado através do Hamiltoniano abaixo (ver capítulo 3):

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^z + H_{dip}. \quad (4.7)$$

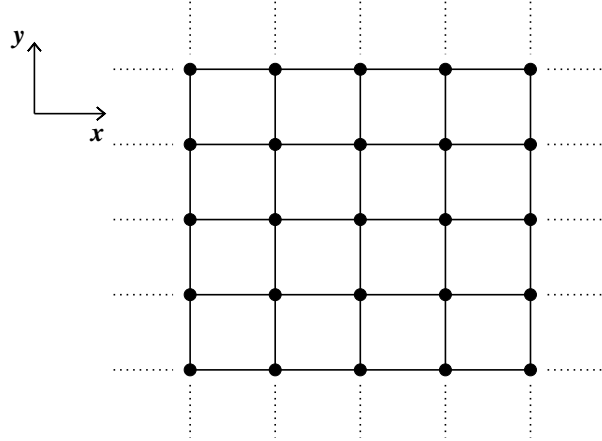


Figura 19: Rede quadrada Infinita em Ambas as Direções no plano  $x - y$ .

Omitimos aqui o termo de anisotropia pois nessa geometria (magnetização perpendicular ao plano  $x - y$ ) ela entra de uma forma aditiva ao campo externo. Vamos desenvolver o Hamiltoniano dipolar dado por:

$$H_{dip} = \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|r_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right],$$

o qual se torna

$$H_{dip} = \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{(S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z)}{|r_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right].$$

A partir do uso das transformação de Holstein-Primakoff e de alguma álgebra podemos escrever o Hamiltoniano como :

$$H = S \sum_{i,j} \left[ (J_{ij} + H_0 - (g\mu_B)^2 D_{ij}^{zz}) \delta_{ij} - J_{ij} - \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{ij}^{zz} \right] a_i a_j^\dagger + \frac{(g\mu_B)^2}{4} S \sum_{i,j} [(D_{ij}^{xx} - D_{ij}^{yy} - 2iD_{ij}^{xy}) a_i a_j + (D_{ij}^{xx} - D_{ij}^{yy} + 2iD_{ij}^{xy}) a_i^\dagger a_j^\dagger], \quad (4.8)$$

com

$$D_{ij}^{zz} = \frac{1}{|r_{ij}|^3}, \quad (4.9)$$

$$D_{ij}^{\alpha\beta} = -\frac{3\alpha\beta}{|r_{ij}|^5}. \quad (4.10)$$

É importante notar aqui a diferença da Eq.(4.8) acima para a parte dipolar do termo  $H(2)$  Eq.(3.34) do capítulo 3. Além da questão da anisotropia já discutida acima, devemos notar a ausência do termo  $z_i - z_j = Z$  na expressão da Eq.(4.8). Isso se deve ao fato de que aqui estamos trabalhando com uma rede bi-dimensional com os átomos no plano  $x - y$ .

O Hamiltoniano acima ainda não está em uma forma diagonal para que possamos determinar as energias do sistema, pois a presença dos termos dipolares agregam termos bilineares nos operadores que remetem a termos fora da diagonal. Para isso podemos transformar os operadores de campo  $a_i$  e  $a_i^\dagger$  em operadores de modos coletivos normais  $a_{\vec{q}}$  e  $a_{\vec{q}}^\dagger$ . Em geral essa transformação é dada da seguinte forma

$$\begin{aligned} a_i &= \sum_{\vec{q}} \psi_{\vec{q}}^i a_{\vec{q}}, \\ a_i^\dagger &= \sum_{\vec{q}} \psi_{\vec{q}}^{i*} a_{\vec{q}}^\dagger. \end{aligned} \quad (4.11)$$

No caso particular onde existe simetria translacional  $\psi_{\vec{q}}^i = \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_i)$ . Assim as transformações Eq.(4.11) se tornam as usuais transformadas de Fourier o que nos leva ao Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\vec{q}} \left[ A(\vec{q}) a_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger + B(\vec{q}) a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} + B^*(\vec{q}) a_{-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger \right], \quad (4.12)$$

onde definimos:

$$\begin{aligned} A(\vec{q}) &= S \left[ 4J_1 + 4J_2 + \hbar\omega_0 - \frac{(g\mu_B)^2}{2} (2D^{zz}(0) + D^{zz}(\vec{q})) - \right. \\ &\quad \left. - 2J_1(\cos q_x a + \cos q_y a) - 4J_2 \cos q_x a \cos q_y a \right], \\ B(\vec{q}) &= \frac{1}{4} (D^{xx}(\vec{q}) - D^{yy}(\vec{q}) - 2iD^{xy}(\vec{q})). \end{aligned}$$

de modo que os termos dipolares são demonstrados no Apêndice A.

Devido a presença dos termos  $B(\vec{q})$  o Hamiltoniano que agora possui a interação dipolar entre os spins não está mais na forma diagonal. Isso significa que essa interação não somente modifica a energia das ondas de spin, mas modifica também a sua característica. Considerando a equação do movimento de Heisenberg

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, H] \quad (4.13)$$

para os operadores  $a_{-\vec{q}}^\dagger$  e  $a_{\vec{q}}$ . Usando o Hamiltoniano da Eq.(4.12) e as relações bosônicas de comutação teremos

$$i \frac{da_q}{dt} = A(q)a_q + 2B^*(q)a_{-q}^\dagger, \quad (4.14)$$

$$i \frac{da_{-q}^\dagger}{dt} = -A(q)a_{-q}^\dagger - 2B(q)a_q. \quad (4.15)$$

que tem como solução

$$E(\vec{q}) = \sqrt{A(\vec{q})^2 - |B(\vec{q})|^2}. \quad (4.16)$$

A relação de dispersão (4.16) acima fornece a energia dos modos que compõem o espectro de ondas de spin numa rede quadra com a contribuição de interação de troca, Zeeman, anisotropia, e interação dipolar. Dessa forma temos uma energia que depende dos parâmetros  $E(q_x, q_y, h_0, J_2, M)$ , onde  $M$  é a magnetização introduzida pela interação dipolar.

A Figura 20 mostra a curva de contorno das ondas de spin para uma rede quadra para quatro valores da interação dipolar. Aqui fixamos  $h_0 = 1$ ,  $J_2 = 0, 2$ . A energia cresce do azul para o vermelho e varia dentro do intervalo  $0 < E/J_1 < 10$ . Como podemos ver, a medida que a intensidade da interação dipolar ( $M$ ) aumenta as energias mais baixas são mais afetadas. Também notamos que o contorno das curvas se modifica. Isso indica que a dispersão ao longo dos diversos caminhos na zona de Brillouin se modificam. O efeito da interação dipolar pode ser melhor observado na Figura 21. Podemos ver que com o aumento da intensidade da interação dipolar as energias crescem mais fortemente em torno de  $q_x = \pm 2n\pi/a$  (quando  $q_y = 0$ ) painel da esquerda, onde  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Já para  $q_y = \pi/a$ , o painel da direita mostra que as energias variam pouco com o aumento de  $M$ .

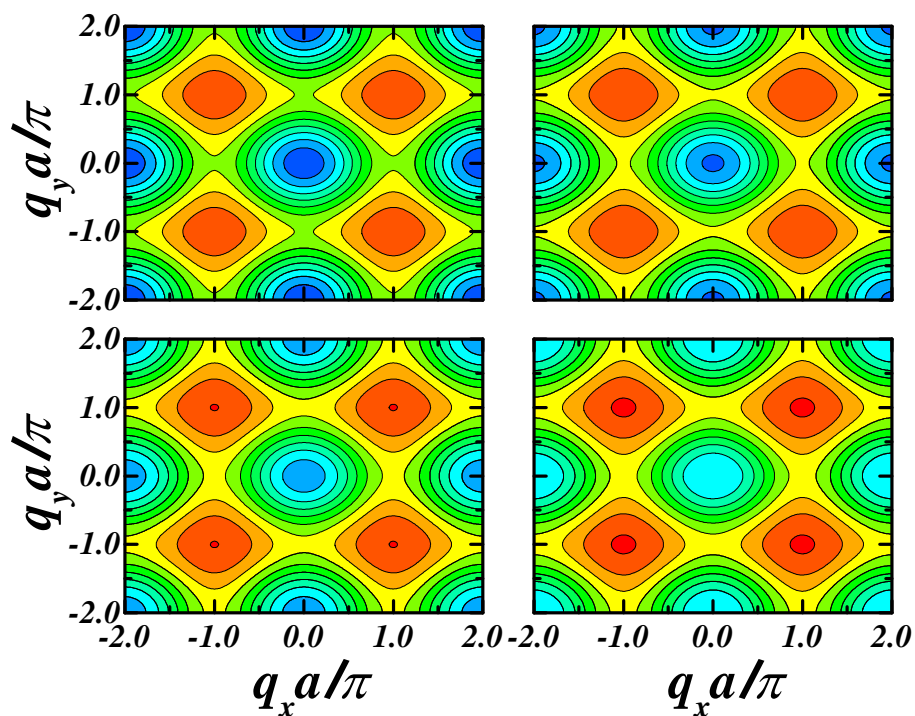


Figura 20: Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 10$ .

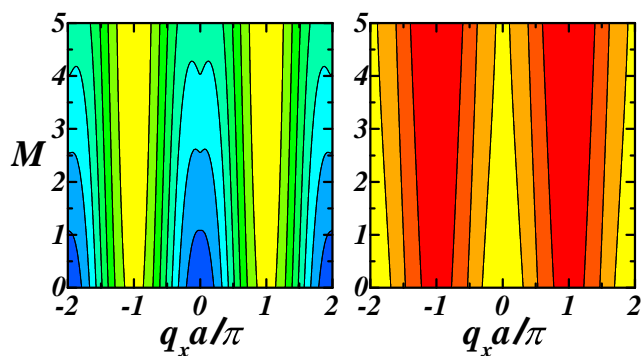


Figura 21: Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 9.5$ . O painel da direita  $q_y = 0$  e  $q_y = \pi/a$  no painel da esquerda.

Percebemos que na presença dos termos dipolares o espectro sofre alterações interessantes nas bordas da zona de Brillouin, ou seja, os principais efeitos estão na região magnetostática (pequenos vetores de onda) que esta se acentua à medida que aumentamos a intensidade da interação magnética. Isso fica mais claro na Figura 22, onde podemos ver que a interação dipolar tem um efeito maior no ponto  $\Gamma$  definido por  $q_x = q_y = 0$ . Podemos observar também que o efeito da interação muda dependendo do vetor de onda. O painel a direita da Figura 22 mostra a diferença entre as energias com  $4\pi\mu_B M = 0$  e  $4\pi\mu_B M = 1$ . A diferença de energia possui um máximo no ponto  $\Gamma$  com uma variação não linear.

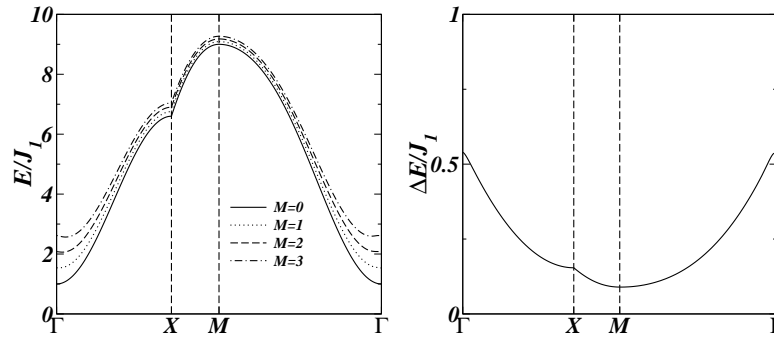


Figura 22: Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ . A linha solida  $4\pi g\mu_B M = 0$ , a linha pontilhada é para  $4\pi g\mu_B M = 1$ , o caso onde  $4\pi g\mu_B M = 2$  é representado pela tracejada longa, e a linha tracejada pontilhada indica o caso onde  $4\pi g\mu_B M = 3$ . A direita temos a diferença de energia das ondas de spin para  $4\pi\mu_B M = 0$  e  $4\pi\mu_B M = 1$  ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ .

Para concluirmos nossa análise vamos mostrar a densidade de estados com a interação dipolar. A Figura 23 mostra um comportamento parecido com aquele para a variação do termo de troca de segundos vizinhos. Há um aumento gradual do pico de energia com o aumento da intensidade da interação dipolar.

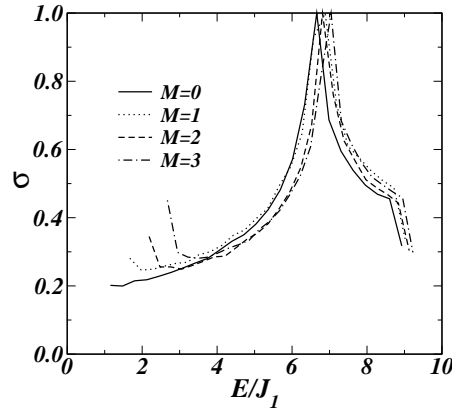


Figura 23: A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem interação dipolar, a curva pontilhada representa o caso onde  $4\pi\mu_B M = 1$ , a curva tracejada é para o caso onde  $4\pi\mu_B M = 2$ , a curva tracejada-pontilhada é para o caso  $4\pi\mu_B M = 3$ .

### 4.3.2 Plano $x - z$ .

Vamos tratar agora da rede quadrada infinita no plano  $x - z$ . Nesse caso, a diferença no Hamiltoniano se dá apenas no termo dipolar que envolve o produto escalar entre o operador de spin e as coordenadas espaciais.

$$H_{dip} = \frac{1}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{(S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z)}{|r_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right].$$

A partir do uso das transformação de Holstein-Primakoff e de alguma álgebra podemos escrever o Hamiltoniano como :

$$H = S \sum_{i,j} \left[ (J_{ij} + \bar{h}_0 - (g\mu_B)^2 D_{ij}^{zz}) \delta_{ij} - J_{ij} - \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{ij}^{zz} \right] a_i a_j^\dagger + \quad (4.17)$$

$$\frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{S}{2} \sum_{i,j} D_{ij}^{xx} (a_i a_j + a_i^+ a_j^+), \quad (4.18)$$

com

$$D_{ij}^{xx} = \frac{X^2}{|r_{ij}|^5}, \quad (4.19)$$

$$D_{ij}^{zz} = \frac{1}{|r_{ij}|^3} \left( 1 - \frac{3Z^2}{|r_{ij}|^2} \right). \quad (4.20)$$

Mais uma vez usando as transformações para trabalharmos com os operadores de criação

e destruição obtemos

$$H = \sum_q \left[ A(q) a_q a_q^\dagger + B(q) (a_q a_{-q} + a_q^\dagger a_{-q}^\dagger) \right], \quad (4.21)$$

onde

$$\begin{aligned} A(q) = S & \left[ 4J_1 + 4J_2 + \bar{h}_0 - \frac{(g\mu_B)^2}{2} (2D^{zz}(0) + D^{zz}(q)) - \right. \\ & \left. - 2J_1 (\cos q_x a + \cos q_y a) - 4J_2 \cos q_x a \cos q_y a \right] \\ B(q) & = \frac{1}{4} D^{xx}(q), \end{aligned}$$

onde as somas dos termos dipolares podem ser vistos no Apêndice B.

Como estamos mudando apenas a orientação do nosso modelo, e a expressão para o Hamiltoniano Eq.(4.21) é a mesma para o caso  $x - y$ , temos uma relação de dispersão com a mesma forma:

$$E(\vec{q}) = \sqrt{A(\vec{q})^2 - |B(\vec{q})|^2}. \quad (4.22)$$

Vamos fazer uma análise similar a que foi feita para o caso  $x - y$ . Assim, a Figura 24 mostra as curvas de contorno para essa orientação de magnetização. Os valores usados para  $h_0$  e  $J_2$  são os mesmo para podermos fazer uma comparação precisa. Como podemos ver a orientação tem um efeito significativo, e os máximos e mínimos de energia se encontram nas mesmas posições. Contudo, é visível a mudança nas linhas de contorno, diferença essa que fica mais evidenciada ainda quando olhamos para a Figura 25. Nela podemos ver que para  $q_x = 0$  a interação dipolar modifica o espectro para todos os valores de  $q_z$  sendo mais evidente para múltiplos inteiros de  $\pi$ . Para  $q_x = \pi/a$  percebemos mudanças mais suaves e quase nenhuma alteração para  $q_z = \pm\pi/a$ . Na Figura 26 mostramos a relação de dispersão para caminhos dentro da zona de Brillouin. Fica muito claro que a mudança da orientação da magnetização altera as energias dos modos significativamente.

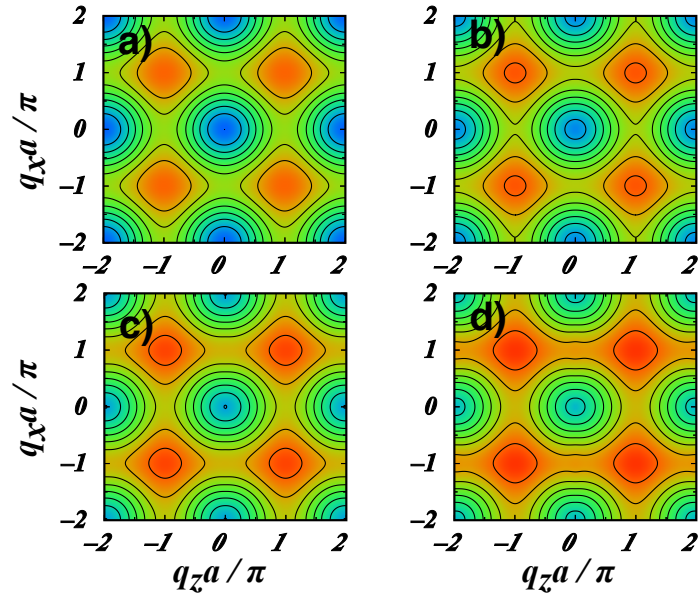


Figura 24: Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar no plano  $x - z$ . A energia cresce do azul até o vermelho  $0 < E/J_1 < 10$ : a)  $4\pi\mu_B M = 0$ , b)  $4\pi\mu_B M = 1$ , c)  $4\pi\mu_B M = 2$ , d)  $4\pi\mu_B M = 3$ .

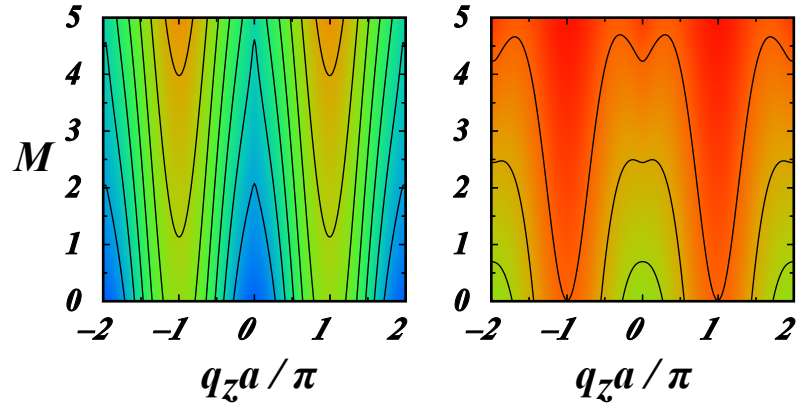


Figura 25: Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede quadrada com interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho no intervalo  $0 < E/J_1 < 10$ . O painel da esquerda  $q_x = 0$  e  $q_x = \pi a$  no painel da direita.

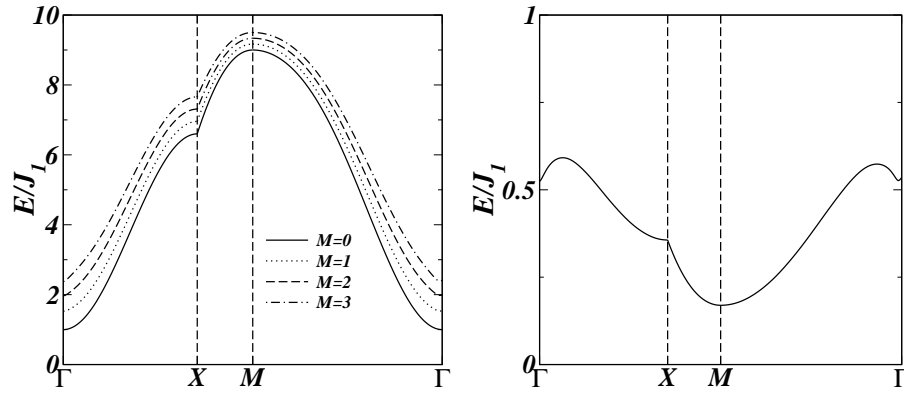


Figura 26: Relação de dispersão das ondas de spin com interação de segundos vizinhos e interação dipolar ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ . A linha solida é para  $4\pi g\mu_B M = 0$ , a linha pontilhada é para  $4\pi g\mu_B M = 1$ , o caso onde  $4\pi g\mu_B M = 2$  é representado pela tracejada longa, e a linha tracejada-pontilhada indica o caso onde  $4\pi g\mu_B M = 3$ . A direita a temos a diferença de energia entre as ondas de spin para  $4\pi\mu_B M = 0$  e  $4\pi\mu_B M = 1$  ao longo dos caminhos  $\Delta$ ,  $Z$ , e  $\Sigma$ .

Por fim completamos nosso estudo da rede quadrada mostrando a densidade de estados para a orientação  $x-z$ . A Figura 27 mostra picos bem definidos em energias bem distintas. É importante citar que a interação dipolar tem um efeito maior próximo ao ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin tanto no plano  $x-y$  como no plano  $x-z$ . A principal diferença entre as orientações se dá no aumento da energia de cada modo.

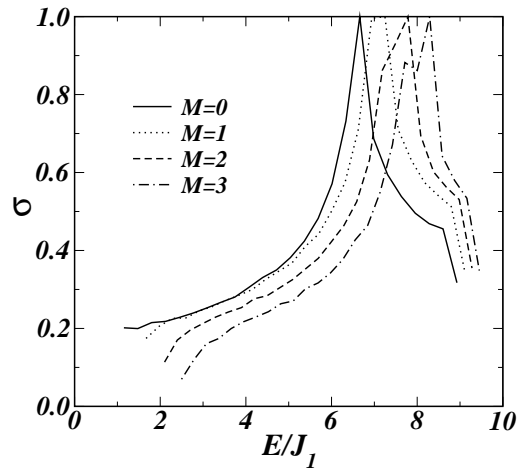


Figura 27: A densidade de energia das ondas de spin em uma rede quadrada. A curva sólida é para um espectro sem interação dipolar, a curva pontilhada representa o caso onde  $4\pi\mu_B M = 1$ , a curva tracejada é para o caso onde  $4\pi\mu_B M = 2$ , a curva tracejada-pontilhada é para o caso  $4\pi\mu_B M = 3$ .

## 4.4 Ondas de Spin em Rede Quadrada Finita sem Interação Dipolar

Agora vamos calcular o espectro das ondas de spin numa rede quadrada finita com aproximação de segundos vizinhos sem interação dipolar. Na descrição do sistema em questão, dizemos que a fita esta locada no plano  $(xy)$ , e os spins estão alinhados na direção  $z$ . Garante-se a periodicidade da rede na direção  $x$  ( $-\infty < x < \infty$ ) e limita-se o número de linhas atômicas em  $N$  na direção  $y$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), como mostra a Figura 28

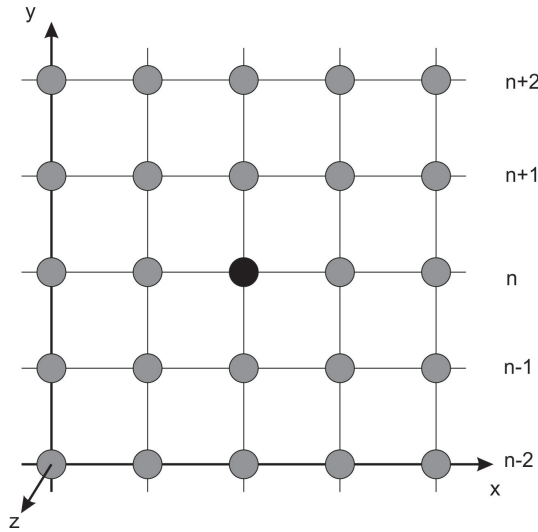


Figura 28: Fita Magnética Finita em uma Direção.

Na ausência do termo dipolar no rol das interações, o Hamiltoniano a ser utilizado já foi calculado no Capítulo 3 e é dado por

$$H = -S \sum_{ij} J_{ij} (a_i^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i) + g\mu_B H_0 \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (4.23)$$

Devido a periodicidade que a rede manifesta devemos pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  expressos no espaço das coordenadas dos sítios da rede. Para definir os operadores  $a_{q,n}^\dagger$  e  $a_{q,n}$  em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,n} a_{q,n}^\dagger \exp[i\vec{q} \cdot \vec{r}_i] \quad (4.24)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,n} a_{q,n}^\dagger \exp[-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i] \quad (4.25)$$

onde  $\vec{r}_i$  indica o vetor do sítio  $i$ , e  $N$  é o número dos sítios na rede e  $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$ , onde  $N_0$  é o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos

$$\begin{aligned} H = & -\frac{S}{N} \sum_{ij} \sum_{q,q';n,n'} J_{ij} [\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_i - i\vec{q}' \cdot \vec{r}_j) a_{q,n}^\dagger a_{q',n'} - \\ & - \exp(i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}_i) a_{q,n}^\dagger a_{q',n}] + \frac{1}{N} \bar{h}_0 \sum_{i;q,q';n} \times \\ & \times \exp(i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}_i) a_{q,n}^\dagger a_{q',n}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

em que por simplicidade de notação chamamos  $g\mu_B H_0 \equiv \bar{h}_0$ . Usando a definição da função delta  $\sum_i \exp(i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}_i) = N\delta_{qq'}$ , temos que a equação (4.26) se torna

$$H = -S \sum_i \sum_{q,n,n'} J_{ij} [\exp(i(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{q}) a_{q,n}^\dagger a_{q,n'} - a_{q,n}^\dagger a_{q,n}] + \sum_{q,n} \bar{h}_0 a_{q,n}^\dagger a_{q,n}. \quad (4.27)$$

Identificando o termo

$$J(q) = \sum_j J_{ij} \exp(i(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{q}), \quad (4.28)$$

tem-se para a equação (4.27)

$$H = \sum_{q,n,n'} A_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger a_{qn'}, \quad (4.29)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{nn'}(q) = & S[(4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_x a + \bar{h}_0) \delta_{n,n'} - \\ & (J_1 + 2J_2 \cos(q_x a))(\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1})]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

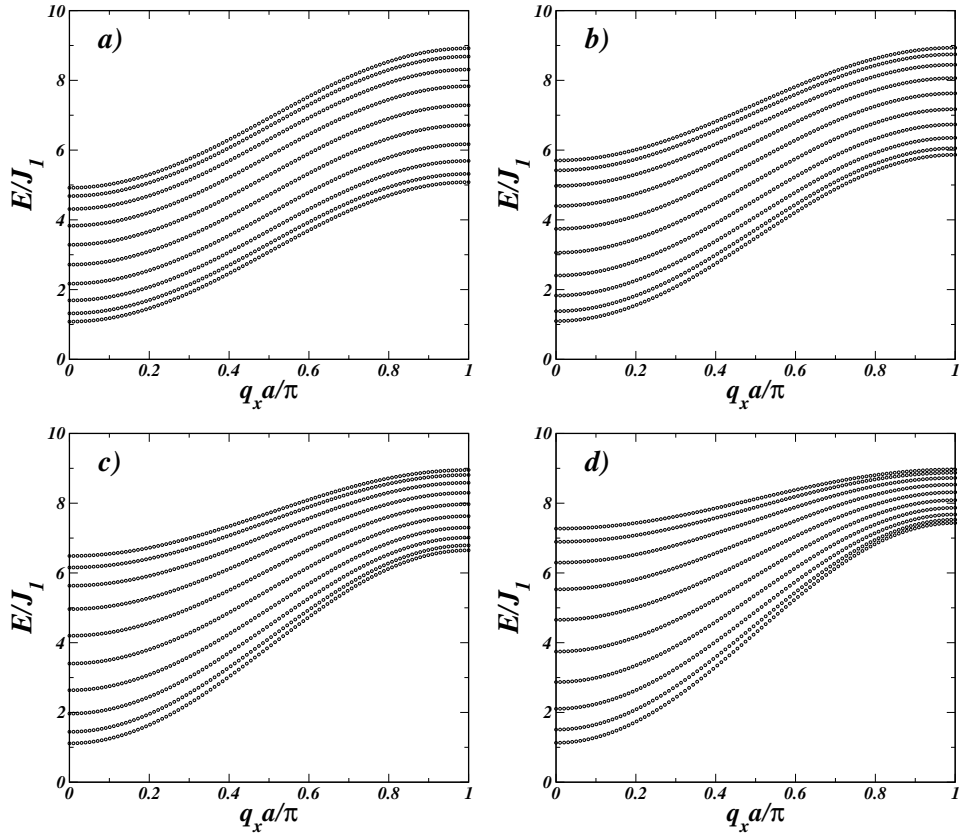


Figura 29: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da interação de troca de segundos vizinhos: a)  $J_2/J_1 = 0$ , b)  $J_2/J_1 = 0, 1$ , c)  $J_2/J_1 = 0, 2$ , e  $J_2/J_1 = 0, 3$ .

mais uma vez usando a equação do movimento  $idO/dt = [O, H]$  teremos

$$\omega a_{qn} = \sum_{q', n', n''} A_{nn'}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{q'n''}], \quad (4.31)$$

$$\omega a_{qn} = \sum_{n'} A_{nn}(q) a_{qn'}, \quad (4.32)$$

e pode ser escrito na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_{q1} \\ a_{q2} \\ \vdots \\ a_{qn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & -v & 0 & \cdots & \cdots \\ -v & u & -v & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & 0 & -v & u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{q1} \\ a_{q2} \\ \vdots \\ a_{qn} \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

onde  $u = 4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_x a + \bar{h}_0$ , e  $v = J_1 + 2J_2 \cos(q_x a)$ .

Vamos agora mostrar a relação de dispersão para as ondas de spin para uma rede quadrada finita com  $N = 10$  linhas atômicas. Em todos os nossos resultados aqui vamos usar  $S\bar{h}_0/J_1 = 1$ . A Figura 29 mostra como a interação de segundos vizinhos altera o

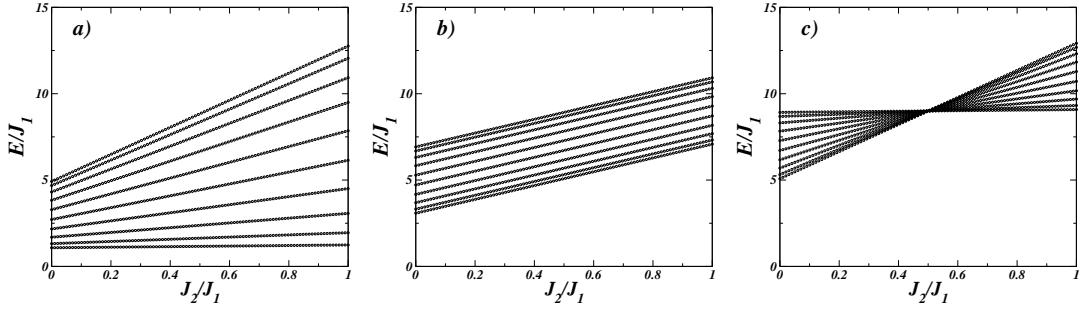


Figura 30: Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos  $J_2$  para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a)  $q_x = 0$ , b)  $q_x = 0,5\pi a$ , e c)  $q_x = \pi a$ .

espectro. A medida que aumentamos  $J_2$  percebemos que as energias aumentam de forma bem diferente para cada modo. A consideração de 10 linhas atômicas repercute em 10 modos que sofrem alterações mais drásticas à medida que intensificamos a interação de segundos vizinhos, o que fica bem claro para  $q_x \rightarrow \pi/a$ .

Quando observamos a dispersão da energia em função do parâmetro  $J_2$ , a Figura 30 mostra como os modos são afetados pela interação com os segundos vizinhos. Da figura podemos ver que para pequenos vetores de onda os modos de mais baixa energia quase não são afetados por  $J_2$ , enquanto que os outros modos crescem linearmente mas não com o mesmo coeficiente linear. Para valores intermediários do vetor de onda todos os modos crescem linearmente com o mesmo coeficiente linear; porém, no limite da zona de Brillouin os modos mais energéticos são fracamente alterados.

## 4.5 Ondas de Spin em Rede Quadrada Finita com Interação Dipolar

Seguindo o mesmo procedimento das seções anteriores, vamos introduzir agora a interação dipolar na fita magnética. Vamos utilizar o Hamiltoniano abaixo onde já procedemos com a transformada de Fourier e introduzimos o índice das linhas atômicas da fita.

$$H = \sum_{qnn'} \left[ A_{nn'}(q) a_{qn} a_{qn'}^\dagger + B_{nn'}(q) a_{qn} a_{-qn'} + B_{nn'}^*(q) a_{qn}^\dagger a_{-qn}^\dagger \right], \quad (4.34)$$

onde

$$A_{nn'}(q) = S \left[ \left( 4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_x a + \bar{h}_0 - \frac{1}{2} \sum_{n''} D_{nn''}^{zz}(0) \right) \delta_{n,n'} - \right. \\ \left. (J_1 + 2J_2 \cos(q_x a)) (\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1}) - \frac{1}{2} D_{nn'}^{zz}(q) \right] \\ B_{nn'}(q) = \frac{1}{4} (D_{nn'}^{xx}(q) - D_{nn'}^{yy}(q) - 2iD_{nn'}^{xy}(q)),$$

de modo que as somas podem ser encontradas no Apêndice C.

Usando a equação do movimento para os operadores teremos:

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

E escrevendo na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B^* \\ -B^T & -A^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

No nosso caso  $A = A^T$  e  $B^T = B = B^*$ .

O efeito da interação dipolar pode ser visto na Figura 31, a qual explicita os comportamentos dos modos para diferentes intensidades de  $M$ . Nela mostramos para  $J_2 = 0, 2J_1$  e  $\bar{h}_0 = 1$  que a medida que aumentamos  $M$  os modos crescem em energia. Esse aumento na energia não é linear e depende do vetor de onda  $q_x$  como é mostrado na Figura 32. Podemos mostrar esse comportamento mais claramente analisando somente o modo de mais baixa energia do painel *a*) da Figura 32. Fizemos um ajuste da curva mostrado na Figura 33. Nela devido ao ajuste de escala observamos um comportamento quadrático da energia com a intensidade da interação dipolar. A curva mostra que o

comportamento calculado numericamente pode ser ajustado perfeitamente pela função  $E/J_1 = (1.12 + 0.92\pi M + 0.176\pi^2 M^2)$ .

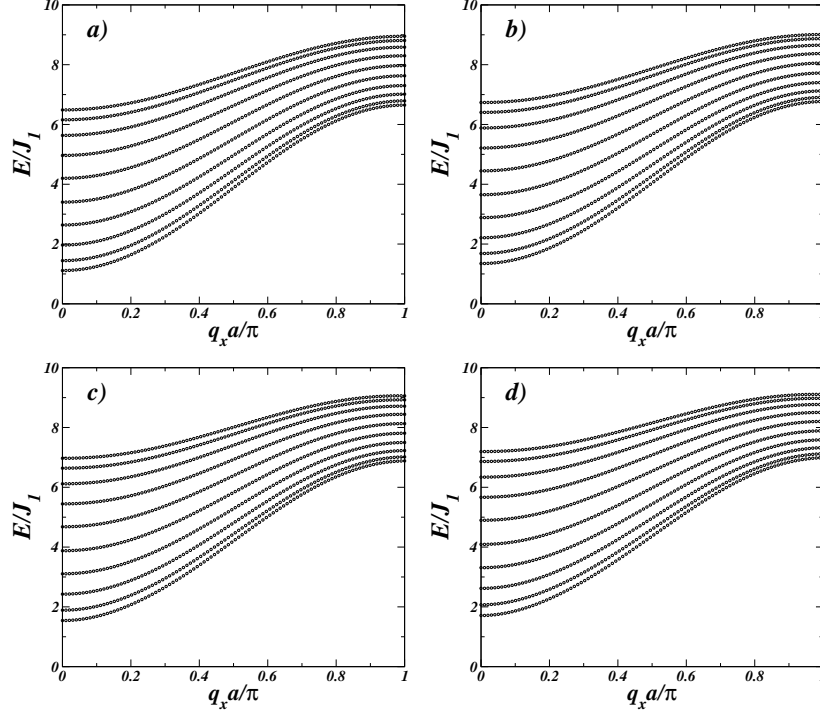


Figura 31: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a)  $4\pi M = 0$ , b)  $4\pi M = 1$ , c)  $4\pi M = 2$ , d)  $4\pi M = 3$ .

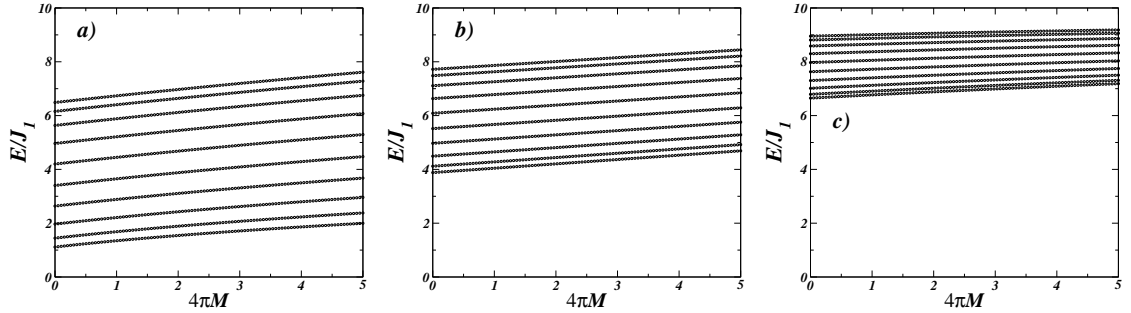


Figura 32: Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos  $J_2$  para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a)  $q_x = 0$ , b)  $q_x = 0,5\pi a$ , e c)  $q_x = \pi a$ .

Nossa análise segue agora o mesmo procedimento do caso infinito. Vamos mudar a orientação da magnetização, ou seja, vamos rotacionar o sistema de tal forma que a fita magnética fique localizada no plano  $x-z$ . O termo dipolar é o único termo que se modifica e é escrito como:

$$H_{dip} = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left[ -D_{ij}^{zz} a_i a_j^\dagger (1 + 2\delta_{ij}) + \frac{1}{2} D_{ij}^{xx} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \right]$$

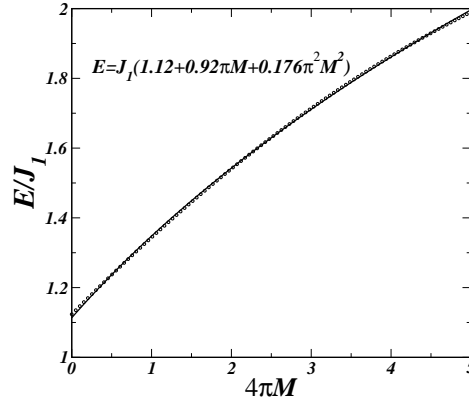


Figura 33: Relação de dispersão de ondas de spin contra a interação de troca de segundos vizinhos  $J_2$  para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ): a)  $q_x = 0$ , b)  $q_x = 0,5\pi a$ , e c)  $q_x = \pi a$ .

onde

$$D_{ij}^{xx} = \frac{X^2}{|r_{ij}|^5}, \quad (4.36)$$

$$D_{ij}^{zz} = \frac{1}{|r_{ij}|^3} \left( 1 - \frac{3Z^2}{|r_{ij}|^2} \right). \quad (4.37)$$

E o Hamiltoniano total fica

$$H = S \sum_{i,j} \left[ (J_{ij} + \bar{h}_0 - (g\mu_B)^2 D_{ij}^{zz}) \delta_{ij} - J_{ij} - \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{ij}^{zz} \right] a_i a_j^\dagger + \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{S}{2} \sum_{i,j} D_{ij}^{xx} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger).$$

Aplicando a transformada de Fourier teremos

$$H = \sum_{qnn'} \left[ A_{nn'}(q) a_{qn} a_{qn'}^\dagger + B_{nn'}(q) (a_{qn} a_{-qnn'} + a_{qn}^\dagger a_{-qn}^\dagger) \right],$$

com

$$A_{nn'}(q) = S \left[ \left( 4J_1 + 4J_2 - 2J_1 \cos q_z a + \bar{H}_0 - (g\mu_B)^2 \sum_{n''} D_{nn''}^{zz}(0) \right) \delta_{n,n'} - (J_1 + 2J_2 \cos(q_z a)) (\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1}) - 0.5(g\mu_B)^2 D_{nn'}^{zz}(q) \right]$$

$$B_{nn'}(q) = \frac{1}{4} D_{nn'}^{xx}(q),$$

cujas somas estão no Apêndice D.

Mais uma vez resolvendo a equação do movimento temos

$$\begin{aligned}
\omega a_{qn} &= \sum_{q',n',n''} \left[ A_{n'n''}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{q'n''}] + B_{n'n''}(q') \left( [a_{qn}, a_{q'n'} a_{-q'n''}] + [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{-q'n''}^\dagger] \right) \right], \\
\omega a_{qn} &= \sum_{q'n'n''} \{ A_{n'n''}(q') a_{q'n''} \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} + B_{n'n''}(q') [\delta_{q,q'} \delta_{n,n'} a_{-q'n''}^\dagger + \delta_{q,-q'} \delta_{n,n''} a_{q'n'}^\dagger] \} \\
\omega a_{qn} &= \sum_{n'} \{ A_{nn'}(q) a_{qn'} + (B_{nn'}(q) + B_{n'n}(-q)) a_{-qn'}^\dagger \} \\
\omega a_{-qn}^\dagger &= \sum_{n'} \{ -A_{n'n}(-q) a_{-qn'}^\dagger - (B_{nn'}(-q) + B_{n'n}(q)) a_{qn'} \} \\
\omega a_{qn} &= \sum_{n'} \{ A_{nn'}(q) a_{qn'} + 2B_{nn'}(q) a_{-qn'}^\dagger \} \\
\omega a_{-qn}^\dagger &= \sum_{n'} \{ -A_{n'n}(q) a_{-qn'}^\dagger - 2B_{n'n}(q) a_{qn'} \},
\end{aligned}$$

Na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^T & -A^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

O resultado obtido para as energias das ondas de spin é mostrado na Figura 34. Quando olhamos para figura aparentemente não existe diferença para o caso do sistema no plano  $x - y$ . Contudo, se formos mais detalhistas e observamos as energias para pequenos valores de vetor de onda podemos notar que o sistema no plano  $x - z$  é mais afetado pela interação dipolar. Tal comportamento se torna mais perceptível quando analisamos o comportamento das energia com a variação da interação dipolar. Esse comportamento é mostrado na Figura 35. As curvas demonstram um caráter linear diferentemente do que acontece no plano  $x - y$  e além disso podemos ver um decréscimo nas energias para  $q_z = \pi a$ .

Fazendo uma comparação mais precisa, mostramos na Figura 36 os modos de mais baixa energia das ondas de spin nas duas orientações. Aquilo que é quase imperceptível no espectro de energia contra vetor de onda fica bem evidente agora que as energias para a orientação no plano  $x - z$  sofrem um efeito maior da interação dipolar. Além disso o comportamento linear é bem evidente e a curva pode ser fitada pela função  $E = J_1(1.1 + 0.6\pi M)$ .

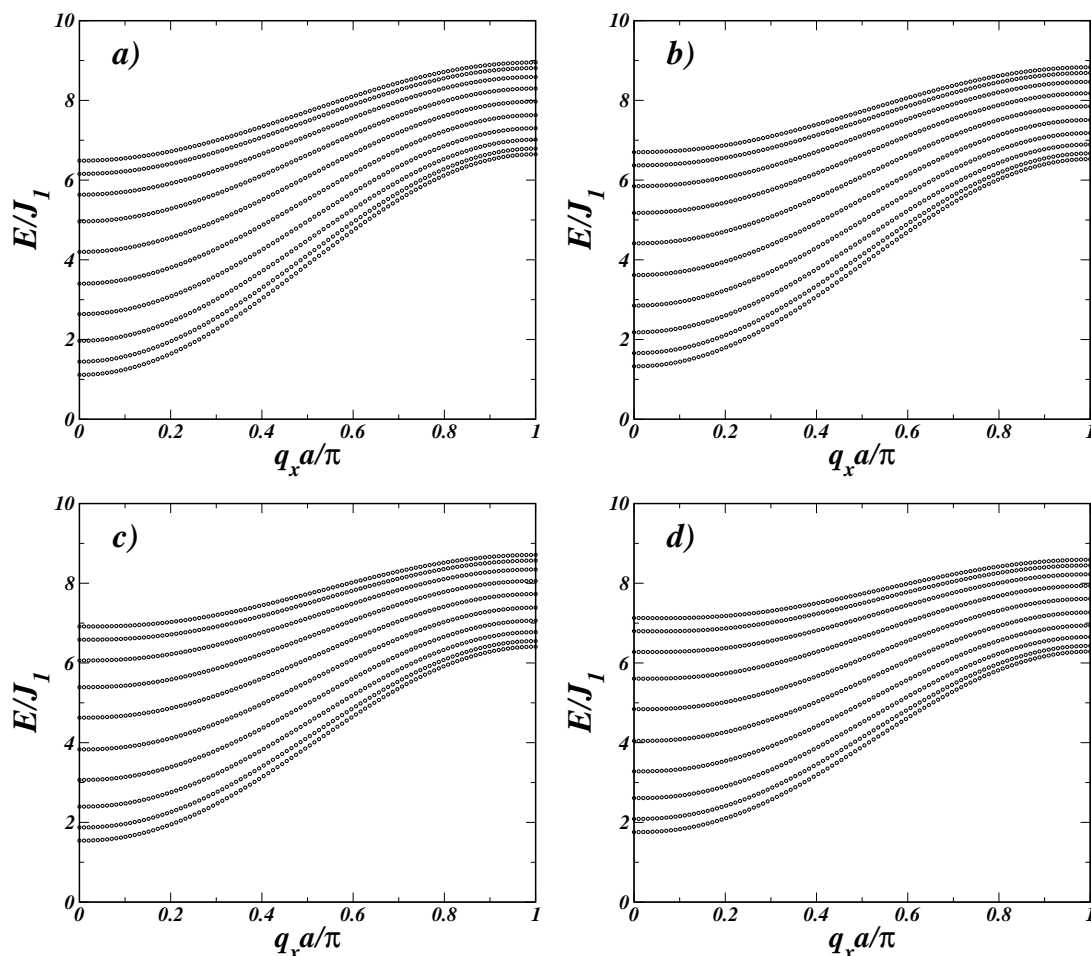


Figura 34: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar para o sistema no plano  $x - z$ : a)  $4\pi M = 0$ , b)  $4\pi M = 1$ , c)  $4\pi M = 2$ , d)  $4\pi M = 3$ .

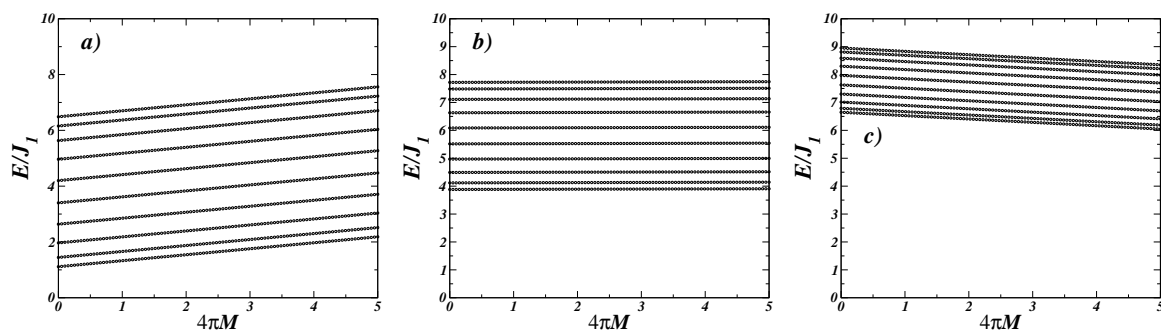


Figura 35: Relação entre energia e interação dipolar para uma fita quadrada com 10 linhas atômicas ( $N=10$ ) no plano  $x - z$ : a)  $q_z = 0$ , b)  $q_z = 0, 5\pi a$ , e c)  $q_z = \pi a$ .

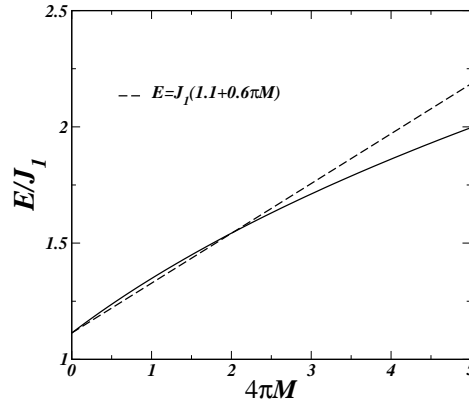


Figura 36: Os modos de mais baixa energia para um sistema no plano  $x - y$  linha sólida e no plano  $x - z$  linha tracejada. A curva para o plano  $x - z$  pode ser fitada por uma função linear como mostra a legenda.

## 4.6 Ondas de Spin em uma Rede Favo de Mel Infinita sem Interação Dipolar

Neste momento vamos estudar uma rede favo de mel infinita expressa pela Figura 37 abaixo. Aqui temos  $H = \frac{1}{2}H^{(a)} + \frac{1}{2}H^{(b)} + H^I$ , onde o termo  $1/2$  indica que os sítios  $a$  e  $b$

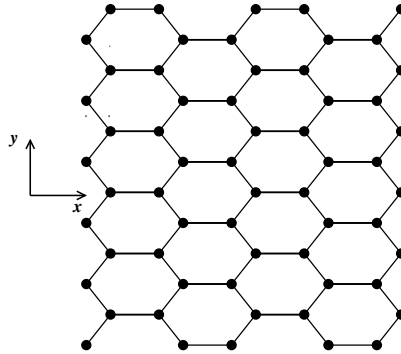


Figura 37: Fita Magnética Finita em uma Direção.

ocupam metade da rede. Cada termo então pode ser escrito como

$$H^I = - \sum_{i,j} J_{i,j}^{(1)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b \quad (4.39)$$

$$H^{(a)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(2)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^{z_a} \quad (4.40)$$

$$H^{(b)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(2)} \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^{z_b} \quad (4.41)$$

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

$$S_i^x = \frac{\sqrt{2S}}{2}(a_i + a_i^+) \quad (4.42)$$

$$S_i^y = i \frac{\sqrt{2S}}{2}(a_i^+ - a_i) \quad (4.43)$$

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i \quad (4.44)$$

$$S_i^{xa} S_j^{xb} = \frac{S}{2}(a_i + a_i^+)(b_j + b_j^+) = \frac{S}{2}(a_i b_j + a_i b_j^+ + a_i^+ b_j + a_i^+ b_j^+) \quad (4.45)$$

$$S_i^{ya} S_j^{yb} = -\frac{S}{2}(a_i^+ - a_i)(b_j^+ - b_j) = \frac{S}{2}(a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i b_j - a_i^+ b_j^+) \quad (4.46)$$

$$S_i^{za} S_j^{zb} = (S - a_i^+ a_i)(S - b_j^+ b_j) = -S(a_i^+ a_i + b_j^+ b_j) \quad (4.47)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b = S(a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i^+ a_i - b_j^+ b_j) \quad (4.48)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a = 2S(a_i^+ a_j - a_i^+ a_i) \quad (4.49)$$

$$\vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b = 2S(b_i^+ b_j - b_i^+ b_i), \quad (4.50)$$

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

Aplicando agora a transformada de Fourier, da mesma forma que nas seções anteriores temos

$$H = \sum_q [A(q)a_q^\dagger a_q + B(q)b_q^\dagger b_q + C(q)a_q^\dagger b_q + D(q)a_q b_q^\dagger]$$

Na rede favo de mel temos 3 primeiros com vizinhos distância  $a$  e 6 segundos vizinhos com distância  $\sqrt{3}a$ . Para os primeiros vizinhos o fator de estrutura é

$$J_1(q) = J_1 \left( e^{iq_x a} + e^{i(-q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(-q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} \right) \quad (4.51)$$

$$J_1(q) = J_1 \left( e^{iq_x a} + 2e^{-iq_x a/2} \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right) \quad (4.52)$$

$$J_2(q) = J_2 \left( e^{i(3q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(3q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(-3q_x a/2 + \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i(-3q_x a/2 - \sqrt{3}q_y a/2)} + e^{i\sqrt{3}q_y a} + e^{-i\sqrt{3}q_y a} \right) \quad (4.53)$$

$$J_2(q) = J_2 \left( 4 \cos(3q_x a/2) \cos(\sqrt{3}q_y a/2) + 2 \cos(\sqrt{3}q_y a) \right) \quad (4.54)$$

$$J_2^{(a)}(q) = J_2^{(b)} = J_2(q) \quad (4.55)$$

$$J_1^{(a)}(q) = J_1^{(b)*} = J_1(q) \quad (4.56)$$

$$A(q) = \frac{S}{2} [6J_1 + 6J_2 + \bar{H}_0 - J_2(q)],$$

$$B(q) = A(q)$$

$$C(q) = -SJ_1(q),$$

$$D(q) = C^*(q)$$

Usando a equação de Heisenberg  $idO/dt = [O, H]$  obtemos

$$\omega a_q = \sum_{q'} \left[ A(q') [a_q, a_{q'} a_{q'}^\dagger] + C(q') [a_q, b_{q'} a_{q'}^\dagger] \right],$$

$$\omega a_q = A(q) a_q + C(q) b_q,$$

$$\omega b_q = D(q) a_q + B(q) b_q,$$

ou

$$(\omega - A(q)) a_q = C(q) b_q,$$

$$(\omega - A(q)) b_q = C^*(q) a_q,$$

$$(\omega - A(q))^2 = |C(q)|^2 \quad (4.57)$$

$$\omega = A(q) \pm \sqrt{C(q)C^*(q)}, \quad (4.58)$$

onde

$$\begin{aligned} C(q)C^*(q) &= J_1^2 \left[ e^{iq_x a} + 2e^{-iq_x a/2} \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right] \left[ e^{-iq_x a} + 2e^{+iq_x a/2} \cos(\sqrt{3}q_y a/2) \right] \\ &= J_1^2 \left( 1 + 4 \cos^2 \sqrt{3}q_y a/2 + 4 \cos \sqrt{3}q_y a/2 \cos q_x a/2 \right). \end{aligned}$$

A Equação (4.58) nos dá a relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel infinita levando em consideração as interações de primeiros e segundos vizinhos. Da equação podemos notar que a interação de segundos vizinhos entra no termo  $A(\vec{q})$ , ou seja, contribui como um termo aditivo. Essa contribuição, de acordo com a Equação (4.54), aparentemente não é linear. Dito isso, mostramos na Figura 38 o gráfico do contorno das energias para uma rede favo de mel infinita para diferentes valores da interação de segundos vizinhos  $J_2$ . Da figura podemos ver claramente que a medida que aumentamos essa interação a figura vai tomando tonalidades de vermelho, o que implica em um aumento de energia. Podemos perceber também que os contornos vão perdendo a característica hexagonal. Indicando que esse aumento de energia não é linear. Para melhor observarmos a influência dessa interação de segundos vizinhos apresentamos a Figura 39. Nela fixamos dois valores de  $q_y$  e variamos o valor de  $J_2$ . No painel da esquerda onde  $q_y = 0$ , observamos que  $J_2$  afeta mais os modos onde  $q_x = 0$  e  $q_x = \pm 4\pi/3a$ . O mesmo acontece quando fixamos  $q_y = \pi/a$ .

Escolhendo caminhos específicos dentro da zona de Brillouin, vemos que a energia possui um comportamento linear em torno do ponto  $K$ , definido pelas coordenadas  $q_x a = 2\pi/3$  e  $q_y a = 2\pi/3\sqrt{3}$ , como mostra a Figura 40. A medida que aumentamos o valor de  $J_2$  percebemos que a energia perde esse caráter linear. No painel da direita da figura mostramos a diferença de energia entre os modos com  $J_2 = 0$  e  $J_2 = 0,1J_1$ . Como mencionamos anteriormente, o efeito dos segundos vizinhos não é de nenhuma maneira linear. Para finalizar nossa análise vamos mostrar o comportamento da densidade de estados da rede favo de mel para os diferentes valores de  $J_2$ . Isso é mostrado na Figura 41. Essa figura também mostra a perda do caráter linear das energias no seu ponto menos energético, ou seja, em torno do ponto  $K$ .

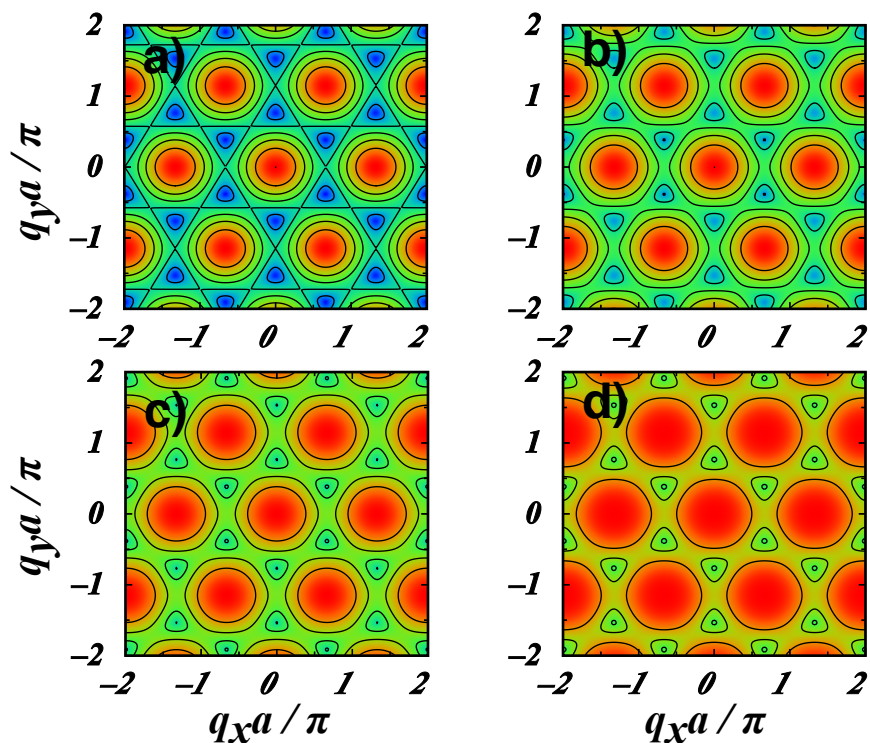


Figura 38: Curva de contorno para as energias de ondas de spin em uma rede favo de mel para diferentes valores da interação de segundos vizinhos a)  $J_2 = 0$ , b)  $J_2 = 0, 1J_1$ , c)  $J_2 = 0, 2J_1$ , e d)  $J_2 = 0, 3J_1$ . A energia cresce do azul até o vermelho  $2 < E/J_1 < 6$ .

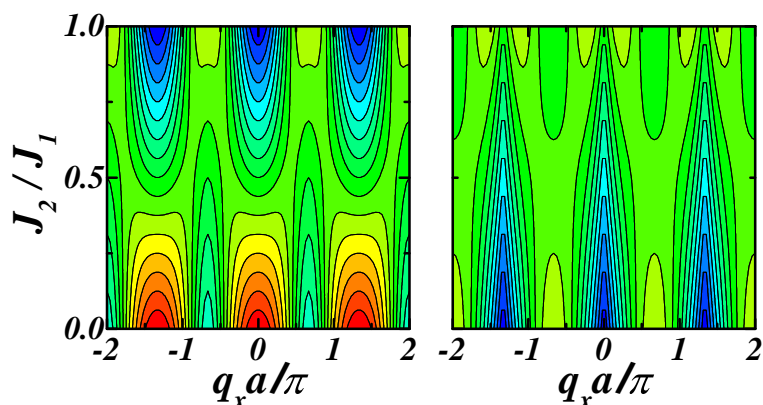


Figura 39: Curva de contorno para as energias de ondas de spin numa rede favo de mel sem interação dipolar. A energia cresce do azul até o vermelho  $2 < E/J_1 < 6$ . O painel da direita  $q_y = 0$  e  $q_y = \pi/a$  no painel da esquerda.

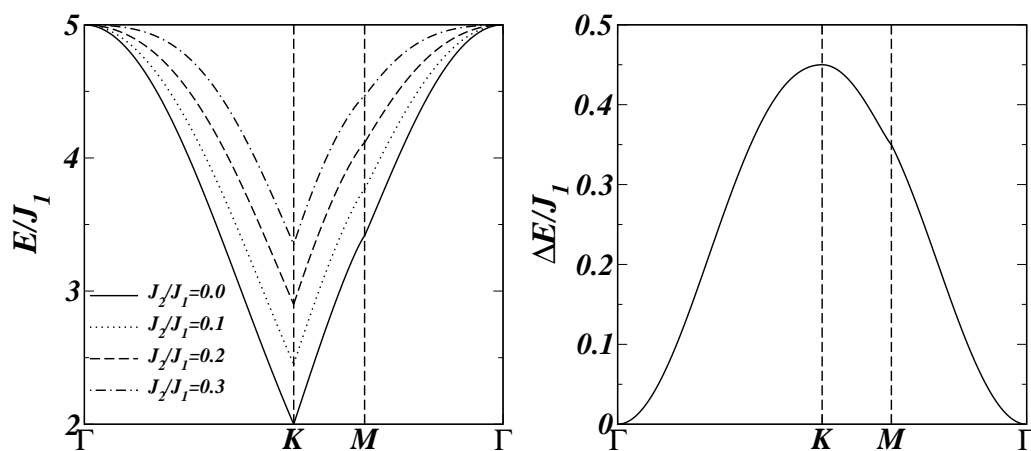


Figura 40: A relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel ao longo dos caminhos  $\Gamma - K$ ,  $K - M$ ,  $M - \Gamma$  para diferentes valores da interação de segundos vizinhos  $J_2$ . No painel da direita temos a diferença entre os modos com  $J_2 = 0$  e  $J_2 = 0,1J_1$ .

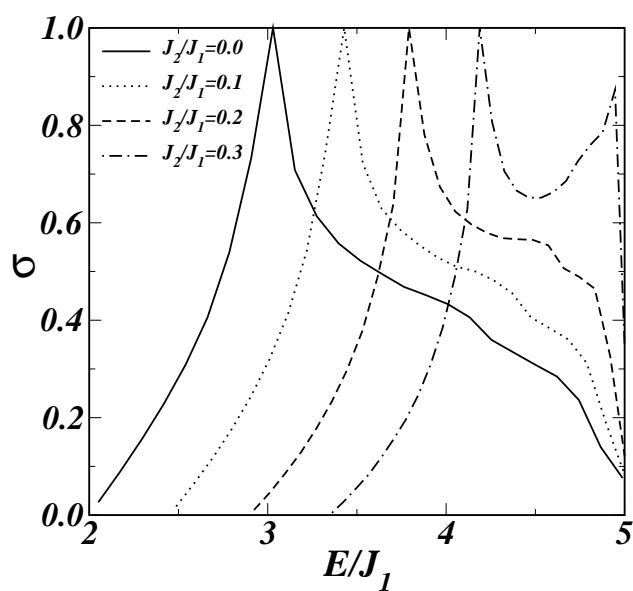


Figura 41: A densidade de estados  $\sigma$  para a rede favo de mel infinita sem interação dipolar.

## 4.7 Rede Favo de mel infinita com interação dipolar

Vamos introduzir agora a interação dipolar. Nesse caso a orientação da rede é importante. Aqui usaremos o plano  $XY$ . Para isso temos  $H = H^{(a)} + H^{(b)} + H^I$ , onde

$$H^I = - \sum_{i,j} J_{i,j}^{(1)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + H_{dip}^I \quad (4.59)$$

$$H^{(a)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(2)} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^{za} + H_{dip}^{(a)} \quad (4.60)$$

$$H^{(b)} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j}^{(2)} \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b - g\mu_B H_0 \sum_i S_i^{zb} + H_{dip}^{(b)} \quad (4.61)$$

onde

$$H_{dip}^I = \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b}{|r_{ij}^{(ab)}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i^a \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^b \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} \right] \quad (4.62)$$

$$H_{dip}^{(a)} = \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a}{|r_{ij}^{(a)}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i^a \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^a \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}^{(a)}|^5} \right] \quad (4.63)$$

$$H_{dip}^{(b)} = \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \left[ \frac{\vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b}{|r_{ij}^{(b)}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i^b \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^b \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}^{(b)}|^5} \right] \quad (4.64)$$

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

$$S_i^x = \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i + a_i^+) \quad (4.65)$$

$$S_i^y = i \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_i^+ - a_i) \quad (4.66)$$

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i \quad (4.67)$$

$$S_i^{xa} S_j^{xb} = \frac{S}{2} (a_i + a_i^+) (b_j + b_j^+) = \frac{S}{2} (a_i b_j + a_i b_j^+ + a_i^+ b_j + a_i^+ b_j^+) \quad (4.68)$$

$$S_i^{ya} S_j^{yb} = -\frac{S}{2} (a_i^+ - a_i) (b_j^+ - b_j) = \frac{S}{2} (a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i b_j - a_i^+ b_j^+) \quad (4.69)$$

$$S_i^{za} S_j^{zb} = (S - a_i^+ a_i) (S - b_j^+ b_j) = -S (a_i^+ a_i + b_j^+ b_j) \quad (4.70)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b = S (a_i b_j^+ + a_i^+ b_j - a_i^+ a_i - b_j^+ b_j) \quad (4.71)$$

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a = 2S (a_i^+ a_j - a_i^+ a_i) \quad (4.72)$$

$$\vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b = 2S (b_i^+ b_j - b_i^+ b_i), \quad (4.73)$$

$$(S_i^{xa} X + S_i^{ya} Y) = \frac{\sqrt{2S}}{2}(a_i + a_i^\dagger)X + i\frac{\sqrt{2S}}{2}(a_i^\dagger - a_i)Y \quad (4.74)$$

$$(S_j^{xb} X + S_j^{yb} Y) = \frac{\sqrt{2S}}{2}(b_j + b_j^\dagger)X + i\frac{\sqrt{2S}}{2}(b_j^\dagger - b_j)Y, \quad (4.75)$$

$$(\vec{S}_i^a \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^b \cdot \vec{r}_{ij}) = \frac{S}{2}(a_i b_j + a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)X^2 - \quad (4.76)$$

$$- \frac{S}{2}(a_i b_j - a_i b_j^\dagger - a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)Y^2 - \quad (4.77)$$

$$- i\frac{S}{2}(a_i b_j - a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j - a_i^\dagger b_j^\dagger)XY - \quad (4.78)$$

$$- i\frac{S}{2}(a_i b_j + a_i b_j^\dagger - a_i^\dagger b_j - a_i^\dagger b_j^\dagger)XY, \quad (4.79)$$

$$(\vec{S}_i^a \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^b \cdot \vec{r}_{ij}) = \frac{S}{2}(a_i b_j + a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)X^2 - \quad (4.80)$$

$$- \frac{S}{2}(a_i b_j - a_i b_j^\dagger - a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)Y^2 - \quad (4.81)$$

$$- i\frac{S}{2}(2a_i b_j - 2a_i^\dagger b_j^\dagger)XY, \quad (4.82)$$

$$(\vec{S}_i^a \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^a \cdot \vec{r}_{ij}) = \frac{S}{2}(a_i a_j + 2a_i^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger)X^2 - \quad (4.83)$$

$$- \frac{S}{2}(a_i a_j - 2a_i^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger)Y^2 - \quad (4.84)$$

$$- i\frac{S}{2}(2a_i a_j - 2a_i^\dagger a_j^\dagger)XY \quad (4.85)$$

$$(\vec{S}_i^b \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j^b \cdot \vec{r}_{ij}) = \frac{S}{2}(b_i b_j + 2b_i^\dagger b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger)X^2 - \quad (4.86)$$

$$- \frac{S}{2}(b_i b_j - 2b_i^\dagger b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger)Y^2 - \quad (4.87)$$

$$- i\frac{S}{2}(2b_i b_j - 2b_i^\dagger b_j^\dagger)XY \quad (4.88)$$

Podemos agora rescrever os termos dipolares em função dos operadores  $a$  e  $b$ .

$$\begin{aligned}
H_{dip}^I = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} & \left[ \frac{(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j - a_i^\dagger a_i - b_j^\dagger b_j)}{|r_{ij}^{(ab)}|^3} - \right. \\
& - \frac{3(a_i b_j + a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)X^2/2}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} + \\
& + \frac{3(a_i b_j - a_i b_j^\dagger - a_i^\dagger b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)Y^2/2}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} \\
& \left. + i \frac{3(a_i b_j - a_i^\dagger b_j^\dagger)XY}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} \right] \quad (4.89)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{dip}^{(a)} = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} & \left[ \frac{2(a_i^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i)}{|r_{ij}^{(a)}|^3} - \right. \\
& - \frac{3(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + 2a_i^\dagger a_j)X^2/2}{|r_{ij}^{(a)}|^5} + \\
& + \frac{3(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger - 2a_i^\dagger a_j)Y^2/2}{|r_{ij}^{(a)}|^5} \\
& \left. + i \frac{3(a_i a_j - a_i^\dagger a_j^\dagger)XY}{|r_{ij}^{(a)}|^5} \right] \quad (4.90)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{dip}^{(b)} = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} & \left[ \frac{2(b_i^\dagger b_j - b_i^\dagger b_i)}{|r_{ij}^{(b)}|^3} - \right. \\
& - \frac{3(b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger + 2b_i^\dagger b_j)X^2/2}{|r_{ij}^{(b)}|^5} + \\
& + \frac{3(b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger - 2b_i^\dagger b_j)Y^2/2}{|r_{ij}^{(b)}|^5} \\
& \left. + i \frac{3(b_i b_j - b_i^\dagger b_j^\dagger)XY}{|r_{ij}^{(b)}|^5} \right] \quad (4.91)
\end{aligned}$$

com

$$\frac{3(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j)X^2/2}{|r_{ij}|^5} + \frac{3(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j)Y^2/2}{|r_{ij}|^5} = \frac{3(a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j)}{2|r_{ij}|^3},$$

$$H_{dip}^I = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left[ -\frac{1}{2} \frac{(a_i b_j^+ + a_i^+ b_j + 2a_i^+ a_i + 2b_j^+ b_j)}{|r_{ij}^{(ab)}|^3} - \frac{3(a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)(X^2 - Y^2)/2}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} \right] - 3i \frac{(a_i b_j - a_i^\dagger b_j^\dagger)XY}{|r_{ij}^{(ab)}|^5} \quad (4.92)$$

$$H_{dip}^{(a)} = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left[ -\frac{(a_i^+ a_j + 2a_i^+ a_i)}{|r_{ij}^{(a)}|^3} - \frac{3(a_i a_j + a_i^+ a_j^+)(X^2 - Y^2)/2}{|r_{ij}^{(a)}|^5} \right] - 3i \frac{(a_i a_j - a_i^+ a_j^+)XY}{|r_{ij}^{(a)}|^5} \quad (4.93)$$

$$H_{dip}^{(b)} = (g\mu_B)^2 \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left[ -\frac{(b_i^+ b_j + 2b_i^+ b_i)}{|r_{ij}^{(b)}|^3} - \frac{3(b_i b_j + b_i^+ b_j^+)(X^2 - Y^2)/2}{|r_{ij}^{(b)}|^5} \right] - 3i \frac{(b_i b_j + b_i^+ b_j^+)XY}{|r_{ij}^{(b)}|^5}, \quad (4.94)$$

e escrevendo  $H_{dip}^I = H_{dip}^{(ab)} + H_{dip}^{(ba)}$

$$H_{dip}^{(ab)} = - (g\mu_B)^2 \frac{S}{4} \sum_{i,j} \left[ D_{ij}^{zz(ab)} (a_i^\dagger b_j + 2a_i^\dagger a_j \delta_{ij}) + (D_{ij}^{xx(ab)} - D_{ij}^{yy(ab)} - 2iD_{ij}^{xy(ab)}) a_i^\dagger b_j^\dagger \right]$$

$$H_{dip}^{(ba)} = - (g\mu_B)^2 \frac{S}{4} \sum_{i,j} \left[ D_{ij}^{zz(ba)} (a_i b_j^\dagger + 2b_i^\dagger b_j \delta_{ij}) + (D_{ij}^{xx(ba)} - D_{ij}^{yy(ba)} + 2iD_{ij}^{xy(ba)}) a_i b_j \right]$$

$$H_{dip}^{(a)} = - (g\mu_B)^2 \frac{S}{4} \sum_{i,j} \left[ 2D_{ij}^{zz(a)} a_i^+ a_j (1 + 2\delta_{ij}) + (D_{ij}^{xx(a)} - D_{ij}^{yy(a)} - 2iD_{ij}^{xy(a)}) a_i a_j + (D_{ij}^{xx(a)} - D_{ij}^{yy(a)} + 2iD_{ij}^{xy(a)}) a_i^\dagger a_j^\dagger \right]$$

$$H_{dip}^{(b)} = - (g\mu_B)^2 \frac{S}{4} \sum_{i,j} \left[ 2D_{ij}^{zz(b)} b_i^+ b_j (1 + 2\delta_{ij}) + (D_{ij}^{xx(b)} - D_{ij}^{yy(b)} - 2iD_{ij}^{xy(b)}) b_i b_j + (D_{ij}^{xx(b)} - D_{ij}^{yy(b)} + 2iD_{ij}^{xy(b)}) b_i^\dagger b_j^\dagger \right]$$

onde

$$D_{ij}^{\alpha\beta(\eta)} = 3 \frac{\alpha\beta}{|r_{ij}^{(\eta)}|^5}, \quad (4.95)$$

$$D_{ij}^{zz(\eta)} = \frac{1}{|r_{ij}^{(\eta)}|^3}, \quad (4.96)$$

e  $\alpha = x, y$ ,  $\beta = x, y$ , e  $\eta = ab, ba, a, b$  e as somas são explícitas no Apêndice E.

$$\begin{aligned} H = & \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left\{ \left[ 2J_{ij}^{(1)} + J_{ij}^{(2)} + \bar{H}_0 + (g\mu_B)^2 \left( 2D_{ij}^{zz(a)} + D_{ij}^{zz(ab)} \right) \right] \delta_{ij} - J_{ij}^{(2)} + \right. \\ & \left. (g\mu_B)^2 D_{ij}^{zz(a)} \right\} a_i^\dagger a_j + \frac{(g\mu_B)^2}{2} S \sum_{i,j} \left( \mathcal{D}_{ij}^{*(a)} a_i a_j + \mathcal{D}_{ij}^{(a)} a_i^\dagger a_j^\dagger \right) + \\ & \frac{S}{2} \sum_{i,j} \left\{ \left[ 2J_{ij}^{(1)} + J_{ij}^{(2)} + \bar{H}_0 + (g\mu_B)^2 \left( 2D_{ij}^{zz(b)} + D_{ij}^{zz(ba)} \right) \right] \delta_{ij} - J_{ij}^{(2)} + \right. \\ & \left. (g\mu_B)^2 D_{ij}^{zz(b)} \right\} b_i^\dagger b_j + \frac{(g\mu_B)^2}{2} S \sum_{i,j} \left( \mathcal{D}_{ij}^{*(b)} b_i b_j + \mathcal{D}_{ij}^{(b)} b_i^\dagger b_j^\dagger \right) - \\ & - S \sum_{i,j} \left[ \left( J_{ij}^{(1)} - \frac{(g\mu_B)^2}{4} D_{ij}^{zz(ab)} \right) a_i^\dagger b_j - \frac{(g\mu_B)^2}{4} \mathcal{D}_{ij}^{(ab)} a_i^\dagger b_j^\dagger \right] \\ & - S \sum_{i,j} \left[ \left( J_{ij}^{(1)} - \frac{(g\mu_B)^2}{4} D_{ij}^{zz(ba)} \right) a_i b_j^\dagger - \frac{(g\mu_B)^2}{4} \mathcal{D}_{ij}^{*(ba)} a_i b_j \right], \end{aligned}$$

onde  $\mathcal{D}_{ij}^{(\eta)} = \left( D_{ij}^{xx(\eta)} - D_{ij}^{yy(\eta)} - 2iD_{ij}^{xy(\eta)} \right)$ . Aplicando a transformada de Fourier teremos

$$\begin{aligned} H = & \sum_q \left[ A(q) a_q a_q^\dagger + B^*(q) a_q a_{-q} + B(q) a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + \right. \\ & + C(q) b_q b_q^\dagger + D^*(q) b_q b_{-q} + D(q) b_q^\dagger b_{-q}^\dagger + \\ & \left. + E(q) a_q^\dagger b_q + F(q) a_q b_q^\dagger + G(q) a_q^\dagger b_{-q}^\dagger + L(q) b_q a_{-q} \right]. \end{aligned}$$

Na rede favo de mel temos 3 primeiros com vizinhos distância  $a$  e 6 segundos vizinhos com distância  $\sqrt{3}a$ . Para os primeiros vizinhos o fator de estrutura é

$$J_1(q) = J_1 \left( e^{iq_z a} + e^{i(-q_z a/2 + \sqrt{3}q_x a/2)} + e^{i(-q_z a/2 - \sqrt{3}q_x a/2)} \right) \quad (4.97)$$

$$J_1(q) = J_1 \left( e^{iq_z a} + 2e^{-iq_z a/2} \cos(\sqrt{3}q_x a/2) \right) \quad (4.98)$$

$$J_2(q) = J_2 \left( e^{i(3q_z a/2 + \sqrt{3}q_x a/2)} + e^{i(3q_z a/2 - \sqrt{3}q_x a/2)} + e^{i(-3q_z a/2 + \sqrt{3}q_x a/2)} + e^{i(-3q_z a/2 - \sqrt{3}q_x a/2)} + e^{i\sqrt{3}q_x a} + e^{-i\sqrt{3}q_x a} \right) \quad (4.99)$$

$$J_2(q) = J_2 \left( 4 \cos(3q_z a/2) \cos(\sqrt{3}q_x a/2) + 2 \cos(\sqrt{3}q_x a) \right) \quad (4.100)$$

$$J_2^{(a)}(q) = J_2^{(b)} = J_2(q) \quad (4.101)$$

$$J_1^{(a)}(q) = J_1^{(b)*} = J_1(q). \quad (4.102)$$

Podemos escrever os coeficientes

$$A(q) = S \left[ 3(J_1 + J_2) + 0.5\bar{H}_0 + \frac{(g\mu_B)^2}{2} (2D^{zz(a)}(0) + D^{zz(ab)}(0)) - 0.5J_2(q) + \frac{(g\mu_B)^2}{2} D^{zz(a)}(q) \right],$$

$$B(q) = \frac{S}{2} \mathcal{D}^{(a)}(q),$$

$$C(q) = S \left[ 3(J_1 + J_2) + 0.5\bar{H}_0 + \frac{(g\mu_B)^2}{2} (2D^{zz(b)}(0) + D^{zz(ba)}(0)) - 0.5J_2(q) + \frac{(g\mu_B)^2}{2} D^{zz(b)}(q) \right],$$

$$D(q) = \frac{S}{2} \mathcal{D}^{(b)}(q),$$

$$E(q) = -S \left( J_1(q) - \frac{(g\mu_B)^2}{4} D^{zz(ab)}(q) \right),$$

$$F(q) = -S \left( J_1(q) - \frac{(g\mu_B)^2}{4} D^{zz(ba)}(q) \right),$$

$$G(q) = \frac{S}{4} (g\mu_B)^2 \mathcal{D}^{(ab)}(q),$$

$$L(q) = \frac{S}{4} (g\mu_B)^2 \mathcal{D}^{*(ba)}(q).$$

Mais uma vez  $\mathcal{D}^{(\eta)}(q) = (D^{xx(\eta)}(q) - D^{yy(\eta)}(q) - 2iD^{xy(\eta)}(q))$ . E usando a equação de Heisenberg  $idO/dt = [O, H]$  obtemos

$$\begin{aligned}\omega a_q &= \sum_{q'} \left[ A(q') [a_q, a_{q'} a_{q'}^\dagger] + B(q') [a_q, a_{q'}^\dagger a_{-q'}^\dagger] + \right. \\ &\quad \left. F(q') [a_q, b_{q'} a_{q'}^\dagger] + G(q') [a_q, b_{q'}^\dagger a_{-q'}^\dagger] \right], \\ \omega a_q &= A(q) a_q + (B(q) + B(-q)) a_{-q}^\dagger + F(q) b_q + G(-q) b_{-q}^\dagger, \\ \omega a_{-q}^\dagger &= -(B^*(q) + B^*(-q)) a_q - A(q) a_{-q}^\dagger - L(q) b_q - E(-q) b_{-q}^\dagger, \\ \omega b_q &= E(q) a_q + G(q) a_{-q}^\dagger + C(q) b_q + (D(q) + D(-q)) b_{-q}^\dagger, \\ \omega b_{-q}^\dagger &= -L(q) a_q - F(-q) a_{-q}^\dagger - (D^*(q) + D^*(-q)) b_q - C(q) b_{-q}^\dagger.\end{aligned}$$

Na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \\ b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(q) & B'(q) & F(q) & G(-q) \\ -B'^*(q) & -A(q) & -L(q) & -E(-q) \\ E(q) & G(q) & C(q) & D'(q) \\ -L(q) & -F(-q) & -D'^*(q) & -C(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \\ b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (4.103)$$

onde definimos  $\Delta'(q) = \Delta(q) + \Delta(-q)$ , onde  $\Delta = B, D$ . Os termos dipolares são calculados no apêndice E.

A Figura 42 mostra a curva de contorno das energias para diferentes valores da intensidade da interação dipolar, sendo essa interação dada por  $M_S = 4\pi M g_{\mu_B}$ . Como nos casos anteriores, o efeito de uma nova interação muda o espectro de energia. Aqui, com o aumento da intensidade da interação dipolar podemos notar que as energias mais baixas aumentam mais rapidamente que os modos de mais alta energia. Também podemos perceber a falta de reciprocidade, a qual pode ser visualizada pelas diferentes formas com que os modos para  $q_x > 0$  são modificados frente aos valores negativos de  $q_x$  na zona de Brillouin. Contudo, o padrão hexagonal continua presente mesmo para  $M_S = 3$ . A dependência em  $M_S$  fica mais evidente na Figura 43. Nela também podemos ver que essa falta de reciprocidade acontece para os modos mais energéticos. É importante mencionar que essa quebra de simetria se dá mais fortemente na presença de interações do tipo spin-órbita ou quando existe a presença de modos conhecidos como modos de Damos-Eshbach. Dessa forma essa quebra de reciprocidade deve ser uma indicação da presença de tais modos no espectro já que não estamos introduzindo nenhuma interação do tipo spin-órbita no modelo.

Um outro aspecto interessante da interação dipolar, é que ela altera o caráter linear

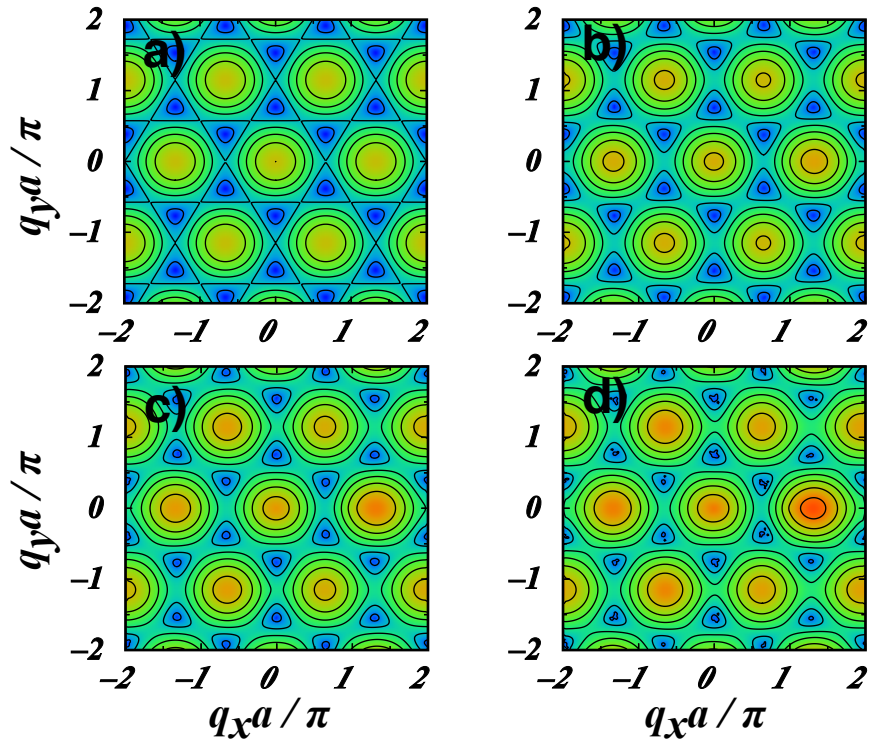


Figura 42: Curva de contorno para as energias de ondas de spin para uma rede favô de mel: a)  $4\pi M = 0$ , b)  $4\pi M = 1$ , c)  $4\pi M = 2$ , d)  $4\pi M = 3$ . A energia cresce do azul até o vermelho  $2 < E/J_1 < 6$ .

dos modos de energia em torno do ponto  $K$  da zona de Brillouin. Esse comportamento é mostrado na Figura 44. A densidade de estados mostra que o comportamento linear para as baixas energias realmente é alterado à medida que  $M_S$  aumenta (Fig.45).

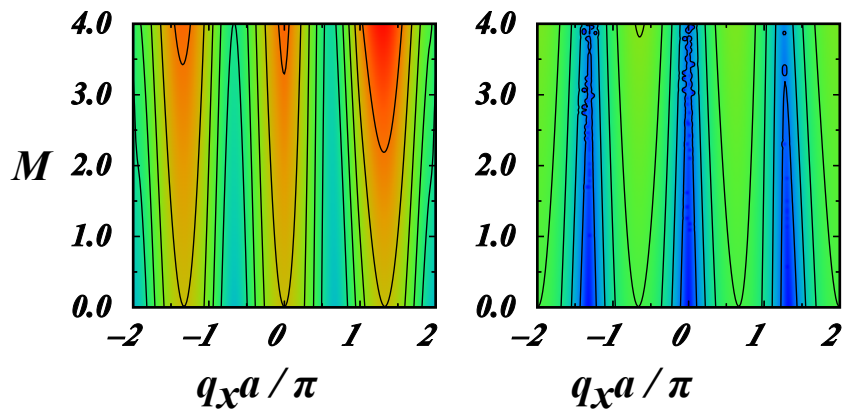


Figura 43: Curva de contorno para as energias de ondas de spin para valores fixos de  $q_y$ . O painel da direita é para  $q_y = 0$ , enquanto que o painel da esquerda é para  $q_y = 2\pi/3a$ . A energia cresce do azul até o vermelho  $2 < E/J_1 < 6$ .

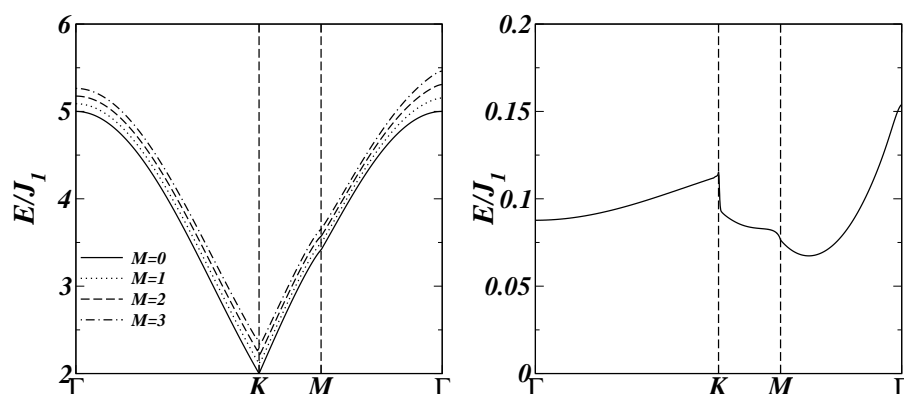


Figura 44: A relação de dispersão para as ondas de spin em uma rede favo de mel ao longo dos caminhos  $\Gamma - K$ ,  $K - M$ ,  $M - \Gamma$  para diferentes valores da interação dipolar  $M_S$ . No painel da direita temos a diferença entre os modos com  $M_S = 0$  e  $M_S = 1$ .

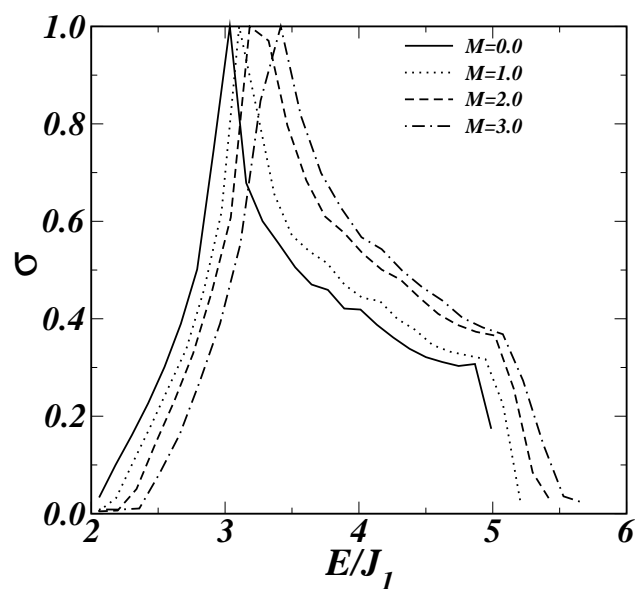


Figura 45: A densidade de estados  $\sigma$  para a rede favo de mel infinita com interação dipolar.

## 4.8 Rede favo de mel finita sem interação dipolar

A rede favo de mel finita fica bem expressa pelo Hamiltoniano descrito abaixo:

$$H = \sum_{qnn'} \left[ A_{nn'}(q) (a_{qn}^\dagger a_{qn'} + b_{qn}^\dagger b_{qn'}) + C_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger b_{qn'} + C_{nn'}^*(q) a_{qn} b_{qn'}^\dagger \right].$$

com

$$\begin{aligned} A_{nn'}(q) &= \frac{1}{2} S \left[ (3J_1 + 6J_2 + \bar{H}_0) \delta_{nn'} - 2J_2 \cos(3q_x/2) (\delta_{n'n+1} + \delta_{n'n-1}) \right. \\ &\quad \left. - J_2 (\delta_{n'n+2} + \delta_{n'n-2}) \right] \\ C_{nn'}(q) &= -S \left[ J_1 (e^{iq_x a} \delta_{n'n} + e^{-iq_x a/2} (\delta_{n'n+1} + \delta_{n'n-1})) \right]. \end{aligned}$$

Mais uma vez resolvendo a equação do movimento temos

$$\begin{aligned} \omega a_{qn} &= \sum_{q',n',n''} \left[ A_{n'n''}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{q'n''}] + C_{nn'}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger b_{q'n''}] \right] \\ \omega a_{qn} &= \sum_{q'n'n''} \{ A_{n'n''}(q') a_{q'n''} \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} + C_{n'n''}(q') b_{q'n''} \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} \} \\ \omega a_{qn} &= \sum_{n'} \{ A_{nn'}(q) a_{qn'} + C_{nn'}(q) b_{qn'} \} \\ \omega b_{qn} &= \sum_{n'} \{ A_{nn'}(q) b_{qn'} + C_{n'n}^*(q) a_{qn'} \}. \end{aligned}$$

Na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(q) & C(q) \\ C^{T*}(q) & A(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix}. \quad (4.104)$$

Como a matriz  $C$  é complexa devemos re-escrevê-la

$$\begin{pmatrix} A(q) & 0 & C_r(q) & -C_i(q) \\ 0 & A(q) & C_i(q) & C_r(q) \\ C_r(q) & C_i(q) & A(q) & 0 \\ -C_i(q) & C_r(q) & 0 & A(q) \end{pmatrix} \quad (4.105)$$

Tratando agora com uma fita magnética com segundos vizinhos vamos analisar esse efeito na relação de dispersão. Com podemos ver na Figura 46 temos 10 modos de energia que são alterados drasticamente quando incluímos a interação de segundos vizinhos. A energia máxima continua praticamente a mesma mas modos de mais baixa energia são fortemente alterados fazendo com que o espectro fique achatado, ou seja, confinado em uma

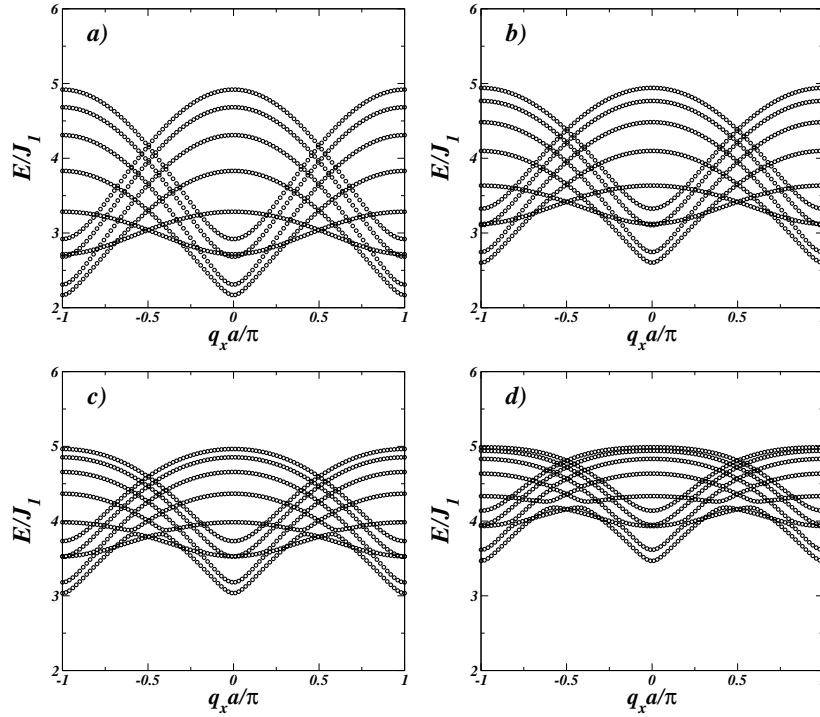


Figura 46: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da de segundos vizinhos para uma fita com  $N = 10$  linhas atômicas: a)  $J_2 = 0$ , b)  $J_2 = 0, 1J_1$ , c)  $J_2 = 0, 2J_1$ , d)  $J_2 = 0, 3J_1$ .

região de energia menor. É importante mencionar que estamos usando uma configuração “armchair”. Quando aumentamos o número de linha atômicas para 11 linhas percebemos um espectro completamente diferente daquele com  $N = 10$ . A Figura 47 mostra esse comportamento. A primeira diferença no espectro, além do número de modos, é presença de um modo sem dispersão. Quando aumentamos a intensidade da interação de segundos vizinhos todo o espectro cresce em energia e eventualmente começamos a ter modos não-cruzantes (anti-crossing); ademais constatamos que o modo não dispersante fica levemente alterado quando  $J_2 = 0, 3J_1$ .

A Figura 48 mostra o comportamento dos modos contra a constante de troca de segundos vizinhos  $J_2$ . Até  $J_2/J_1 = 0.3$  podemos ver que o modo mais energético segue inalterado como se não dependesse de  $J_2$ . Os outros modos crescem linearmente mas cada um com um coeficiente diferente, de modo que isso acontece tanto para uma fita com 10 como para uma fita com 11 linhas atômicas. Quando tratamos as energias para  $q_x = 2\pi/3a$ , temos modos degenerados que apresentam comportamentos específicos com respeito ao número de linhas atômicas.

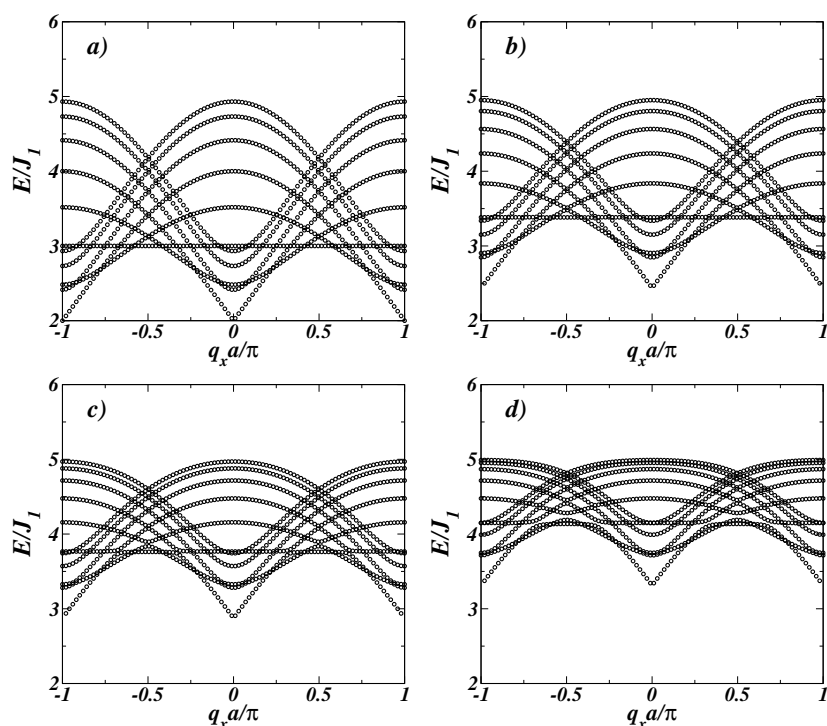


Figura 47: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da de segundos vizinhos para uma fita com  $N = 11$  linhas atômicas: a)  $J_2 = 0$ , b)  $J_2 = 0, 1J_1$ , c)  $J_2 = 0, 2J_1$ , d)  $J_2 = 0, 3J_1$ .

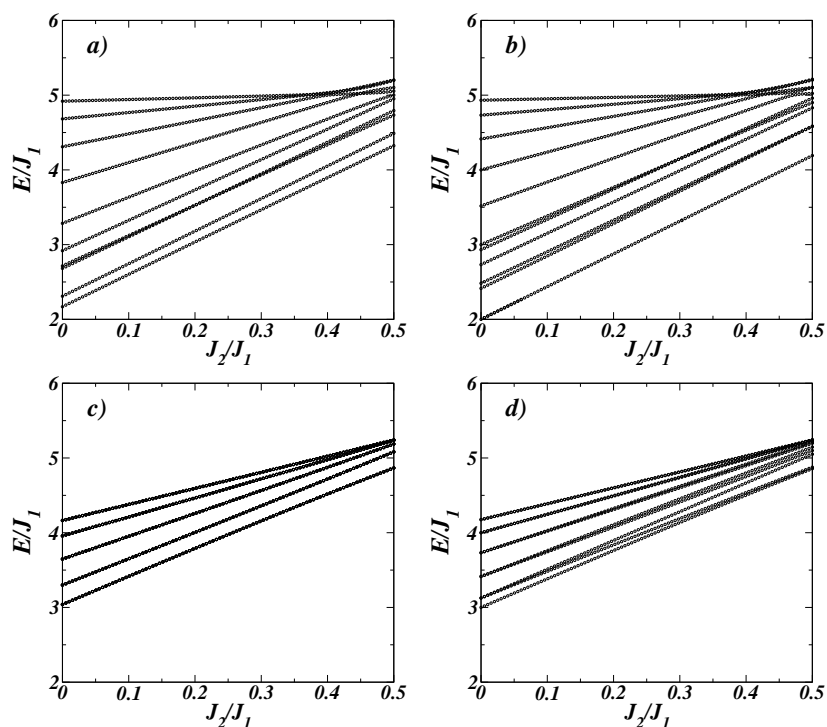


Figura 48: A relação de dispersão de ondas de spin variando a intensidade da interação de troca de segundos vizinhos: a)  $N = 10$  e  $q_x = 0$ , b)  $N = 11$  e  $q_x = 0$ , c)  $N = 10$  e  $q_x = 2\pi/3a$ , d)  $N = 11$  e  $q_x = 2\pi/3a$ .

## 4.9 Rede favo de mel finita com interação dipolar

O último modelo em nossas análises se trata de uma rede favo de mel finita com a presença das interações de longo alcance, de modo que as somas dipolares se encontram no Apêndice F. Começamos o estudo com o Hamiltoniano que segue:

$$\begin{aligned}
H = \sum_{qnn'} & \left[ A_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger a_{qn'} + B_{nn'}^*(q) a_{qn} a_{-qn'} + B_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger a_{-qn'}^\dagger + \right. \\
& + C_{nn'}(q) b_{qn}^\dagger b_{qn'} + D_{nn'}^*(q) b_{qn} b_{-qn'} + D_{nn'}(q) b_{qn}^\dagger b_{-qn'}^\dagger + \\
& \left. + E_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger b_{qn'} + F_{nn'}(q) a_{qn} b_{qn'}^\dagger + G_{nn'}(q) a_{qn}^\dagger b_{-qn'}^\dagger + L_{nn'}(q) a_{qn} b_{-qn'} \right].
\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
A_{nn'}(q) = S & \left[ \left( \frac{3}{2} J_1 + 6J_2 + \bar{H}_0 - \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_{nn''} \left( 2D_{nn''}^{zz(a)}(0) + D_{nn''}^{zz(ab)}(0) \right) \right) \delta_{nn'} - \right. \\
& \left. - J_2(q) - \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{nn'}^{zz(a)}(q) \right], \\
B_{nn'}(q) = \frac{S}{4} & \mathcal{D}_{nn'}^{(a)}(q), \tag{4.106}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{nn'}(q) = S & \left[ \left( \frac{3}{2} J_1 + 6J_2 + \bar{H}_0 - \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_{nn''} \left( 2D_{nn''}^{zz(b)}(0) + D_{nn''}^{zz(ba)}(0) \right) \right) \delta_{nn'} - \right. \\
& \left. - J_2(q) - \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{nn'}^{zz(b)}(q) \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{nn'}(q) &= \frac{S}{4} \mathcal{D}_{nn'}^{(b)}(q), \\
E_{nn'}(q) &= -\frac{S}{2} \left( J_1(q) + \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{nn'}^{zz(ab)}(q) \right), \\
F_{nn'}(q) &= -\frac{S}{2} \left( J_1(q) + \frac{(g\mu_B)^2}{2} D_{nn'}^{zz(ba)}(q) \right), \\
G_{nn'}(q) &= \frac{S}{4} (g\mu_B)^2 \mathcal{D}_{nn'}^{(ab)}(q), \\
L_{nn'}(q) &= \frac{S}{4} (g\mu_B)^2 \mathcal{D}_{nn'}^{(ba)}(q).
\end{aligned}$$

Mais uma vez resolvendo a equação do movimento temos

$$\begin{aligned}
\omega a_{qn} &= \sum_{q',n',n''} \left[ A_{n'n''}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{q'n''}] + B_{n'n''}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger a_{-q'n''}^\dagger] + \right. \\
&\quad \left. + E_{nn'}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger b_{q'n''}] + G_{nn'}(q') [a_{qn}, a_{q'n'}^\dagger b_{-q'n''}^\dagger] \right] \\
\omega a_{qn} &= \sum_{q'n'n''} \left\{ A_{n'n''}(q') a_{q'n'} \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} + B_{n'n''}(q') [\delta_{q,q'} \delta_{n,n'} a_{-q'n''}^\dagger + \delta_{q,-q'} \delta_{n,n'} a_{q'n'}^\dagger] + \right. \\
&\quad \left. + E_{n'n''}(q') b_{q'n''} \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} + G_{n'n''}(q') b_{-q'n''}^\dagger \delta_{q,q'} \delta_{n,n'} \right\} \\
\omega a_{qn} &= \sum_{n'} \left\{ A_{nn'}(q) a_{qn'} + (B_{nn'}(q) + B_{n'n}(-q)) a_{-qn'}^\dagger + E_{nn'}(q) b_{qn''} + G_{nn''}(q) b_{-qn''}^\dagger \right\} \\
\omega a_{-qn}^\dagger &= \sum_{n'} \left\{ -A_{n'n}(-q) a_{-qn'}^\dagger - (B_{nn'}^*(-q) + B_{n'n}^*(q)) a_{qn'} - F_{nn'}(-q) b_{-qn'}^\dagger - L_{nn'}(-q) b_{qn'} \right\} \\
\omega b_{qn} &= \sum_{n'} \left\{ C_{nn'}(q) b_{qn'} + (D_{nn'}(q) + D_{n'n}(-q)) b_{-qn'}^\dagger + F_{n'n}(q) a_{qn'} + G_{n'n}(-q) a_{-qn'}^\dagger \right\} \\
\omega b_{-qn}^\dagger &= \sum_{n'} \left\{ -C_{n'n}(-q) b_{-qn'}^\dagger - (D_{nn'}^*(-q) + D_{n'n}^*(q)) b_{qn'} - E_{n'n}(-q) a_{-qn'}^\dagger - L_{n'n}(q) a_{qn'} \right\}.
\end{aligned}$$

Na forma matricial

$$\omega \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \\ b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(q) & B'(q) & E(q) & G(q) \\ -B'^T(q) & -A^T(q) & -L(-q) & -F(-q) \\ F^T(q) & G^T(-q) & C(q) & D'(q) \\ -L^T(q) & -E^T(-q) & -D'^T(-q) & -C^T(-q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \\ b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.107)$$

A relação de dispersão é mostrada na Figura 49. A figura mostra um comportamento bem diferente daquele quando variamos  $J_2$ . Para a região central da zona de Brillouin podemos ver um acréscimo mais significativo na energia, que é muito aparente à medida que aumentamos o valor de  $M$ ; sendo esse comportamento independente do número de linhas atômicas. Porém, é interessante notar que com o aumento da intensidade da interação dipolar o modo que não tem dispersão para  $M_S = 0$  agora varia. Isso não foi observado para o caso anterior quando variamos  $J_2$ . A Figura 50 mostra esse comportamento.

O mais interessante do efeito da interação dipolar é ela levanta totalmente a degenerescências dos modos para  $q_x = 2\pi/3a$  para as duas larguras da fita ferromagnética considerada. Outra diferença significativa é que agora nem todos os modos crescem com a perturbação introduzida. Como podemos ver através da Figura 51 alguns modos decrescem enquanto outros crescem com  $M_S$ .

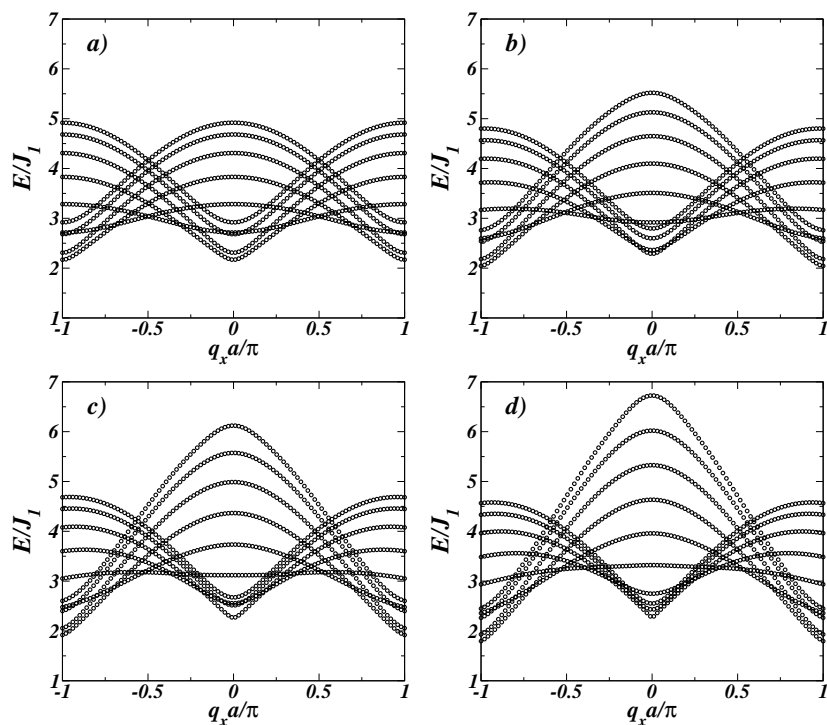


Figura 49: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a)  $M_S = 0$ , b)  $M_S = 1$ , c)  $M_S = 2$ , d)  $M_S = 3$ .

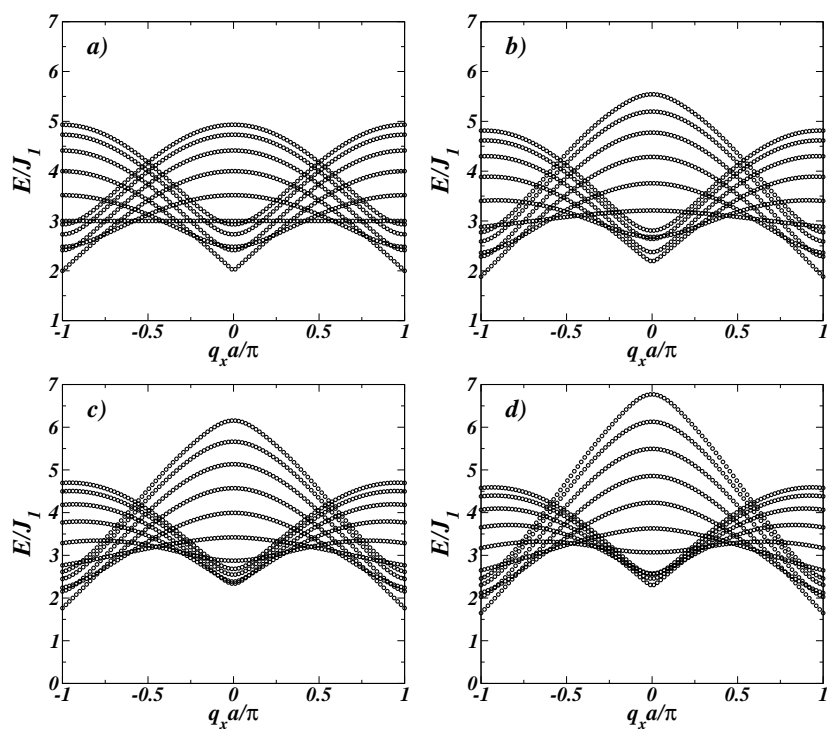


Figura 50: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a)  $M_S = 0$ , b)  $M_S = 1$ , c)  $M_S = 2$ , d)  $M_S = 3$ .

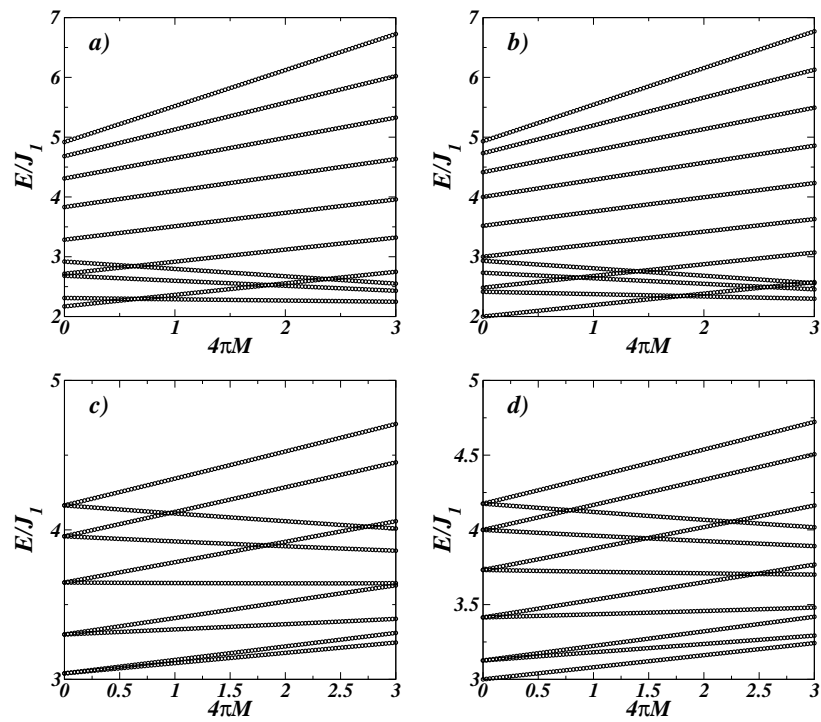


Figura 51: A relação de dispersão de ondas de spin para quatro diferentes valores da intensidade da interação dipolar: a)  $N = 10$  e  $q_x = 0$ , b)  $N = 11$  e  $q_x = 0$ , c)  $N = 10$  e  $q_x = 2\pi/3a$ , d)  $N = 11$  e  $q_x = 2\pi/3a$ .

## 5 *Conclusões e Perspectivas.*

Neste trabalho estudamos as propriedades da propagação das ondas de spin em um sistema ferromagnético bidimensional com geometrias quadrada e hexagonal (configuração armchair) tanto para redes infinitas quanto para um número limitado de linhas atômicas na direção  $0y$ . A pesquisa tomou como ponto de partida a presença das interações de troca, Zeeman e anisotrópica no foco da obtenção da relação de dispersão dos modos de energia, onde enfatizamos as contribuições de troca dos segundos vizinhos afim de perceber seus efeitos sobre o espectro dos modelos. Posteriormente à obtenção das curvas de nível energéticas, foram inseridas as interações dipolares no intuito de compreendermos as alterações inerentes à sua natureza. As consequências de sua presença ficam notórias através dos gráficos ao longo do trabalho, que evidenciaram a dependência da energia com alguns parâmetros de relevância, tal como o próprio parâmetro da interação dipolar  $M$ , e observância da densidade de estados para alguns modelos.

O trabalho consta de uma revisão acerca de pontos importantes na compreensão dos objetivos a serem atingidos aqui, sendo que os resultados de relevância se encontram no capítulo 4, o qual se inicia com o modelo da rede quadrada infinita sem interação dipolar. Aqui levamos em consideração apenas as interações Zeeman, anisotrópica e troca dos primeiros vizinhos. Observamos dois tipos de comportamento, a saber, um esférico das curvas espectrais a pequenos vetores de onda, vide Figura 12, de onde se revela um crescimento uniforme da energia em qualquer direção de propagação das ondas de spin dentro da zona de Brillouin, e outro a grandes vetores de onda revelando uma dependência explícita da energia com a direção escolhida dentro da zona.

A partir da inserção dos segundos vizinhos ( $J_2$ ), percebe-se uma gradual modificação no espectro, o que se torna mais aparente para excitações a grandes vetores de onda. Este comportamento é bem visível quando fixamos o vetor de onda em uma direção, por exemplo  $0y$ . O painel da esquerda na Figura 16 mostra que para  $q_y = 0$  existe um gradativo crescimento da energia (variações de cores do azul para o vermelho) com o aumento de  $J_2$  nos pontos em que  $q_x = \pm \frac{\pi}{a}$ , mantendo a energia praticamente inalterada

em outras regiões. Já para valor de  $q_y = \pi a$ , painel direito da mesma figura, vê-se um comportamento contrário ao que fora dito. A Figura 17 corrobora aos resultados descritos, pois vemos que nos pontos  $\Gamma$  e  $M$  o  $J_2$  não influencia a energia do sistema, fato que não ocorre em outras regiões na zona. Na finalidade de completar as análises, plotamos o gráfico da densidade de estados para o sistema com e sem as interações dos segundos vizinhos afim de explicitar seus efeitos, e o que fica bem claro é um deslocamento da densidade a níveis mais altos de energia, fato esse que influencia propriedades físicas macroscópicas como magnetização, suscetibilidade, calor específico, etc.

Ainda no contexto da rede quadrada infinita, estudos sobre a perspectiva da presença das interações de longo alcance foram realizados. Um enfoque de interesse aqui é a orientação do campo aplicado, fato este que nos conduz a estudarmos a propagação da ondas em planos paralelos e perpendiculares ao campo. Começando com o plano  $xy$ , a Figura 20 mostra as curvas de nível da energias versus os vetores de onda indicando que mesmo os modos de energias mais baixas sofrem alteração. Percebe-se também que a dispersão se modifica ao longo de diferentes caminhos na zona, pois os contornos das curvas são afetados.

A Figura 21, no painel à direita, mostra a direta dependência da energia com a magnetização para  $q_y = 0$ . Aqui fica claro que nos pontos para  $q_x = \pm 2na\pi$  a interação dipolar tem seus principais efeitos, ao mesmo tempo que para  $q_y = \frac{\pi}{a}$ , painel esquerdo, as energias variam muito pouco com  $M$ . Persistindo no estudo, a Figura 22 no seu painel esquerdo revela que a abrangência das interações dipolares são mais significantes que as de troca dos segundos vizinhos principalmente na região magnetostática; ademais observamos que a energia possui máximos no ponto  $\Gamma$  com uma variação não linear no trânsito dentro da zona, fato este, escopo do painel direito da mesma figura.

Pelos gráficos referentes ao estudo no plano  $xz$  fica evidente a dependência com a direção do campo aplicado, pois as influências na energia do sistema se apresentam de forma diferenciada aos vistos anteriormente, um exemplo disso é o comportamento tipo coalecência observado na Figura 24, não existente na orientação paralela. No intuito de ressaltarmos essas diferenças, plotou-se os gráficos apresentados na Figura 25, mostrando uma nítida alteração nesta dependência, principalmente para  $q_x = \pi a$ . Ainda neste foco entendemos das Figuras 26 e 27 que as interações dipolares são mais fortes nos pontos  $X$  e  $M$ , além de que sua variação ao longo da zona não permanece a mesma; ademais a densidade de estados é fortemente modificada principalmente para valores altos de  $M$ .

Na seção 4.4 realizamos um estudo similar para uma rede ferromagnética bidimensional

com número de sítios limitado na direção  $0y$ . Todos os resultados levaram em consideração  $\frac{S\bar{h}_0}{J_1} = 1$  e a ausência das interações dipolares. Aqui entendemos que os segundos vizinhos revelam modificações interessantes nos modos tendo em vista que os mais energéticos permanecem inalterados na região magnetostática; em contrapartida os mais energéticos sofrem um apreciável crescimento. Ademais na região de troca, grandes vetores de onda, o que vemos corresponde exatamente o comportamento contrário, ou seja, os modos mais energéticos não se abalam pela interação promovida por  $J_2$ , mas os modos com energias mais baixas são significativamente acrescidos por esta interação conduzindo a uma espécie de esmagamento dos modos, vide Figura 29. Numa tentativa de melhor expor a relação  $EXJ_2$ , a Figura 30 revela uma dependência essencialmente linear da energia com  $J_2$ , sendo aparente a presença de um cruzamento entre os modos para valor de  $q_x = \pi a$  em torno de  $J_2 = 0,5J_1$ .

A seção subsequente inserimos as interações dipolares e mais uma vez fazemos referência às orientações do campo magnético em relação à rede, e iniciamos com o plano  $xy$ . Para os resultados aqui obtidos adotamos  $J_2 = 0,2$  e  $\bar{h}_0 = 1$ . Pela Figura 31 vemos a presença de 10 modos frutos da existência de 10 linhas atômicas na direção  $0y$ . Aqui os modos de mais baixa energia são deslocados verticalmente na região a pequenos vetores de onda, diferentemente do apresentado na Figura 29, deixando explícito o governo das interações dipolares na região magnetostática. Além disso, ressaltamos da Figura 32 que a dependência da energia com a magnetização se apresenta de forma diferente à relação da energia com  $J_2$ , vide Figura 30. Aqui a linearidade é perdida ficando bem evidente no gráfico 33, onde fitamos a curva. Em relação à orientação perpendicular, o principal resultado se revela pela Figura 35 onde fica claro a linearidade não observada no plano  $xy$ , além de que a inclinação dos modos indica uma diminuição da energia com o aumento de  $M$ . Uma comparação das curvas fitadas está presente na Figura 36.

Começamos os estudos referentes das redes hexagonais na seção 4.6, partindo de uma rede infinita sem interações dipolares. O que salta aos olhos na Figura 38 é que a pequenos vetores de onda os modos de energia apresentam uma esfericidade que tende a se preservar com o aumento de  $J_2$ , começando a ser perturbado a partir do valor  $J_2 = 0,3J_1$ . Outra questão importante aqui é exatamente o forte aumento da energia frente ao crescimento de  $J_2$ , que é ratificado pela tonalidade vermelha que toda a zona de Brillouin tende a assumir. Verifica-se também a suspeita de não linearidade da dependência com os segundos vizinhos, pois os contornos perdem gradativamente suas geometria hexagonal.

Nos mantendo nesse enfoque observamos a energia em diferentes regiões na zona e

constatamos sua perda de linearidade à medida que aumentamos  $J_2$ . Como era de esperar a densidade de estados do sistema também será abruptamente modificada pela interação troca dos segundos vizinhos, o que é visto na Figura 41. Aqui concluimos a perda de linearidade em torno do ponto  $K$  na zona e o deslocamento da curva para regiões de maior energia com o aumento de  $J_2$ , além de uma perceptível mudança na forma da curva DOS.

No que se segue, trouxemos atenção às interações dipolares e após longo cálculos fomos levados a perceber na Figura 42 que os modos de menor energia apresentam um crescimento mais rápido que os de maior energia, além de efeitos tipo coalescência observados no painel (d) da figura. Porém um ponto de relevância aqui é a falta da reciprocidade dos modos na direção  $q_x$ , tendo em vista a configuração armchair, a qual influência na quebra de simetria nessa direção e na presença de modos conhecidos como Damon-Eshback. No contexto da Figura 45 visualizamos a curva DOS que, como observado nos casos da rede quadrada, apresentam picos que se deslocam para direita acompanhando o aumento da energia.

Outro modelo de interesse foi a rede favo de mel finita na direção  $0y$ , o qual analisamos no afã de entendermos os efeitos da interação de troca dos segundos vizinhos mediante condições de contorno no sistema. Para tanto exploramos sistemas com 10 e 11 linhas atômicas, cujos resultados são mostrados nas Figuras 46 e 47, respectivamente. Para 10 modos vê-se o deslocamento dos modos de menor energia promovendo uma espécie de achatamento dos mesmos em um  $\Delta E$  menor; já para 11 linha atômicas, apesar de vermos o efeito de achatamento, somos levados a perceber a existência de um modo não dispersivo, o qual apresenta leves efeitos para  $J_2$  assumindo 30% de  $J_1$ . Outro ponto importante reside no fato da tendência do surgimento de modos não cruzantes (anti-crossing) com o aumento de  $J_2$ . Na sequência plotamos a relação entre a energia e os segundos vizinhos de forma direta, no intuito de expor seus efeitos. Nos painéis (a e b) constatamos que os modos mais fortemente alterados são os de maior energia, de forma que os menos energéticos permanecem quase inertes a presença de  $J_2$ . Nos painéis (c e d), onde a interação de troca dos segundos vizinhos foi acrescida, fica bem evidente a degenerescência dos modos expandindo seu comportamento linear na dependência aos modos mais energéticos.

Por fim, nosso último modelo trata de um rede ferromagnética bidimensional com geometria hexagonal como número de linhas atômicas limitada na direção  $0y$  na presença das interações dipolares. Os principais resultados são foco de exposição das Figuras 49 e 50, as quais revelam um intenso crescimento dos modos na região da zona de Brillouin

mediante o crescimento de  $M$ , independente da paridade de linhas atômicas presentes. Apesar de que na Figura 50 expor resultados para um número ímpar de linhas atômicas, diferentemente do que foi observado em sua ausência as interações dipolares não permitem a existência de modos não dispersivos mesmo para pequenos valores de  $M$ . Um dos principais resultados aqui obtidos se análogo anterior se reporta à Figura 51, onde percebemos que o padrão de variabilidade dos modos é alterado independente do número de linhas atômicas, fato este mais evidente nos painéis (c e d) da mesma figura.

Portanto pudemos observar com este trabalho os efeitos das interações de troca dos segundos vizinhos e dipolar, em diferentes estruturas de um ferromagneto bidimensional e concluimos que apesar de menos intensas em relação às interações de troca dos primeiros vizinhos, esses tipos de interações se tornam relevantes na tentativa de descrevermos um sistema magnético mais realístico. Como uma das perspectivas deste trabalho podemos citar o estudo mais detalhado de um sistema não magnético tal como o grafeno, no intuito de se tentar descobrir os equivalente às interações dipolares em tais sistemas, tendo em vista a similaridade das relações de dispersão das redes favo de mel com a estrutura de bandas do grafeno.

**APÊNDICE A - Cálculo dos Termos  
Dipolares da Rede Quadrada  
Infinita no Plano  $Oxy$ .**

É de nosso interesse agora mostrar a dedução da soma de dipolos e os termos dipolares referentes ao modelo da rede quadrada infinita quando o sistema magnético está lotado no plano  $Oxy$ . Começamos pela definição do operador soma como segue:

$$S(q_x, q_y, y) = \sum_{xy} \frac{\exp [i(q_x x + q_y y)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $y = 0$  simultaneamente. Podemos reescrever  $S$  usando

$$\frac{1}{\alpha^{5/2}} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt \quad (\text{A.1})$$

$$S(q_x, q_y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_{xy} \exp [i(q_x x + q_y y)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt.$$

ou

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty t^{3/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt,$$

e usando

$$\sum_\nu e^{-\nu^2 t} e^{iq_\nu \nu} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \sum_{l=-\infty}^\infty \exp \left[ -\frac{1}{t} (\pi l + q_\nu/2)^2 \right], \quad (\text{A.2})$$

e

$$\int_0^\infty t e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t} (\pi l + q_x/2)^2} dt = \frac{2}{y^2} (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y| |\pi l + q_x/2|),$$

teremos

$$S(q_x, q_y) = \frac{16}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{y=1}^{\infty} \frac{\cos(q_y y)}{y^2} (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y||\pi l + q_x/2|)$$

$$D^{xx}(q) = 3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2}$$

$$D^{yy}(q) = 3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_y^2}$$

$$D^{xy}(q) = 3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x \partial q_y}.$$

Definindo

$$f(q_x) = (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y||\pi l + q_x/2|)$$

$$f'(q_x) = -y(\pi l + q_x/2)|\pi l + q_x/2| K_1(2|y||\pi l + q_x/2|)$$

$$f''(q_x) = y^2(\pi l + q_x/2)^2 K_0(2|y||\pi l + q_x/2|) - \frac{y}{2}|\pi l + q_x/2| K_1(2|y||\pi l + q_x/2|),$$

encontramos

$$D^{xx}(q) = 16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{y=1}^{\infty} \frac{\cos(q_y y)}{y^2} f''(q_x)$$

$$D^{yy}(q) = -16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{y=1}^{\infty} \cos(q_y y) f(q_x)$$

$$D^{xy}(q) = -16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{y=1}^{\infty} \frac{\sin(q_y y)}{y} f'(q_x).$$

Para  $D^{zz}$  temos que

$$\frac{1}{\alpha^{3/2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} t^{1/2} e^{-\alpha t} dt \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned}
 D^{zz}(q) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty t^{1/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt \\
 D^{zz}(q) &= 2 \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t}(\pi l + q_x/2)^2} dt \\
 D^{zz}(q) &= 4 \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_y \frac{\exp(iq_y y)}{y} |(\pi l + q_x/2)| K_1(2y|(\pi l + q_x/2)|) \\
 D^{zz}(q) &= 8 \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_y \frac{\cos(q_y y)}{y} |(\pi l + q_x/2)| K_1(2y|(\pi l + q_x/2)|) \\
 D^{zz}(0) &= 8 \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_y \frac{|\pi l|}{y} K_1(2y|\pi l|)
 \end{aligned}$$

Quando  $y = 0$  temos

$$\begin{aligned}
 S &= 2 \sum_{x=1} \frac{\cos(q_x x)}{x^5} \\
 D^{xx}(q) &= -6 \sum_{x=1} \frac{\cos(q_x x)}{x^3} \\
 D^{yy}(q) &= 0 \\
 D^{xy}(q) &= 0 \\
 D^{zz}(q) &= 2 \sum_{x=1} \frac{\cos(q_x x)}{x^3} \\
 D^{zz}(0) &= 2 \sum_{x=1} \frac{1}{x^3} = \zeta(3) = 2.4
 \end{aligned}$$

## *APÊNDICE B - Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Infinita no Plano $Oxz$ .*

Vamos aqui demonstrar o cálculo da soma de dipolos e os termos dipolares referentes ao modelo da rede quadrada infinita quando o sistema magnético está lotado no plano  $Oxz$ . Começamos pela definição do operador soma como segue:

Agora definindo

$$S(q_x, q_z, x) = \sum_{xz} \frac{\exp [i(q_x x + q_z z)]}{(x^2 + z^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $z = 0$  simultaneamente. Podemos reescrever  $S$  usando

$$\frac{1}{\alpha^{5/2}} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt \quad (\text{B.1})$$

$$S(q_x, q_z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_{xz} \exp [i(q_x x + q_z z)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt.$$

ou

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_x \exp(iq_x x) \int_0^\infty t^{3/2} e^{-x^2 t} \left[ \sum_z e^{-z^2 t} e^{iq_z z} \right] dt,$$

e usando

$$\sum_\nu e^{-\nu^2 t} e^{iq_\nu \nu} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \sum_{l=-\infty}^\infty \exp \left[ -\frac{1}{t} (\pi l + q_\nu/2)^2 \right],$$

e

$$\int_0^\infty t e^{-x^2 t} e^{-\frac{1}{t} (\pi l + q_z/2)^2} dt = \frac{2}{x^2} (\pi l + q_z/2)^2 K_2(2|x| |\pi l + q_z/2|),$$

teremos

$$S(q_x, q_z) = \frac{16}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(q_x x)}{x^2} (\pi l + q_z/2)^2 K_2(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$D^{xx}(q) = 3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2}$$

$$D^{zz}(q) = -\frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2} + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial q_z^2}.$$

Definindo

$$f(q_z) = (\pi l + q_z/2)^2 K_2(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$f'(q_z) = -x(\pi l + q_z/2)^2 K_1(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$f''(q_z) = \frac{x}{2} |\pi l + q_z/2| [2x(\pi l + q_z/2) K_0(2|x||\pi l + q_z/2|) - K_1(2|x||\pi l + q_z/2|)],$$

teremos

$$D^{xx}(q) = -16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{x=1}^{\infty} \cos(q_x x) f(q_x)$$

$$D^{zz}(q) = \frac{16}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(q_x x)}{x^2} [x^2 f(q_z) + 2f''(q_z)]$$

$$D^{zz}(q) = -16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{x=1}^{\infty} \cos(q_x x) (\pi l + q_z/2)^2 K_0(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$D^{zz}(0) = -16 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{x=1}^{\infty} (\pi l)^2 K_0(2|x||\pi l|).$$

Quando  $x = 0$  temos

$$S = 2 \sum_{z=1}^{\infty} \frac{\cos(q_z z)}{z^5}$$

$$D^{zz}(q) = -4 \sum_{z=1}^{\infty} \frac{\cos(q_z z)}{z^3}$$

$$D^{zz}(0) = -4\zeta(3) = -4.808$$

## *APÊNDICE C - Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Quadrada Finita no Plano $Oxy$ .*

Para o caso finito  $S$  é definido como

$$S(q_x, y) = \sum_x \frac{\exp [i(q_x x)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $y = 0$  simultaneamente. O denominador da equação acima é mais uma vez reescrito, resultando em

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_x \exp [i(q_x x)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt$$

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{3/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt,$$

e usando

$$\sum_\nu e^{-\nu^2 t} e^{iq_\nu \nu} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{1}{t} (\pi l + q_\nu/2)^2 \right], \quad (\text{C.1})$$

temos

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty t e^{-y^2 t - \frac{1}{t} (\pi l + q_x/2)^2} dt,$$

$$S(q_x, y) = \frac{8}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{(\pi l + q_x/2)^2}{y^2} K_2 (2|y| |\pi l + q_x/2|).$$

Os termos dipolares podem ser agora escritos como

$$\begin{aligned} D_{nn'}^{xx}(q) &= 3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2} \\ D_{nn'}^{yy}(q) &= -3y^2 S \\ D_{nn'}^{xy}(q) &= 3iy \frac{\partial S}{\partial q_x}, \end{aligned}$$

onde  $y = n - n'$ . As expressões acima podem ser rescritas como

$$\begin{aligned} D_{nn'}^{xx}(q) &= 8 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[ (\pi l + q_x/2)^2 K_0(2|y||\pi l + q_x/2|) - \frac{|\pi l + q_x/2|}{2y} K_1(2|y||\pi l + q_x/2|) \right] \\ D_{nn'}^{yy}(q) &= -8 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y||\pi l + q_x/2|) \\ D_{nn'}^{xy}(q) &= -8i \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\pi l + q_x/2| (\pi l + q_x/2) K_1(2|y||\pi l + q_x/2|). \end{aligned}$$

Para  $D_{nn'}^{zz}(q)$

$$S(q_x, y) = \sum_x \frac{\exp[i(q_x x)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}},$$

devemos usar a equação (C.2)

$$\frac{1}{\alpha^{3/2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} t^{1/2} e^{-\alpha t} dt, \quad (\text{C.2})$$

para obtermos

$$\begin{aligned} D_{nn'}^{zz}(q) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} t^{1/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt \\ D_{nn'}^{zz}(q) &= 2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t}(\pi l + q_x/2)^2} dt \\ D_{nn'}^{zz}(q) &= 8 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{|\pi l + q_x/2|}{y} K_1(2y|(\pi l + q_x/2)|) \end{aligned}$$

Para  $y = 0$  ou  $n = n'$  temos

$$\begin{aligned}
S &= 2 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(q_x x)}{x^5} \\
D_{nn}^{xx}(q) &= -6 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(q_x x)}{x^3} \\
D_{nn}^{yy}(q) &= 0 \\
D_{nn}^{xy}(q) &= 0 \\
D_{nn}^{zz}(q) &= 2 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(q_x x)}{x^3} \\
D_{nn}^{zz}(0) &= 2 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{1}{x^3} = \zeta(3) = 2.4.
\end{aligned}$$

No nosso caso  $A = A^T$  e  $B^T = B = \bar{B}$ . E a matriz se torna

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix}, \tag{C.3}$$

***APÊNDICE D - Cálculo dos Termos  
Dipolares da Rede Quadrada  
Finita no Plano  $Oxz$ .***

Para o caso finito  $S$  é definido como

$$S(q_z, x) = \sum_z \frac{\exp [i(q_z z)]}{(x^2 + z^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $z = 0$  simultaneamente. O denominador da equação acima é mais uma vez reescrito, resultando em

$$S(q_z, x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_z \exp [i(q_z z)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt$$

$$S(q_z, x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{3/2} e^{-x^2 t} \left[ \sum_z e^{-z^2 t} e^{iq_z z} \right] dt,$$

o qual se torna

$$S(q_z, x) = \frac{4}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty t e^{-x^2 t - \frac{1}{t}(\pi l + q_z/2)^2} dt.$$

Resolvendo a integral temos

$$S(q_z, x) = \frac{8}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{(\pi l + q_z/2)^2}{x^2} K_2(2|x||\pi l + q_z/2|).$$

Os termos dipolares podem ser agora escritos

$$D_{nn'}^{xx}(q) = -3x^2 S$$

$$D_{nn'}^{zz}(q) = x^2 S + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial q_z^2},$$

onde  $x = n - n'$ . E as expressões acima concedem

$$D_{nn'}^{xx}(q) = -8 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\pi l + q_z/2)^2 K_2(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$D_{nn'}^{zz}(q) = \frac{8}{3} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left( f + \frac{2}{x^2} f'' \right).$$

onde fizemos uso das identidades a seguir:

$$f(q_z) = (\pi l + q_z/2)^2 K_2(2|x||\pi l + q_z/2|)$$

$$f''(q_z) = x^2 (\pi l + q_z/2)^2 K_0(2|x||\pi l + q_z/2|) - \frac{x}{2} |\pi l + q_z/2| K_1(2|x||\pi l + q_z/2|).$$

Quando  $x = 0$  temos

$$S = 2 \sum_{z=1}^{\infty} \frac{\cos(q_z z)}{z^5}$$

$$D_{nn}^{zz}(q) = -4 \sum_{z=1}^{\infty} \frac{\cos(q_z z)}{z^3}$$

$$D_{nn}^{zz}(0) = -4\zeta(3) = -4.808$$

No nosso caso  $A = A^T$  e  $B^T = B = B^*$ . E a matriz se torna

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix}, \tag{D.1}$$

## *APÊNDICE E - Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Hexagonal Infinita no Plano $Oxy$ .*

Agora vamos calcular a soma de dipolos.

$$S(q_x, q_y, y) = \sum_{xy} \frac{\exp [i(q_x x + q_y y)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $y = 0$  simultaneamente. Podemos reescrever  $S$  usando

$$\frac{1}{\alpha^{5/2}} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt \quad (\text{E.1})$$

$$S(q_x, q_y, y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_{xy} \exp [i(q_x x + q_y y)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt.$$

ou

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty t^{3/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt,$$

e usando

$$\sum_\nu e^{-\nu^2 t} e^{iq_\nu \nu} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{1}{t} (\pi l + q_\nu/2)^2 \right],$$

com

$$\int_0^\infty t e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t} (\pi l + q_x/2)^2} dt = \frac{2}{y^2} (\pi l + q_x/2)^2 K_2 (2|y| |\pi l + q_x/2|),$$

teremos

$$S(q_x, q_y, y) = \frac{8}{3} \sum_l \sum_y \frac{\exp(iq_y y)}{y^2} (\pi l + q_x/2)^2 K_2 (2|y| |\pi l + q_x/2|).$$

Como a rede favo de mel não é uma rede de Bravais teremos duas somas para os pares  $y$  e  $l$ .

Termo  $ab$ : uma soma fica com  $y \rightarrow \sqrt{3}/2(2m - 1)$  e  $l \rightarrow 3n - 1/2$  para  $l > 0$  e  $5/2 - 3n$  para  $l < 0$ . E outra soma com  $y \rightarrow \sqrt{3}m$  e  $l \rightarrow 3n - 2$  para  $l > 0$  e  $5 - 3n$  para  $l < 0$ .

Para o termo  $ba$ : uma soma fica com  $y \rightarrow \sqrt{3}/2(2m - 1)$  e  $l \rightarrow 3n - 5/2$  para  $l > 0$  e  $1/2 - 3n$  para  $l < 0$ . E outra soma com  $y \rightarrow \sqrt{3}m$  e  $l \rightarrow 3n - 1$  para  $l > 0$  e  $2 - 3n$  para  $l < 0$ .

Os termos  $a$  e  $b$  possuem o mesmo comportamento: uma soma fica com  $y \rightarrow \sqrt{3}/2(2m - 1)$  e  $l \rightarrow \pm 3(n - 1/2)$  e outra soma onde  $y \rightarrow \sqrt{3}(2m - 1)$  e  $l \rightarrow \pm 3n$

Os termos dipolares ficam

$$\begin{aligned} D^{xx}(q) &= -3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2} \\ D^{yy}(q) &= -3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_y^2} \\ D^{xy}(q) &= -3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x \partial q_y}. \end{aligned}$$

Definindo

$$\begin{aligned} f(q_x) &= (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y||\pi l + q_x/2|) \\ f'(q_x) &= -y(\pi l + q_x/2)|\pi l + q_x/2| K_1(2|y||\pi l + q_x/2|) \\ f''(q_x) &= y^2(\pi l + q_x/2)^2 K_0(2|y||\pi l + q_x/2|) - \frac{y}{2}|\pi l + q_x/2| K_1(2|y||\pi l + q_x/2|), \end{aligned}$$

teremos

$$\begin{aligned} D^{xx}(q) &= -8 \sum_l \sum_y \frac{\exp(iq_y y)}{y^2} f''(q_x) \\ D^{yy}(q) &= 8 \sum_l \sum_y \exp(iq_y y) f(q_x) \\ D^{xy}(q) &= 8i \sum_l \sum_y \frac{\exp(iq_y y)}{y} f'(q_x). \end{aligned}$$

Para  $D^{zz}$  temos que

$$\frac{1}{\alpha^{3/2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty t^{1/2} e^{-\alpha t} dt \quad (\text{E.2})$$

$$D^{zz}(q) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty t^{1/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt$$

$$D^{zz}(q) = 2 \sum_l \sum_y \exp(iq_y y) \int_0^\infty e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t}(\pi l + q_x/2)^2} dt$$

$$D^{zz}(q) = 4 \sum_l \sum_y \frac{\exp(iq_y y)}{y} |(\pi l + q_x/2)| K_1(2y|(\pi l + q_x/2)|)$$

$$D^{zz}(0) = 8 \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_y \frac{|\pi l|}{y} K_1(2y|\pi l|)$$

Quando  $y = 0$  temos

$$S = \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^5}$$

$$D^{xx}(q) = 3 \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^3}$$

$$D^{yy}(q) = 0$$

$$D^{xy}(q) = 0$$

$$D^{zz}(q) = \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^3}$$

$$D^{zz}(0) = \sum_x \frac{1}{x^3}$$

Para  $a$  e  $b$

$$D^{zz}(0) = 2 \sum_n \frac{1}{(3n)^3}$$

$$D^{zz}(0) = 2 \frac{\zeta(3)}{27} = 0.09.$$

Para  $ab$

$$D^{zz}(0) = 2 \sum_n \frac{1}{(3n-2)^3}$$

$$D^{zz}(0) = \frac{2}{243} \left( 2\sqrt{3}\pi^3 + 117\zeta(3) \right) = 2.042$$

Para  $ba$

$$D^{zz}(0) = 2 \sum_n \frac{1}{(3n-1)^3}$$
$$D^{zz}(0) = \frac{2}{243} \left( -2\sqrt{3}\pi^3 + 117\zeta(3) \right) = 0.2736$$

## *APÊNDICE F - Cálculo dos Termos Dipolares da Rede Hexagonal Finita no Plano $Oxy$ .*

Para o caso finito  $S$  é definido como

$$S(q_x, y) = \sum_{xy} \frac{\exp [i(q_x x)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{5}{2}}},$$

onde o somatório não pode incluir  $x = 0$  e  $y = 0$  simultaneamente. O denominador da equação acima é mais uma vez reescrito resultando em

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_{xy} \exp [i(q_x x)] \int_0^\infty t^{3/2} e^{-\alpha t} dt$$

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_y \int_0^\infty t^{3/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt,$$

ou

$$S(q_x, y) = \frac{4}{3} \sum_l \sum_y \int_0^\infty t e^{-y^2 t - \frac{1}{t}(\pi l + q_x/2)^2} dt,$$

$$S(q_x, y) = \frac{8}{3} \sum_l \sum_y \frac{(\pi l + q_x/2)^2}{y^2} K_2(2|y||\pi l + q_x/2|).$$

Os termos dipolares podem ser agora escritos como

$$D_{nn'}^{xx}(q) = -3 \frac{\partial^2 S}{\partial q_x^2}$$

$$D_{nn'}^{yy}(q) = 3y^2 S$$

$$D_{nn'}^{xy}(q) = -3iy \frac{\partial S}{\partial q_x},$$

onde  $y = n - n'$ . As expressões acima podem ser rescritas como

$$D_{nn'}^{xx}(q) = -8 \sum_l \sum_y \left[ 2(\pi l + q_x/2)^2 K_0(2|y||\pi l + q_x/2|) - \frac{|\pi l + q_x/2|}{y} K_1(2|y||\pi l + q_x/2|) \right]$$

$$D_{nn'}^{yy}(q) = 8 \sum_l \sum_y (\pi l + q_x/2)^2 K_2(2|y||\pi l + q_x/2|)$$

$$D_{nn'}^{xy}(q) = 8i \sum_l \sum_y |\pi l + q_x/2| (\pi l + q_x/2) K_1(2|y||\pi l + q_x/2|).$$

Para  $D_{nn'}^{zz}(q)$

$$S(q_x, y) = \sum_{xy} \frac{\exp[i(q_x x)]}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}},$$

ou

$$D_{nn'}^{zz}(q) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_y \int_0^\infty t^{1/2} e^{-y^2 t} \left[ \sum_x e^{-x^2 t} e^{iq_x x} \right] dt$$

$$D_{nn'}^{zz}(q) = 2 \sum_l \sum_y \int_0^\infty e^{-y^2 t} e^{-\frac{1}{t}(\pi l + q_x/2)^2} dt$$

$$D_{nn'}^{zz}(q) = 4 \sum_l \sum_y \frac{|\pi l + q_x/2|}{y} K_1(2y|(\pi l + q_x/2)|)$$

$$D_{nn'}^{zz}(0) = 8 \sum_l \sum_y \frac{|\pi l|}{y} K_1(2y|\pi l|)$$

Para  $y = 0$  ou  $n = n'$  temos

$$S = \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^5}$$

$$D_{nn}^{xx}(q) = 3 \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^3}$$

$$D_{nn}^{yy}(q) = 0$$

$$D_{nn}^{xy}(q) = 0$$

$$D_{nn}^{zz}(q) = \sum_x \frac{\exp(iq_x x)}{x^3}$$

$$D_{nn}^{zz}(0) = \sum_x \frac{1}{x^3}$$

Para  $a$  e  $b$

$$D_{nn}^{zz}(0) = 2 \sum_{n=1} \frac{1}{(3n)^3}$$
$$D_{nn}^{zz}(0) = 2 \frac{\zeta(3)}{27} = 0.09.$$

Para  $ab$

$$D_{nn}^{zz}(0) = 2 \sum_{n=1} \frac{1}{(3n-2)^3}$$
$$D_{nn}^{zz}(0) = \frac{2}{243} \left( 2\sqrt{3}\pi^3 + 117\zeta(3) \right) = 2.042$$

Para  $ba$

$$D_{nn}^{zz}(0) = 2 \sum_{n=1} \frac{1}{(3n-1)^3}$$
$$D_{nn}^{zz}(0) = \frac{2}{243} \left( -2\sqrt{3}\pi^3 + 117\zeta(3) \right) = 0.2736$$

## *Referências*

- 1 COMPTON, A. H. A quantum theory of the scattering of x-rays by light elements. *Physical Review*, v. 21, n. 5, p. 483–502, 1923. PR.
- 2 BLOCH, F. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 61, n. 3, p. 206–219, 1930.
- 3 APPELBAUM, I.; HUANG, B.; MONSMA, D. J. Electronic measurement and control of spin transport in silicon. *Nature*, v. 447, n. 7142, p. 295–298, 2007.
- 4 AN, T. et al. Unidirectional spin-wave heat conveyer. *Nature materials*, v. 12, n. 6, p. 549–553, 2013.
- 5 ESAKI, L.; TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, v. 14, n. 1, p. 61–65, 1970.
- 6 PEREIRA, L. G. *Estudo do comportamento magnético e magnetoresistivo em multicamadas de filmes finos*. Tese (Doutorado), 1994.
- 7 JOYCE, B. Molecular beam epitaxy. *Reports on Progress in Physics*, v. 48, n. 12, p. 1637, 1985.
- 8 BAIBICH, M. et al. Giant magnetoresistance of (001) fe/(001) cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 21, p. 2472–2475, 1988.
- 9 FREITAS, P. et al. Magnetoresistive sensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 19, p. 165221, 2007.
- 10 FALICOV, L. et al. Surface, interface, and thin-film magnetism. *Journal of Materials Research*, v. 5, n. 06, p. 1299–1340, 1990.
- 11 GREGG, J. et al. The art of sp up n electron down cs. *Journal of magnetism and magnetic materials*, v. 175, n. 1, p. 1–9, 1997.
- 12 FUCHS, K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. In: . [S.l.]: Cambridge Univ Press. v. 34, p. 100–108.
- 13 CHAMBERS, R. The conductivity of thin wires in a magnetic field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 202, n. 1070, p. 378–394, 1950.
- 14 SONDHEIMER, E. The mean free path of electrons in metals. *Advances in Physics*, v. 1, n. 1, p. 1–42, 1952.
- 15 GIJS, M.; BAUER, G. Perpendicular giant magnetoresistance of magnetic multilayers. *Advances in Physics*, v. 46, n. 3-4, p. 285–445, 1997.

- 16 FERT, A.; BRUNO, P. 2.2 interlayer coupling and magnetoresistance in multilayers. *Magnetic Coupling and Magnetoresistance*, 1994.
- 17 LEVY, P. Giant magnetoresistance in magnetic layered and granular materials. *Solid state physics*, v. 47, p. 367–462, 1994.
- 18 WEIZENMANN, A. Acoplamento dipolar entre partículas ferromagnéticas. 2012.
- 19 UCHOA, B.; NETO, A. C. Superconducting states of pure and doped graphene. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 14, p. 146801, 2007.
- 20 NOVAK, M. A. Introdução ao magnetismo. *I Escola Brasileira de Magnetismo, Sao Paulo*, 1998.
- 21 MATTIS, D. The theory of magnetism, vol.1. (*Springer, Berlin*), 1981.
- 22 MARQUES, A. A. Descoberta do magnetismo.
- 23 BARROS, H. de; ESQUIVEL, D. Interação do campo magnético da terra com os seres vivos: História da sua descoberta. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, 2000.
- 24 GILBERT, W. et al. *On the loadstone and magnetic bodies*. [S.l.]: Encyclopaedia Britannica, 1952.
- 25 KRONMÜLLER, H.; FÄHNLE, M. *Micromagnetism and the microstructure of ferromagnetic solids*. [S.l.]: Cambridge university press, 2003.
- 26 MAXWELL, J. *A Treatise on electricity & magnetism, in two volumes*.
- 27 QUEIROZ, S. de. Fenômenos críticos em sistemas magnéticos: Teoria. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, 2000.
- 28 STANLEY, H. Introduction to phase transitions and critical phenomena. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, by H Eugene Stanley, pp. 336. volume 1, year 1987*.
- 29 POLYCARPO, r.; BARROSO, M. F. Uma breve história do mundo dos quanta.
- 30 PAIS, A. George uhlenbeck and the discovery of electron spin. *Physics Today*, v. 42, n. 12, p. 34–40, 1989.
- 31 TOMA, H.; ARAKI, K. Nanociência e nanotecnologia - o gigantesco e promissor mundo do muito pequeno. *Ciência Hoje*, v. 37, n. 217, 2005.
- 32 KNOBEL, M. Os superpoderes dos nanomagnetos. *Ciência Hoje*, v. 27, n. 159, p. 32–38, 2000.
- 33 CURIE, P. *Propriétés magnétiques des corps a diverses températures*. [S.l.]: Gauthier-Villars et fils, 1895.
- 34 CURIE, P. *Oeuvres de Pierre Curie: publiées par les soins de la Société française de physique*. [S.l.]: Gauthier-Villars, 1908.

- 35 RIBEIRO, G. As propriedades magnéticas da matéria: um primeiro contato. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, 2000.
- 36 HEISENBERG, W. Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 38, n. 6, p. 411–426, 1926.
- 37 HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 49, n. 9, p. 619–636, 1928.
- 38 DAI, D.; WHANGBO, M. Spin exchange interactions of a spin dimer: Analysis of broken-symmetry spin states in terms of the eigenstates of heisenberg and ising spin hamiltonians. *The Journal of chemical physics*, v. 118, p. 29, 2003.
- 39 TCHOUGREEFF, A. Heisenberg hamiltonian for charge transfer organometallic ferromagnets. *The Journal of chemical physics*, v. 96, p. 6026, 1992.
- 40 BETHE, H. Zur theorie der metalle. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 71, n. 3, p. 205–226, 1931.
- 41 LOU, J. et al. Topological effects in short antiferromagnetic heisenberg chains. *Physical Review B*, v. 65, n. 10, p. 104401, 2002.
- 42 LÍBERO, V.; CAPELLE, K. Spin-distribution functionals and correlation energy of the heisenberg model. *Physical Review B*, v. 68, n. 2, p. 024423, 2003.
- 43 ANDERSON, P. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state. *Physical Review*, v. 86, n. 5, p. 694, 1952.
- 44 WEISS, P. Hypothesis of the molecular field and ferromagnetic properties. *J. Phys*, v. 6, p. 661–690, 1907.
- 45 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. Solid state physics (brooks cole, 1976). *Cited on*, p. 26.
- 46 DIRAC, P. 1947, *The principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Oxford University Press.
- 47 AHARONI, A. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 2000.
- 48 DATTA GUPTA, S. *A paradigm called magnetism*. [S.l.]: World Scientific Pub Co Inc, 2009.
- 49 VLECK, J. V. A survey of the theory of ferromagnetism. *Reviews of Modern Physics*, v. 17, n. 1, p. 27, 1945.
- 50 MERMIN, N.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, 1966.
- 51 GRIFFITHS, D. *Introduction to Electrodynamics*. 1999. [S.l.]: Prentice Hall.
- 52 SKOMSKI, R. *Simple models of magnetism*. [S.l.]: Oxford University Press Oxford, UK, 2008.

- 53 COWBURN, R. et al. Single-domain circular nanomagnets. *Physical Review Letters*, v. 83, n. 5, p. 1042–1045, 1999.
- 54 CASTELNOVO, C.; MOESSNER, R.; SONDHI, S. Magnetic monopoles in spin ice. *Nature*, v. 451, n. 7174, p. 42–45, 2008.
- 55 DEBELL, K.; MACISAAC, A.; WHITEHEAD, J. Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 72, n. 1, p. 225, 2000.
- 56 MIEDEMA, A.; WIELINGA, R.; HUISKAMP, W. Experimental study of the body-centered-cubic heisenberg ferromagnet. *Physica*, v. 31, n. 11, p. 1585–1598, 1965.
- 57 KEFFER, F. Spin waves. *Encyclopedia of Physics*, v. 18, p. 2, 1966.
- 58 DYSON, F. General theory of spin-wave interactions. *Physical Review*, v. 102, n. 5, p. 1217, 1956.
- 59 MøLLER, C. Zur theorie des austauschproblems und des ferromagnetismus bei tiefen temperaturen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 82, n. 9, p. 559–567, 1933.
- 60 HOLSTEIN, T.; PRIMAKOFF, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Physical Review*, v. 58, n. 12, p. 1098, 1940.
- 61 OPECHOWSKI, W. On the exchange interaction in magnetic crystals. *Physica*, v. 4, n. 2, p. 181–199, 1937.
- 62 SCHAFROTH, M. R. Self-consistent spin-wave theory for the ferromagnetic exchange problem. *Proceedings of the Physical Society of London Section A*, v. 67, n. 409, p. 33–38, 1954.
- 63 KRANENDONK, J. Spin-deviation theory of ferromagnetism i general theory. *Physica*, v. 21, n. 6, p. 749–766, 1955.
- 64 IGARASHI, J.; WATABE, A. Quantum corrections to the spin-correlation function and the spin-stiffness constant in a two-dimensional heisenberg antiferromagnet at zero temperature. *Physical Review B*, v. 44, n. 10, p. 5057, 1991.
- 65 RESNICK, R.; EISBERG, R. Física quântica-Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. *Editora Campus*, 1979.
- 66 NUSSENZVEIG, H. Curso de física básica 3-eletromagnetismo. *Editora Edgard Blucher LTDA*, 1997.
- 67 CHIKAZUMI, S.; CHARAP, S. *Physics of magnetism*. [S.l.]: Krieger New York, 1978.
- 68 CRAIK, D. Magnetism: principles and applications. *Magnetism: Principles and Applications, by Derek J. Craik, pp. 468. ISBN 0-471-95417-9. Wiley-VCH, September 2003.*, v. 1, 2003.
- 69 CULLITY, B.; GRAHAM, C. *Introduction to magnetic materials*. [S.l.]: Wiley-IEEE Press, 2011.

- 
- 70 HAINES, W. Anisotropy in thin film media origins and applications. *Journal of applied physics*, v. 61, n. 8, p. 3497–3502, 1987.
- 71 ZEEMAN, D. Xxxii. on the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 43, n. 262, p. 226–239, 1897.
- 72 WHITE, R. *Quantum Theory of Magnetism, Vol. 32 of Springer series in solid-state sciences*. [S.l.]: Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- 73 SAKURAI, J.; TUAN, S.; COMMINS, E. Modern quantum mechanics. *American Journal of Physics*, v. 63, p. 93, 1995.