

Universidade Federal de São Carlos

**Ondas de spin em paredes de domínio
unidimensionais em monocamadas
magnéticas.**

Leandro Peres Caprara

Universidade Federal de São Carlos

Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Programa de Pós-Graduação em Física

Ondas de spin em paredes de domínio unidimensionais em monocamadas magnéticas.

Leandro Peres Caprara

Orientador:

Prof. Dr. Paulo Eduardo Fornasari Farinas

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-graduação em Física da Universidade
Federal de São Carlos como parte dos
requisitos para a obtenção do título de
Mestre em Física.

São Carlos, setembro de 2012.

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

C251os Caprara, Leandro Peres.
Ondas de spin em paredes de domínio unidimensionais
em monocamadas magnéticas / Leandro Peres Caprara. --
São Carlos : UFSCar, 2012.
78 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São
Carlos, 2012.

1. Física da matéria condensada. 2. Ondas de spin. 3.
Paredes de domínio. 4. Modelo de Heisenberg. I. Título.

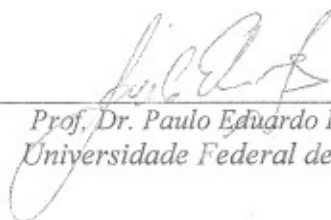
CDD: 530.41 (20^a)

Leandro Peres Caprara

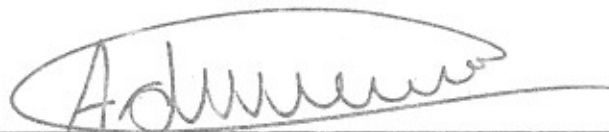
Dissertação de Mestrado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da Universidade
Federal de São Carlos, como requisito
parcial para a obtenção do título de
Mestre em Ciências.

Aprovada em 16/08/2012.

BANCA EXAMINADORA



*Prof. Dr. Paulo Eduardo Fornasari Farinas
Universidade Federal de São Carlos - DF*



*Prof. Dr. Adilson Jesus Aparecido de Oliveira
Universidade Federal de São Carlos - DF*



*Prof. Dr. Marcelo Zoega Maialle
Universidade Estadual de Campinas - IFGW*

Resumo

Investigações recentes em monocamadas ferromagnéticas prevêm a existência de modos de onda de spin sem gap no espectro, mesmo na presença de anisotropia. Estas excitações propagam-se no interior das paredes de domínio existentes na monocamada, portanto em estruturas quase unidimensionais. Elas distinguem-se dos modos já conhecidos cujo espectro possui gap de anisotropia e cuja propagação pode cobrir toda extensão da monocamada. Além disso, por não terem gap no espectro, os modos previstos não associam uma temperatura de ativação e devem influenciar as propriedades físicas observáveis a baixas temperaturas. Este trabalho apresenta um estudo teórico de uma monocamada ferromagnética com paredes de domínio e a resposta a um campo magnético oscilante. As ressonâncias dos modos de onda de spin sem gap são estudadas como resultado.

Abstract.

Recent investigations on ferromagnetic monolayers predict the existence of spin-wave modes without gap in the spectrum, even in the presence of anisotropy. These excitations propagate within the domain walls that exist in the monolayer, hence in quasi-one-dimensional structures. They are different from the known bulk-modes whose spectrum presents anisotropy gap and whose propagation may cover all the monolayer's extension. Moreover, since they do not have gap in the spectrum, the predicted modes are not associated to an activation temperature and must influence low-temperature observable physical properties. In the present work, a theoretical study is presented for a single ferromagnetic monolayer with domain walls and the response to an oscillating magnetic field. Gapless spin-wave modes' resonances are studied in the results.

Sumário.

1	Introdução.....	7
2	Descrição teórica do ferromagnetismo a partir do modelo de Heisenberg.....	13
	2.1 Modelo de Heisenberg.....	13
	2.2 Modelo de Heisenberg com anisotropia.....	23
	2.2.1 Anisotropia Magnetocristalina.....	25
	2.2.2 Anisotropia Magnetoestrictiva.....	26
	2.2.3 Anisotropia Magnetostática.....	27
	2.3 Paredes de Domínio.....	27
3	Teoria de Resposta Linear	30
4	Estudo de monocamadas ferromagnéticas com paredes de domínio unidimensionais	36
5	Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.....	51
6	Conclusões.....	67
	Apêndice A.....	70
	Apêndice B.....	72
	Bibliografia.....	74

Lista de Figuras.

1- Ilustração do fenômeno de magnetorresistência. As setas indicam a orientação dos spins nas camadas.....	10
2- Ilustração qualitativa das energias dos modelos de Heisenberg isotrópico (curva verde) e anisotrópico (curva preta) com os mínimos relativos às topologias indicadas.....	24
3-Parede de domínio.....	28
4- a) Amostra com milhares de paredes de domínio[40], b) Esquema de uma parede de domínio em duas dimensões.....	37
5-Esquema de uma rede cristalina quadrada.....	37
6-Sítios numa rede cristalina quadrada.....	37
7- Uma parede de domínio separada no nosso sistema (Figura 4 b) nela notamos inversão dos spins apenas com relação a o ângulo θ	42
8- Gráfico da dispersão dos modos de onda de spin com gap na anisotropia (equação (4.26)).....	46
9-Função potencial que determina os auto-estados da equação (4.22) (potencial que atua nos magnons da parede de domínio).....	46
10-Gráfico dos modos de ondas de spin sem gap equação (4.32).....	48
11- Ilustração de um arranjo hipotético para aplicação de um campo oscilante a uma monocamada ferromagnética.....	52
12- Ilustração do produto entre as funções degrau usadas para limitar a região de atuação do campo.....	54
13- Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-3} Tesla aplicado.....	62
14- Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-2} Tesla aplicado.....	63
15- Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-1} Tesla aplicado.....	64

16- Comparação entre a intensidade dos picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-3} Tesla aplicado (linha preta contínua) e com um campo de 10^{-2} Tesla aplicado (linha vermelha pontilhada).....	65
17-Gráfico do comportamento real da amostra depois de um campo aplicado na forma de uma pequena perturbação conforme a equação (5.31).....	66
18- Diferença entre a amostra com uma perturbação aplicada (linha preta e pontilhada) e sem a perturbação (linha vermelha linear e contínua).....	67

Capítulo 1

Introdução

Uma das grandes tarefas da Física é o entendimento e a descrição do magnetismo em materiais, tanto na parte básica através da elaboração de métodos mais eficazes para a sua abordagem, como na parte aplicada ao desenvolvimento de novas tecnologias.

O magnetismo em materiais se deve em grande parte ao spin que é uma propriedade intrínseca dos elétrons, sendo por isso um fenômeno quântico. Devido às disposições de 'momentos magnéticos' em um material temos a origem de vários tipos de ordenamentos magnéticos conhecidos hoje em dia, tais como o Ferromagnetismo, Antiferromagnetismo, Ferrimagnetismo, e Paramagnetismo, por exemplo. Estes fenômenos são característicos por exibirem suas configurações magnéticas em temperaturas que podem comumente ultrapassar a temperatura ambiente (abaixo de uma temperatura crítica). Estes tipos de comportamento se devem ao princípio de exclusão de Pauli e às interações Coulombianas. Neste trabalho damos mais atenção ao ferromagnetismo.

O ferromagnetismo foi estudado em 1907 por P. Weiss [1], que propôs a existência de um campo magnético no material que é proporcional à sua magnetização que seria suficiente para levar a magnetização a seu valor de saturação. Tal proposta não é suficiente para a explicação do fenômeno, pois ela se baseia na idéia de que os elétrons interagem com um campo molecular sem dinâmica e não dinamicamente entre eles como explicado no capítulo 2.

Em 1926 Heisenberg propôs um modelo [2] para o magnetismo espontâneo colocando as interações entre momentos magnéticos microscópicos como as principais causas. Esse modelo prevê, como é estudado no segundo capítulo, que os modos de ondas de spin (cujos quanta são chamados de "magnons") podem ser excitados sem ser preciso uma energia mínima. Mesmo o modelo de Heisenberg tendo sido desenvolvido há mais de 80 anos e sendo simples a ponto de desconsiderar várias interações existentes e

importantes em materiais magnéticos, é conhecida apenas uma solução analítica exata para o caso unidimensional isotrópico homogêneo de spin $\frac{1}{2}$ (obtida usando-se a técnica do ansatz de Bethe [3]), por isso há ainda muita necessidade em desenvolver técnicas para conseguir extrair informações do hamiltoniano.

No caso anisotrópico, é conhecido que para excitar uma onda de spin precisamos de uma energia mínima ou um gap de energia, ao contrário do caso isotrópico. Em meados da década de 1990, sistemas ferromagnéticos metálicos bidimensionais com paredes de domínio induzidas e formando uma estrutura homogênea puderam ser fabricados [4]. Nas descrições teóricas da literatura [5,6] as possíveis interações inelásticas no transporte de elétrons através das paredes de domínio consideram que, sendo as temperaturas nas medidas realizadas nestas amostras ($\sim 1\text{K}$) muito menor que o gap de anisotropia ($\sim 150\text{K}$), os elétrons de condução não podem ser espalhados por magnons, pois não havia até então a previsão da existência de magnons que poderiam ser excitados a temperaturas tão baixas. Entretanto, a existência de mágnons sem gap, prevista nas Referências [7,8], pode mudar essas expectativas. Estes materiais têm grande potencial para aplicações em “spintrônica”, uma eletrônica que explora não só a carga, mas também o spin do elétron.

Nas últimas décadas foram grandes os avanços no ramo da spintrônica, que é uma área cujos objetivos são a manipulação, detecção e aplicação dos graus de liberdade dos spins das partículas. Com o seu desenvolvimento foi possível a fabricação de novos materiais como nanoestruturas magnéticas que possibilitam o controle magnético do spin. A descoberta da magnetorresistência gigante [9,10] é considerada um marco nesta área. Desde então, houve uma grande procura por materiais que combinassem as propriedades de um semicondutor e as de um material ferromagnético.

Magnetorresistência é uma propriedade que certos materiais têm de ter o valor de sua resistência elétrica alterada com a aplicação de um campo magnético externo, este fenômeno foi primeiramente descoberto por Lord Kelvin em 1856, embora ele não tenha conseguido variar em mais de 5% o valor da resistência elétrica do material. Praticamente todos os materiais condutores apresentam magnetorresistência, ela surge da interação de um campo magnético externo com os elétrons de condução. Este fenômeno é conhecido como magnetorresistência ordinária e apresenta uma baixa variação da resistência.

Um outro tipo de magnetorresistência que foi muito usado é a anisotrópica. Um exemplo típico de material que apresenta este fenômeno é o “Permalloy”, que é uma liga de ferro e níquel. Este material foi usado em cabeçotes sensores de leitores de disco rígido de computador e de fitas cassete, apresenta uma magnetorresistência em torno de 2%. Em 1988 foi descoberto outro tipo de magnetorresistência em que inicialmente foi obtida uma variação em torno de 50% da resistência elétrica quando aplicado um campo magnético forte em amostras de multicamadas a temperaturas muito baixas. Este novo fenômeno ficou conhecido como magnetorresistência gigante (GMR) [9,10]. Foram feitas amostras com três camadas muito finas empilhadas uma sobre a outra, sendo que as duas camadas externas são de um mesmo material magnético e a camada interior é feita de um material não magnético. Descobriu-se que se uma das camadas externas tiver seus spins orientados em um sentido e a outra camada exterior tiver seus spins orientados em sentido oposto, haverá então uma grande resistência à passagem de elétrons de condução pela amostra, porém se em ambas as amostras os spins têm a mesma orientação a resistência cai ao seu valor mínimo. Como para certas espessuras (geralmente muito estreitas) os spins nestas amostras preferem se alinhar naturalmente em direções opostas, as amostras apresentam uma grande resistência, mas com a aplicação de um campo magnético forte os spins das amostras se alinham e a resistência diminui muito. A figura a seguir mostra um esquema simplificado de arranjo onde se pode obter o efeito da magnetorresistência gigante.

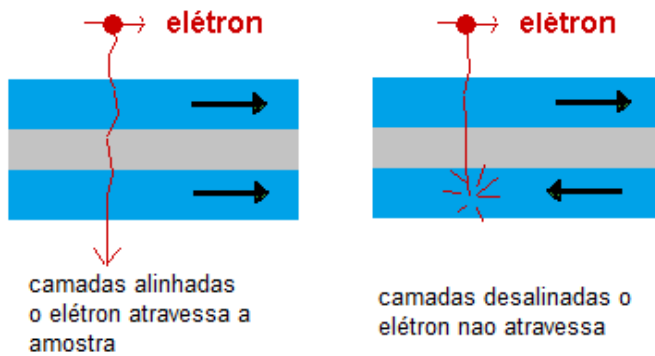


Figura 1. Ilustração do fenômeno de magnetorresistência. As setas indicam a orientação dos spins nas camadas.

Muitas das aplicações da spintrônica são baseadas em nanoestruturas de metais ferromagnéticos, tais como discos rígidos magnéticos que agora podem gravar uma quantidade enorme de dados que devido a esta nova tecnologia foi capaz de produzir cabeças leitoras cada vez menores. Há também o desenvolvimento das memórias magnéticas de acesso aleatório (M.R.A.M) [11] que não tem seus dados perdidos quando a fonte de energia é desligada, e estão em desenvolvimento também novas técnicas para o aperfeiçoamento de manipulação da rotação de elétrons na intenção de obter cada vez mais uma melhor miniaturização [12-17], tentando um aumento do desempenho e redução de consumo de energia em processadores de computadores, entre vários outros tipos de dispositivos spintrônicos.

Ondas de spin (magnons) são excitações coletivas que surgem em materiais magnéticos. No caso de materiais ferromagnéticos, essas excitações coletivas são o movimento em fase da precessão dos spins que compõe o ferromagnetismo. Esta precessão é causada por perturbações, como, por exemplo, uma variação da temperatura do sistema ou uma variação de um campo magnético externo aplicado a este sistema. Esta perturbação provoca a precessão de um momento de dipolo magnético que interage com seus vizinhos mais próximos levando a uma propagação da perturbação, formando uma onda de spins.

Os magnons têm uma importância fundamental, quando um dispositivo spintrônico é operado em altas frequências, ondas de spin influenciam o transporte, pois precisam de certa quantidade de energia para ser excitadas e se propagarem. São também muito

importantes no transporte de informação. Por estes motivos, existe um grande interesse no estudo de multicamadas ferromagnéticas e em sistemas de dimensões muito pequenas, o que torna o estudo dos magnons de fundamental importância na obtenção de novos sistemas spintrônicos.

Paredes de domínio têm sido intensamente estudadas desde que Bloch em 1932 [18,19] mostrou que elas minimizam a energia de um sistema ferromagnético finito. Com a descoberta da spintrônica, elas passaram a ter uma importância fundamental no desenvolvimento de novos materiais que apresentam magnetorresistência gigante, pois elas influenciam fortemente o transporte de elétrons nestes materiais.

Mais recentemente puderam ser fabricadas amostras com arranjos em estruturas de duas ou três dimensões, com propriedades físicas que são bem diferentes das encontradas em materiais naturais. Estes novos materiais, conhecidos como cristais magnônicos, podem ser de grande importância, pois permitem o controle das ondas de spin na escala nanoscópica, portanto podem ser de grande utilidade em spintrônica e em tecnologias de informação. Como as ondas de spin têm grande importância na transmissão de informação há um grande interesse em seu estudo [12-17]. Um material que está sendo empregado com sucesso para estes fins é o Permalloy ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$) [20], que era empregado na fabricação de fitas magnéticas e discos rígidos para armazenamento de dados. Estudos recentes [21] mostram que é possível conseguir um bom controle da propagação de ondas de spin neste material ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$) através de um tipo de magnetização em zig-zag [22].

Neste trabalho temos interesse em estudar através do modelo de Heisenberg anisotrópico, sistemas ferromagnéticos com monocamadas metálicas bidimensionais ferromagnéticas e encontrar os modos de ondas de spin usuais com gap na anisotropia e os modos sem gap que existem apenas em sistemas ferromagnéticos com duas ou mais dimensões e se propagam em uma direção na parede de domínio como encontrado em [7,8]. E depois aplicar um campo magnético externo na forma de uma pequena perturbação na parede de domínio e encontrar a função resposta deste sistema físico à perturbação aplicada.

No segundo capítulo é feita uma breve discussão do modelo de Heisenberg isotrópico e através do estudo de dois átomos de hidrogênio encontramos a interação de troca que é de fundamental importância para o entendimento do magnetismo em sólidos, o princípio de exclusão de Pauli e a interação Coulombiana levam à ordem magnética e podem ser representados por um modelo efetivo. No segundo capítulo também é estudado o modelo de Heisenberg anisotrópico e a existência das paredes de domínio. No terceiro capítulo é dada uma introdução à teoria de resposta linear a fim de introduzir conceitos que são usados mais adiante. No quarto capítulo é feito um estudo de monocamadas ferromagnéticas bidimensionais com paredes de domínio como nas referências [7,8] para encontrar os modos de ondas de spin que se propagam pela amostra acima de uma temperatura crítica. Além dos conhecidos “modos de volume” (que possuem gap no espectro, por causa da anisotropia), obtemos também os modos de ondas de spin “não usuais”, ou seja, sem gap que existem apenas em sistemas ferromagnéticos com duas ou mais dimensões e se propagam em uma direção, dentro das paredes de domínio. Estes modos sem gap podem ser a causa de a magnetização e o calor específico encontrados em medidas experimentais [4] darem valores diferentes dos previstos pela literatura [5,6]. No quinto capítulo é feito um estudo destas monocamadas ferromagnéticas, porém é aplicado um pequeno campo magnético (como uma pequena perturbação) na direção z (eixo de “fácil magnetização”) da amostra, e obtém-se a resposta deste sistema à perturbação aplicada, através do cálculo do fator de forma dinâmico “ $S(\mathbf{q}, \omega)$ ”. Por fim é apresentada uma pequena conclusão dos estudos realizados neste projeto de mestrado.

Capítulo 2

Descrição teórica do ferromagnetismo a partir do modelo de Heisenberg.

2.1 Modelo de Heisenberg

Diferentes materiais apresentam em seu estado de equilíbrio livre de campos, ou na presença de campos magnéticos externos, diferentes configurações de seus momentos magnéticos. É desejável que estas configurações e suas perturbações dinâmicas possam ser descritas a partir de um único modelo que represente do modo mais simples o sistema físico real. Em 1907, P.Weiss [1] propôs um modelo em que a magnetização espontânea ocorre devido à interação entre átomos magnéticos. Porém o magnetismo em materiais deve-se em grande parte às interações Coulombianas entre elétrons e ao princípio de exclusão de Pauli. Supondo dois dipolos magnéticos \mathbf{m}_1 e \mathbf{m}_2 sua energia de interação dipolar é [24]

$$U = \frac{1}{r^3} (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \cdot \hat{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \hat{r})), \quad (2.1)$$

onde \hat{r} é um versor unitário na linha que une as cargas e r é a distância entre as elas.

Os momentos de dipolo magnético atômicos têm magnitude $\mathbf{m}_1 \approx \mathbf{m}_2 \approx g\mu_B \approx \frac{e\hbar}{mc}$, portanto a ordem de grandeza de U é

$$U \approx \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \frac{e^2}{a_0} \approx \frac{1}{137^2} \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 R_y. \quad (2.2)$$

Supondo que nos sólidos magnéticos os momentos estejam separados por distâncias médias da ordem de 2 a 20 Å, U não tem um valor maior que 10^{-5} eV ou 0,12 K, sugerindo que interações de origem magnética têm pouca contribuição para o magnetismo nos sólidos, já que o magnetismo é abundantemente observado a temperaturas de centenas de graus Kelvins.

Para entender a origem quântica do magnetismo de uma maneira simples, estudaremos um sistema de dois elétrons, considerando inicialmente dois átomos de hidrogênio. O Hamiltoniano do sistema é dado por [23]

$$\mathcal{H} = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + e^2 \left(\frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} \right), \quad (2.3)$$

onde P_1 e P_2 são os operadores momento dos elétrons, m e e são a massa e carga dos elétrons, r é a distância entre as partículas, 1 e 2 referem-se aos elétrons, a e b referem-se aos núcleos. O hamiltoniano do nosso sistema pode ser reescrito com a seguinte forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + e^2 \left(\frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} \right), \quad (2.4)$$

onde foi feita a troca canônica $P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$.

Considerando neste sistema que os prótons fiquem distantes e em repouso, podemos omitir o termo de interação coulombiana entre eles, que é apenas um termo constante no hamiltoniano. Ignorando também o termo de interação entre os elétrons, a equação deste sistema

$$\mathcal{H}^0\Psi = E^0\Psi, \quad (2.5)$$

pode ser separada em equações independentes envolvendo um elétron. A solução do problema pode ser escrita como um produto das funções de onda espacial e de spin

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.6)$$

onde σ_1 e σ_2 são as projeções dos spins dos elétrons num dado eixo qualquer.

De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, a função de onda total Ψ tem que ser antissimétrica com relação a uma troca de coordenadas espaciais e de spin dos elétrons, isto é, se a parte espacial é simétrica, a parte do spin tem que ser antissimétrica e vice-versa

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1).$$

Para o caso de dois spins $\frac{1}{2}$, a parte espacial da função de onda é simétrica quando o spin resultante dos dois elétrons for igual a $S = 0$ (singleto) e antissimétrica quando $S = 1$ (triplete). Já na parte dependente do spin temos o contrario, isto é, a função de onda é simétrica quando $S = 1$ e antissimétrica quando $S = 0$. As configurações possíveis são dadas pela tabela a seguir:

Tabela 2.1: Possíveis configurações para o sistema de 2 spins.

Spin total S	Componente z	Auto-estado Φ_z
$S = 0$	$S_z = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$
$S = 1$	$S_z = 1$	$ \uparrow\uparrow\rangle$
	$S_z = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$
	$S_z = -1$	$ \downarrow\downarrow\rangle$

Assim as funções de ondas espaciais são:

$$\varphi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma^2)}} \{ \varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2}) + \varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1}) \}, \quad S = 0 \quad (2.7.a)$$

para a parte simétrica (singleto), já a parte antissimétrica (triplete) tem a seguinte forma,

$$\varphi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1-\gamma^2)}} \{ \varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2}) - \varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1}) \}, \quad S = 1 \quad (2.7.b)$$

onde $\varphi(\mathbf{r}_{\alpha i})$ é a função de onda normalizada do átomo de hidrogênio consistindo no elétron ($i = 1, 2$) e no núcleo ($\alpha = a, b$). Temos também

$$\gamma = \int \varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b1})d\mathbf{r}_1. \quad (2.8)$$

As funções de onda são degeneradas, mas quando calculamos a correção em primeira ordem, a energia das moléculas para os estados correspondentes a $S = 1$ e $S = 0$ tem a seguinte forma,

$$E_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = \int \varphi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{H} \varphi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.9. a)$$

$$E_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = \int \varphi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{H} \varphi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.9. b)$$

já que, φ_a e φ_s são funções reais. Substituindo as expressões (2.7.a) e (2.7.b) nas duas últimas equações chegamos em

$$E_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = \frac{A(\mathbf{r}) - J(\mathbf{r})}{\sqrt{1 - \gamma^2}}, \quad E_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = \frac{A(\mathbf{r}) + J(\mathbf{r})}{\sqrt{1 - \gamma^2}}, \quad (2.10)$$

$$A(\mathbf{r}) = \int U \varphi^2(\mathbf{r}_{a1}) \varphi^2(\mathbf{r}_{b2}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.11)$$

$$J(\mathbf{r}) = \int U \varphi(\mathbf{r}_{a1}) \varphi(\mathbf{r}_{b1}) \varphi(\mathbf{r}_{a2}) \varphi(\mathbf{r}_{b2}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.12)$$

e

$$U = e^2 \left(\frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} \right).$$

Nestas expressões são omitidos os termos que são independentes de r , aqui é representada a energia de dois átomos de hidrogênio, a uma distância infinita um do outro. Assumindo que cada elétron está rigidamente acoplado a seu núcleo, ou seja, o elétron 1 está acoplado ao núcleo a e o elétron 2 ao núcleo b . $J(r)$ determina a energia (ou parâmetro) de troca dos dois elétrons, ela decresce exponencialmente com o aumento da distância entre os núcleos, isto ocorre devido ao fato de $J(r)$ conter produtos de funções de onda de elétrons acoplados a diferentes núcleos, isto é, $\varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b1})$ e $\varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b2})$. Pode-se dizer então que $J(r)$ é uma sobreposição destas funções de onda, fazendo com que a interação de troca tenha um decaimento exponencial, sendo assim uma interação de curto alcance.

Este exemplo mostra que a interação de troca é um efeito puramente quântico, com uma dependência muito grande do spin dos elétrons (é sua orientação relativa que dita qual é a energia do estado fundamental), embora as variáveis de spin não estejam explicitamente dentro do hamiltoniano original, onde é tomada somente a interação eletrostática. Este tipo de cálculo foi desenvolvido primeiro por Pauli para o átomo de hélio e por Heitler e London para uma molécula de hidrogênio, e em ambos foi encontrado que $J(r)$ é menor que zero e, conseqüentemente os estados de singletos são os fundamentais.

Dirac em 1929 percebeu que as equações de autovalores (2.10) podem apenas ser obtidas em função do produto de spins se uma interação de troca for adicionada ao hamiltoniano [25]. Esta interação é um efeito puramente eletrostático. O operador introduzido por Dirac tem a forma

$$\mathcal{H} = -J(\mathbf{r})\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + E(\mathbf{r}), \quad (2.13)$$

onde, \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 são operadores do spin do elétron e $J(\mathbf{r})$ e $E(\mathbf{r})$ são funções dependentes de r , temos que,

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}S(S+1) - \frac{3}{4}, \quad (2.14)$$

assim, quando $S = 0$, temos que esse produto escalar vale $-3/4$, e quando $S = 1$ seu valor será $+1/4$. Podemos ignorar o termo da energia média $E(\mathbf{r})$ e ficar apenas com o primeiro termo que é dependente dos spins, esse termo é chamado de hamiltoniano de troca,

$$\mathcal{H}_e = -J(\mathbf{r})\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (2.15)$$

que foi obtido desta forma primeiramente por Dirac em 1929 [25]. O hamiltoniano de troca sobre todo o ferromagneto é a soma entre todos os momentos dos spins do material,

$$\mathcal{H} = - \sum_i J(\mathbf{r}_{i,i+1})\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.16)$$

onde \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_{i+1} são os spins dos elétrons no i ésimo sítio da rede, Os valores de $J(\mathbf{r}_{i,i+1})$, quando estimados de modelos microscópicos, justificam as temperaturas críticas observadas para a transição do ferromagnetismo para o paramagnetismo.

É importante observar que o hamiltoniano dado por (2.16) é isotrópico com relação à direção dos spins. O produto escalar entre os momentos é invariante por uma rotação no espaço de spins. No entanto supondo, para definição, que o valor de J é positivo, o valor negativo da amplitude ($=-J(r)$) favorece um estado fundamental com spins alinhados em uma direção qualquer. Dizemos que o estado fundamental não possui a simetria de seu hamiltoniano (invariância de rotação nos spins), ou, na terminologia mais comum, há uma “quebra espontânea de simetria”. O estado fundamental define uma direção arbitrária “espontaneamente” (a direção de magnetização) apesar de o hamiltoniano ser invariante com relação a direções do spin.

Por causa desta simetria, o custo energético de uma rotação homogênea dos spins é nulo para o hamiltoniano isotrópico. Conseqüentemente, os modos de oscilação (ondas de spin) de vetor de onda nulo podem ser excitados sem custo energético, o que implica na existência de pelo menos um ramo do espectro sem gap ($\omega(q \rightarrow 0) \rightarrow 0$). Este modo é o conhecido “modo de Goldstone” e sua existência, como conseqüência da quebra espontânea de simetria pode ser fundamentada de forma mais rigorosa no teorema de Goldstone [26].

A introdução de um hamiltoniano de troca em termos das variáveis de spin no tratamento de cristais reais torna-se uma ferramenta compacta e poderosa pelo fato de levar a um espectro de energia semelhante ao obtido para o hamiltoniano original. No entanto, apesar da evidente simplificação, a única solução exata conhecida para este modelo no caso unidimensional e isotrópico é a obtida com o ansatz de Bethe [3], que é um método criado para encontrar soluções exatas em certos sistemas de muitos corpos unidimensionais, e foi inicialmente pensado para encontrar de maneira exata os autovalores e autovetores da solução antiferromagnética do modelo de Heisenberg.

O modelo de Heisenberg para o caso de dois sítios (com interação de primeiros vizinhos) pode ser escrito da seguinte forma

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]. \quad (2.17)$$

No caso ferromagnético, ou seja, $J > 0$, esperamos um estado fundamental com todos os spins particularmente alinhados. Associando a esse estado o ket $|F\rangle$, e escolhendo arbitrariamente o eixo z , temos

$$S_i^z |F\rangle = S |F\rangle, \quad (2.18)$$

pelos propriedades dos operadores de spin, o efeito de cada um dos três termos do hamiltoniano (2.16) sobre o estado $|F\rangle$ é, $S_i^z S_j^z |F\rangle = S^2 |F\rangle$, $S_i^+ S_j^- |F\rangle = S_i^- S_j^+ |F\rangle = 0$, assim

$$H|F\rangle = -NzJS^2|F\rangle, \quad (2.19)$$

sendo N o número total de sítios na rede.

Verificamos, portanto que $|F\rangle$ é um autovalor de H e corresponde à menor energia possível. Portanto, o estado fundamental do modelo de Heisenberg para $J > 0$ apresenta uma ordem ferromagnética de longo alcance.

Suspendendo a restrição aos primeiros vizinhos, estudaremos agora o hamiltoniano (2.15) utilizando novamente os operadores S^z e S^\pm a equação (2.15) pode ser escrita

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} (S_i^z S_j^z + S_i^- S_j^+), \quad (2.20)$$

nesta última equação usamos a propriedade $J_{ij} = J_{ji}$, isto nos permite trocar os índices de uma das somas, e também temos o fato de que operadores de spin correspondentes a sítios distintos comutam.

No estado fundamental a energia é $E_0 = -NS^2J(0)$, sendo $J(0)$ o valor uniforme da transformada de Fourier de J_{ij} , que é definida como

$$J(k) = \sum_i J_{ij} e^{k(R_i - R_j)}, \quad (2.21)$$

na equação acima soma é independente de J , pois a rede tem invariância translacional. Esse hamiltoniano conserva a componente z do spin total, portanto todos os auto estados de energia são caracterizados por um autovalor determinado por $S_{tot}^z = \sum_i S_i^z$, os autovalores de S_i^z e de S_{tot}^z variam em múltiplos de sua unidade (quando se considera $\hbar = 1$). No estado fundamental o autovalor é NS , assim no primeiro estado excitado deve ser $NS - 1$.

Supondo um desvio de spin localizado num sitio R

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_R^- |F\rangle, \quad (2.22)$$

onde o fator $\frac{1}{\sqrt{2S}}$ foi incluído para fins de normalização, usando a álgebra de operadores, temos

$$H|R\rangle = E_0|R\rangle + 2S \left[J(0)|R\rangle - \sum_i J_{Ri} |i\rangle \right]. \quad (2.23)$$

O último termo mostra que $|R\rangle$ não é um auto estado de H . Tendo em conta que existem N estados equivalentes deste tipo (o desvio pode estar em qualquer um dos N sítios d rede), qualquer combinação linear deles corresponde ao mesmo autovalor de spin total e poderá definir um auto-estado de energia. Temos que buscar uma combinação linear que verifique a simetria de translação do hamiltoniano, podemos escolher estados da forma

$$|K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iKR_i} |i\rangle. \quad (2.24)$$

A restrição a um tamanho finito de sítios envolve condições periódicas de contorno, onde as componentes do vetor de onda \mathbf{K} assumem valores $K_\alpha = \frac{2m_\alpha\pi}{N_\alpha}$, com m_α inteiro, sendo $\alpha = 1, 2, 3$ o índice que especifica os vetores primitivos da rede (em uma rede cúbica simples é x, y, z) e $N_1 N_2 N_3 = N$, ou seja, existem N vetores \mathbf{K} independentes.

Podemos verificar que $|\mathbf{K}\rangle$ é um autoestado de energia e podemos aplicá-lo diretamente no hamiltoniano

$$H|\mathbf{K}\rangle = [E_0 + \epsilon(\mathbf{K})]|\mathbf{K}\rangle, \quad (2.25)$$

onde $\epsilon(\mathbf{K}) = 2S(J(0) - J(\mathbf{K}))$, o estado $|\mathbf{K}\rangle$ pode ser interpretado como uma “onda de spin” ou “magnon”, sendo $\epsilon(\mathbf{K})$ a energia de excitação associada à presença desta onda.

O spin é quem dá à origem do magnetismo nos materiais e base da maioria dos dispositivos de armazenamento de informações relacionados com a tecnologia em que estamos vivenciando, por isso há um grande interesse em desenvolver um amplo conhecimento das possibilidades de sua aplicação em spintrônica.

2.2 Modelo de Heisenberg com anisotropia.

O modelo de Heisenberg puro (2.16) não admite soluções com domínios magnéticos. Domínios magnéticos são regiões no interior de um material ferromagnético formadas por um grande número de spins que estão alinhados paralelamente com seus vizinhos através da interação de troca. Dentro de um domínio magnético há uma saturação da magnetização, produzindo um campo magnético macroscópico. Este tipo de configuração faz com que a energia de dipolo do material seja diminuída [19], para um

material com domínios magnéticos temos que adicionar o termo de anisotropia em seu hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J(\mathbf{r}) \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - J(\mathbf{r})\Delta \sum_i (S_i^z)^2, \quad (2.26)$$

onde Δ é uma fração numérica usualmente muito pequena que dá a intensidade da anisotropia do material, e a direção z é chamada de “eixo fácil de magnetização”. Soluções com domínios magnéticos orientados em direções diferentes são admissíveis na equação (2.26) como mínimos locais da energia conforme ilustrado na Fig. 2.

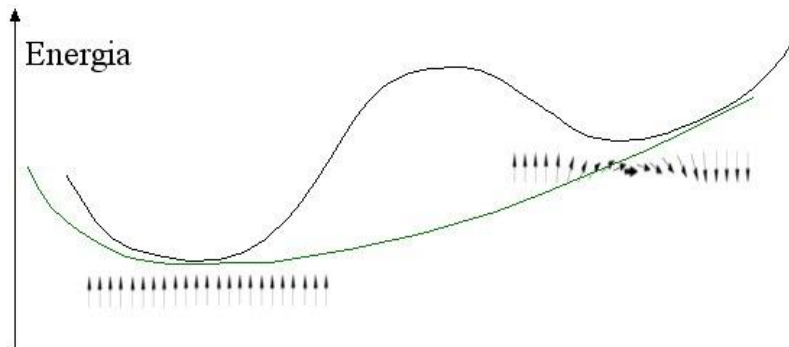


Figura 2. Ilustração qualitativa das energias dos modelos de Heisenberg isotrópico (curva verde) e anisotrópico (curva preta) com os mínimos relativos às topologias indicadas.

É possível perceber, pensando em uma estrutura unidimensional, que a barreira de energia entre as duas topologias ilustradas na Figura 2 deve-se exclusivamente ao termo anisotrópico na equação (2.26). Esta figura ilustra a separação entre dois domínios orientados ao longo do eixo fácil (z). Podemos imaginar o que acontece ao girar a configuração torcida (de maior energia) destorcendo-a para obter a de menor energia. No caso isotrópico, apenas o primeiro termo na equação (2.26) é não nulo, e esta operação abaixa monotonicamente a energia para um valor mais negativo. Já no caso anisotrópico, o termo proporcional a Δ fica mais positivo quando um dos domínios é destorcido, já que

os spins deste domínio passam a apontar para fora do eixo fácil diminuindo os valores das componentes z . Mais para o final da operação de torção, as componentes z passam a apontar ao longo do eixo fácil novamente, e a energia decresce até o valor de mínimo absoluto, daí a presença de uma barreira e, portanto um mínimo local.

O magnetismo nos materiais depende basicamente da intensidade dos momentos magnéticos associados aos átomos ou íons vizinhos, da distância entre os íons vizinhos e da simetria da rede cristalina. Assim as propriedades magnéticas dos materiais ferromagnéticos dependem da direção em que eles são magnetizados. Em geral, a energia anisotrópica é mais difícil de ser tratada algebricamente, sendo calculada apenas para um número limitado de estruturas de domínio. Existem três tipos principais de anisotropia, são elas: a anisotropia magnetocristalina, anisotropia magnetostrictiva (ou magnetoelástica) e anisotropia magnetostática (ou de forma).

2.2.1 Anisotropia magnetocristalina.

A anisotropia magnetocristalina contém contribuições para a energia magnética que dependem da orientação da magnetização em relação aos eixos do cristal, ou seja, as propriedades magnéticas apresentadas pelo material dependem da direção em que ele está sendo magnetizado. Na ausência de um campo magnético externo, em geral os materiais ferromagnéticos apresentam magnetização espontânea nas direções chamadas de “eixos fáceis”. Esta magnetização espontânea em um material ferromagnético não é arbitrária. O forte campo molecular origina de uma interação de troca direta entre os spins de átomos vizinhos que os orientam paralelamente no grão magnético. Esta orientação dos momentos magnéticos está associada a uma energia de anisotropia magnetocristalina, que é mínima quando os momentos magnéticos estão orientados ao longo dos eixos fáceis de magnetização. Magnetizando o material nessas direções a “energia anisotrópica” é mínima e tem sua origem na interação “spin-órbita”, sendo uma propriedade intrínseca do material.

Em geral ela pode ser descrita em termos de uma expansão em série de potências dos co-senos diretores $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ da magnetização com relação aos eixos do cristal (x, y, z) [27,28]

$$E_A = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\substack{m,n \\ m+n \leq N}} K(N, m, n) \alpha_1^m \alpha_2^n \alpha_3^{N-m-n}, \quad (2.27)$$

onde $K(N, m, n)$ são as constantes de anisotropia, em um cristal cúbico temos a seguinte energia de anisotropia magnetocristalina

$$E_A = K_0 + K_1(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2(\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2), \quad (2.28)$$

sendo que K_1 e K_2 determinam as direções de fácil magnetização, esta equação se aplica a qualquer região de magnetização uniforme, a relação de co-senos diretores tem a relação $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1$, podemos determinar a energia de anisotropia magnetocristalina de um determinado material calculando a diferença entre as energias magnetocristalinas ao longo do eixo difícil e ao longo do eixo fácil.

2.2.2 Anisotropia Magnetoestrictiva.

A energia magnetoelástica tem sua origem na interação dos spins com a rede cristalina, causando uma dependência nas dimensões do material (como o comprimento, por exemplo) com a direção de magnetização. Este fenômeno é conhecido como magnetostricção, nele há uma mudança espontânea nas dimensões de um cristal ferromagnético quando o mesmo é submetido a um campo magnético. Dentro da rede cristalina, a energia de interação entre os momentos magnéticos atômicos depende da

separação entre eles e de suas orientações, isto é, da direção de magnetização. Um campo aplicado no material, muda a orientação dos momentos magnéticos de tal forma que a energia de interação aumenta e as distâncias entre as ligações se ajustam para reduzir a energia total. Isto produz tensões que fazem com que o material magnético tenha sua forma alterada.

2.2.3 Anisotropia Magnetostática.

Este tipo de anisotropia se deve ao campo desmagnetizante que tem origem na interação de dipolo e depende da forma e dimensões da amostra. O campo desmagnetizante é definido como a diferença entre o campo magnético existente no interior do material e o campo magnético externo aplicado.

2.3 Paredes de Domínio.

A variação total na direção do spin entre domínios não ocorre por meio de um salto descontínuo, pois para isto seria preciso que uma grande troca de energia ocorresse. A transição acontece de maneira gradual, o spin médio varia sua direção de um ângulo φ em relação à direção anterior (conforme ilustrado na Fig. 3). Se a inversão for, por exemplo, de π e a região de inversão for dividida em N partes, a variação média angular para cada parte é de $\frac{\pi}{N}$ em relação à sua vizinha mais próxima e assim a energia de troca é localmente menor. A energia de troca é responsável pelo alinhamento magnético. Ela é mínima quando o alinhamento é paralelo (no caso ferromagnético, $J > 0$) ou antiparalelo (no caso antiferromagnético, $J < 0$). A interface de transição entre os domínios é chamada de “parede de domínio” (ou parede de Bloch) [18, 19]. Ela é uma estrutura que minimiza a energia de troca, conforme explicado acima. Sua espessura depende da energia anisotrópica, que atua no sentido de limitar a largura da parede. Ela tem um

comportamento contrário ao da energia de troca que tende a aumentar a largura da parede ao máximo. Os spins contidos no interior da parede apontam em grande parte para fora do eixo fácil de magnetização fazendo com que haja uma energia anisotrópica associada com a parede, aproximadamente proporcional à espessura dela. A parede de domínio é uma estrutura que estabiliza a energia do material.

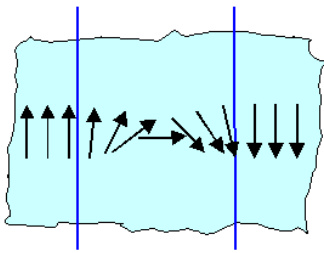


Figura 3: Parede de Domínio.

Quando um campo magnético é aplicado a um ferromagneto, os domínios com orientação de magnetização favorável tendem a crescer. Isto pode ser pensado como um deslocamento de uma ou mais paredes de domínio. Este mecanismo tem um papel importante no processo de magnetização de quase todos os materiais magnéticos. Por esta razão o movimento das paredes de domínio tem sido extensamente estudado dentro do contexto de magnetização desde o início do século XX.

É importante notar que no caso anisotrópico, os modos de onda de spin requerem uma energia mínima para serem excitados, já que, contrariamente ao que discutimos no caso isotrópico, rotações homogêneas dos spins têm um custo energético proporcional à $J\Delta$, (Eq. (2.26)). Esperamos então que as ondas de spin requeiram uma energia mínima para serem excitadas neste caso, e portanto fiquem “congeladas” a temperaturas baixas comparadas ao valor de $J\Delta$.

A presença das paredes de domínio magnético são também uma fonte de magnetorresistência, experimentos de transporte em fios [32,33], e nanocontatos [34-35] magnéticos mostram saltos na resistência do sistema quando ocorre a remoção das paredes de domínio. Cabrera e Falicov [37] foram os primeiros a calcular a contribuição

de uma parede de domínio de Bloch para a resistência de um metal ferromagnético. Eles mostraram que as paredes estreitas, cuja largura λ é comparável com o comprimento de onda de de Broglie dos elétrons de condução, são capazes de espalhar significativamente os elétrons por causa da mudança brusca na direção da magnetização local. Como as paredes são removidas pela aplicação de campos magnéticos, isso explicaria a magnetorresistência negativa de alguns materiais.

Capítulo 3

Teoria de Resposta Linear.

Em física muitos dos experimentos que são realizados constituem-se da aplicação de algum tipo de perturbação externa (na forma de campo magnético ou elétrico, por exemplo) no sistema físico com o qual há o interesse de estudo [29,30]. Este sistema interage com a perturbação gerando uma resposta ao estímulo, se a interação entre eles for suficientemente pequena é obtida uma resposta linear do sistema à perturbação aplicada a ele. Consequentemente, experimentos com “pequenas interações” oferecem o método ideal para a compreensão do comportamento de sistemas com muitas partículas, podemos lidar com eles através da aplicação da teoria de perturbação dependente do tempo.

Supondo como exemplo um potencial escalar $\varphi(\mathbf{r}, t)$ que atua num sistema através do seguinte hamiltoniano

$$H_e = \sum_q \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_q^+ \varphi(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t}, \quad (3.1)$$

onde $\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ é a transformada de Fourier no espaço e no tempo de $\varphi(\mathbf{r}, t)$, vamos também considerar o campo perturbativo como sendo real, ou seja, $\varphi(\mathbf{q}, \omega) = \varphi^*(-\mathbf{q}, -\omega)$, este potencial escalar pode ser, por exemplo, uma partícula com velocidade v_l , e posição r_e , assumimos que este potencial externo tem intensidade muito pequena, de modo que consigamos uma boa aproximação e assim obter-se uma resposta linear do sistema para a interação (3.1). Com a condição de um potencial muito pequeno cada componente da transformada de Fourier de (3.1) atua independentemente no sistema. $\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ induz uma perturbação no sistema através do seu vetor de onda q e da frequência ω com que é aplicado. No entanto também podemos considerar apenas uma única componente da transformada de Fourier na equação (3.1), desde que $\varphi(\mathbf{q}, \omega)$

continue sendo uma grandeza real, assim podemos escrever o hamiltoniano da perturbação externa da seguinte forma

$$H_e = \rho_q^+ \varphi(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} . \quad (3.2)$$

Numa interação deste tipo podemos ter certas dificuldades como, por exemplo, mesmo que a perturbação for muito fraca ela pode com o passar do tempo transferir energia e causar um aquecimento no sistema físico causando uma deformação e em certas circunstâncias obter efeitos não-lineares. Esta dificuldade pode ser evitada através de uma escolha adequada de condições de contorno de todo o sistema. Assim, se o sistema for estável, devemos adotar condições de contorno “adiabáticas”, que significa ligar a interação H_e muito fracamente, isto pode ser realizado ao multiplicarmos H_e por um fator $e^{\eta t}$, onde η é um número positivo e muito pequeno. A transferência de energia para o sistema é proporcional a φ^2 e ao tempo em que a perturbação é aplicada. Podemos usar a condição de contorno adiabática da seguinte maneira: inicialmente fazemos η ser finito durante o cálculo e no final faz-se o limite de $\eta \rightarrow 0$.

A densidade de flutuação média que é induzida ao sistema pela perturbação (3.2) em um tempo t é dada por

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \rho_q | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (3.3)$$

onde $|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ é a função de onda exata do sistema na presença da perturbação aplicada. Desde que a perturbação seja periódica no tempo, podemos escrever

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle e^{-i\omega t} e^{\eta t} , \quad (3.4)$$

$\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ é a transformada de Fourier dada por

$$\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \rho_{\mathbf{q}} e^{i\omega t} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle e^{-\eta t}, \quad (3.5)$$

$\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ é quem caracteriza a resposta do sistema, pode ser expressa em termos da seguinte quantidade

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle}{\varphi(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.6)$$

$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ é a função resposta à perturbação aplicada. Precisamos observar que, quando χ depende de ω e \mathbf{q} , a resposta para o potencial aplicado é não-local no espaço e no tempo, assim o potencial atuando num ponto \mathbf{r} , num tempo t , dá origem a uma alteração da densidade de perturbação em algum outro ponto \mathbf{r}' , depois de um tempo t' . Para um sistema com invariância translacional que nos restringimos, a resposta depende apenas de $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ e de $t' - t$. Vamos agora calcular $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, como estamos interessados na resposta linear do sistema, é suficiente apenas usarmos teoria de perturbação de primeira ordem. A função de onda do sistema $|\psi(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrodinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (H + H_e) |\psi(t)\rangle, \quad (3.7)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema sem a perturbação aplicada

$$H = \sum_i \left[\frac{P_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (3.8)$$

e H_e é a interação aplicada ao sistema, pela equação (3.2). A equação (3.8) é resolvida com o uso da seguinte condição de contorno, $t \rightarrow -\infty$, quando o sistema esta no estado fundamental $|0\rangle$. Escrevemos $|\psi(t)\rangle$ da seguinte forma

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (3.9)$$

Com a condição de contorno que corresponde a

$$a_n(-\infty) = \begin{cases} 1, & \text{se } n = 0 \\ 0, & \text{se } n \neq 0 \end{cases}. \quad (3.10)$$

Substituindo a equação (3.9) em (3.7), aplicando teoria de perturbação dependente do tempo [31] e mantendo apenas os termos de primeira ordem em φ , depois de uma integração encontramos

$$a_n(t) = \left\{ \frac{(\rho_q^+)_{n0} \varphi(\mathbf{q}, \omega)}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} e^{(-i\omega + i\omega_{n0} + \eta)t} - \frac{(\rho_q)_{n0} \varphi^+(\mathbf{q}, \omega)}{\omega + \omega_{n0} - i\eta} e^{(i\omega + i\omega_{n0} + \eta)t} \right\}, \quad (3.11)$$

$n \neq 0,$

$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle$ é obtida a partir da equação (3.3) e da (3.9), usando teoria de perturbação em primeira ordem temos

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \sum_n \left\{ (\rho_q)_{n0} a_n(t) e^{-i\omega_{n0}t} + a_n^+(t) (\rho_q)_{n0} e^{i\omega_{n0}t} \right\}, \quad (3.12)$$

(desde que $\langle 0 | \rho_q | 0 \rangle$ desaparece em um sistema invariante por translação). Podemos substituir a equação (3.11) na equação (3.12), precisamos notar que um dado estado $|n\rangle$ não pode ser acoplado ao estado fundamental $|0\rangle$, tanto por ρ_q como por ρ_q^+ , desde que tenha \mathbf{q} ou \mathbf{q}' , assim $\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle$ fica

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \varphi(\mathbf{q}, \omega) e^{(-i\omega + \eta)t} \sum_n \left\{ \frac{|(\rho_q^+)_{n0}|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{|(\rho_q)_{n0}|^2}{\omega + \omega_{n0} - i\eta} \right\}, \quad (3.13)$$

fazendo o uso da equação (3.4) e usando $|(\rho_q^+)_{n0}|^2 = |(\rho_q)_{n0}|^2$, podemos escrever

$$\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \varphi(\mathbf{q}, \omega) \sum_n |(\varphi_q^+)_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} - i\eta} \right\}. \quad (3.14)$$

A função resposta foi definida pela equação (3.6), assim substituindo a equação (3.14) na equação (3.6) obtemos

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_n |(\varphi_q^+)_{n0}|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (3.15)$$

que é o resultado procurado.

Resultados que expressam a função de resposta linear em termos de auto estados do sistema (como a anterior) foram primeiro obtidos por Kubo [38,39] por volta de 1956. Este método não se restringe apenas em obter a função resposta para densidades de perturbação escalares. Como perturbação atuando no sistema pode ser considerado um campo magnético ou elétrico com uma intensidade bem pequena. Quando se aplica um campo magnético ou elétrico como perturbação utiliza-se este mesmo método, a resposta linear do sistema é a parte imaginária de $\chi(\mathbf{q}, \omega)$.

Capítulo 4

Estudo de monocamadas ferromagnéticas com paredes de domínio unidimensionais.

O crescente aumento das possibilidades para o transporte de elétrons com spins selecionados em diferentes materiais e suas promissoras consequências físicas e tecnológicas tem produzido uma ampla variedade de pesquisas para entender o movimento eletrônico na presença de um comportamento ferromagnético. O interesse varia de semicondutores a ferromagnetos de metais de transição.

O efeito da magnetorresistência gigante em multicamadas ferromagnéticas [10] é um dos exemplos onde o transporte de spin é controlado pela dinâmica da magnetização sendo a causa deste grande interesse sobre as propriedades de transporte dependentes de spin e a dinâmica de magnetização em ferromagnetos.

Em meados da década de 1990 foram feitos experimentos [4,40] com sistemas ferromagnéticos bidimensionais e homogêneos no qual foram detectadas algumas diferenças nas propriedades de transporte de elétrons de condução mesmo em temperaturas muito baixas em relação ao gap de anisotropia (~ 150 K), foi proposto por [7,8] que esta diferença se deve a presença de magnons que se propagam nas paredes de domínio mesmo a baixas temperaturas, ao contrario do caso anisotrópico unidimensional onde temos apenas os modos de ondas de spin usuais com o gap. Em 2003 foram feitas amostras de camadas metálicas ferromagnética (SrRuO_3) [41] no qual foram crescidas com milhares de paredes de domínio com escala nanométrica (conforme Figura 4 (a)) e que sobrevivem mesmo em temperaturas baixíssimas ≈ 2 K, observaram nestas amostras os mesmos efeitos em suas propriedades de transporte como as citadas acima.

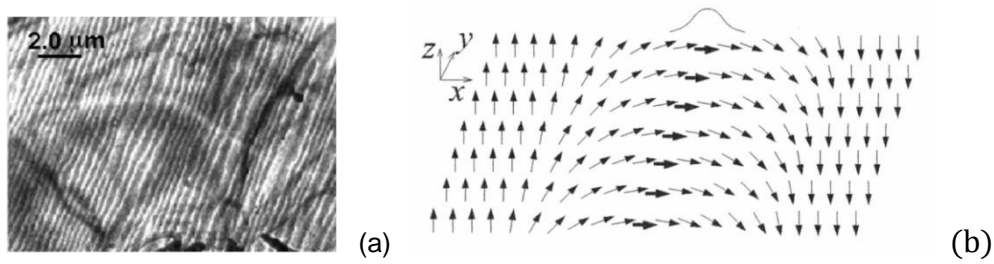


Figura 4. a) Amostra com milhares de paredes de domínio[41], (b) Esquema de uma parede de domínio em duas dimensões.

A descrição do sistema físico discutido anteriormente consiste em estudar o campo magnético numa rede de spins locais, supondo uma rede quadrada conforme a Figura 5.

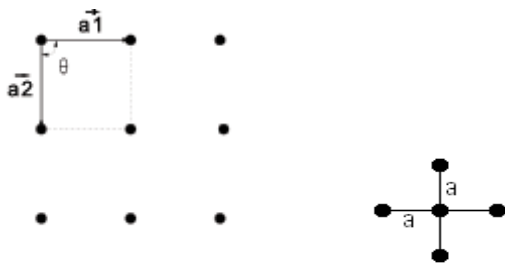


Figura 5. Esquema de uma rede cristalina quadrada.

Para obter o hamiltoniano deste sistema, somamos todos os sítios na rede quadrada na Figura 5 e depois usamos o método das derivadas finitas.

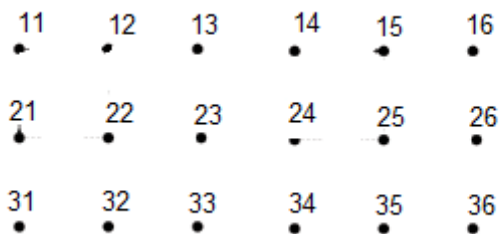


Figura 6. Sítios numa rede cristalina quadrada.

Então somando os sítios da figura acima temos

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{S}_{11} \cdot \mathbf{S}_{12} + \mathbf{S}_{12} \cdot \mathbf{S}_{13} + \mathbf{S}_{13} \cdot \mathbf{S}_{14} + \mathbf{S}_{14} \cdot \mathbf{S}_{15} + \mathbf{S}_{15} \cdot \mathbf{S}_{16} + \cdots + \mathbf{S}_{35} \cdot \mathbf{S}_{36} + \mathbf{S}_{11} \cdot \mathbf{S}_{21} + \mathbf{S}_{21} \cdot \mathbf{S}_{31} \\
 & \quad + \mathbf{S}_{12} \cdot \mathbf{S}_{22} + \mathbf{S}_{22} \cdot \mathbf{S}_{32} + \cdots + \mathbf{S}_{26} \cdot \mathbf{S}_{36} \\
 & = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Como pode ser notado, temos que somar todos os termos na horizontal e depois todos os termos na vertical, por isso foi usado a notação $\mathbf{S}_{11} \cdot \mathbf{S}_{12} \dots$ e assim por diante, para uma rede com N sítios podemos fazer uma generalização, ignorando os termos de fora ($\mathbf{S}_{ix,N+1} = \mathbf{S}_{ix,0} = \mathbf{S}_{N+1,iy} = \mathbf{S}_{0,iy} = 0$), podemos fazer um rearranjo na equação (4.1) obtendo a seguinte equação

$$\sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = \frac{1}{2} \sum_{ix=1}^N \sum_{iy=1}^N \mathbf{S}_{ix} [(\mathbf{S}_{ix+1,iy} + \mathbf{S}_{ix-1,iy}) + (\mathbf{S}_{ix,iy+1} + \mathbf{S}_{ix,iy-1})], \tag{4.2}$$

estamos trabalhando com uma rede quadrada, logo temos sítios na direção x e na direção y , por isso o uso da notação \mathbf{S}_{ix} , e \mathbf{S}_{iy} .

Para descrever este sistema bidimensional podemos usar o hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico como no capítulo 2

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - J\Delta \sum_i (S_i^z)^2, \tag{4.3}$$

as equações de movimento deste sistema são encontradas através da seguinte equação $\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{S}_i, \mathcal{H}]$, resolvendo este comutador e usando os resultados do apêndice B obtemos as seguintes equações

$$\frac{\partial S_i^z}{\partial t} = -JS \left\{ S_i^y \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^x}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^x}{\partial y^2} \right] - S_i^y \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^y}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^y}{\partial y^2} \right] \right\}, \quad (4.4. a)$$

$$\frac{\partial S_i^x}{\partial t} = -JS \left\{ S_i^z \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^y}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^y}{\partial y^2} \right] - S_i^y \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^z}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^z}{\partial y^2} \right] - 2\Delta S_i^y S_i^z \right\}, \quad (4.4. b)$$

$$\frac{\partial S_i^y}{\partial t} = -JS \left\{ S_i^x \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^z}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^z}{\partial y^2} \right] - S_i^z \left[a_x^2 \frac{\partial^2 S_i^x}{\partial x^2} + a_y^2 \frac{\partial^2 S_i^x}{\partial y^2} \right] + 2\Delta S_i^x S_i^z \right\}, \quad (4.4. c)$$

tínhamos suposto uma rede onde $a_x = a_y = a$, devemos passar estas equações de movimento para o contínuo (usando coordenadas esféricas), cuja as componentes são $\mathbf{S} = S(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$, chegamos à seguinte equação de movimento para a coordenada z (equação (4.4.a))

$$-\sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} = -JS^2 a^2 \nabla \cdot [\sin \theta \sin \varphi \nabla(\sin \theta \cos \varphi) - \sin \theta \cos \varphi \nabla(\sin \theta \sin \varphi)], \quad (4.5)$$

que resolvida fica

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = JS^2 a^2 [\sin \theta \nabla^2 \varphi + 2 \cos \theta \nabla \theta \cdot \nabla \varphi]. \quad (4.6)$$

Para encontrar a outra equação de movimento com relação à φ , fazemos uso da seguinte definição $S^\pm = S^x \pm iS^y$ (que são os operadores que levantam e abaixam a

projeção do spin na direção z) nas equações (4.4.b) e (4.4.c), fazendo a combinação entre elas, temos

$$\frac{\partial S^\pm}{\partial t} = -JSa^2 \left\{ (S^z \nabla^2 S^\pm - S^\pm \nabla^2 S^z) \pm i \frac{2\Delta}{a^2} S^z S^\pm \right\}. \quad (4.7)$$

Podemos fazer $S^\pm = S^x \pm iS^y = S \sin \theta (\cos \phi \pm i \sin \phi)$, os operadores de spin tomam a seguinte forma

$$S^\pm = \pm iS \sin \theta e^{\mp i\phi}, \quad (4.8)$$

derivando esta equação com relação ao tempo temos

$$\frac{\partial S^\pm}{\partial t} = \frac{1}{\tan \theta} S^\pm \frac{\partial \theta}{\partial t} \mp i S^\pm \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (4.9)$$

Substituindo na equação (4.7) e rearranjando todos os outros termos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} \mp i \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ & = -JSa^2 \left\{ \mp i S^z \left[\left(\frac{1}{\tan \theta} + \tan \theta \right) \nabla^2 - (\nabla \phi)^2 - 2 \frac{\Delta}{a^2} \right] - S^z [\nabla^2 \phi] + \frac{2}{\tan \theta} \nabla \theta \right. \\ & \left. \cdot \nabla \phi \right\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

como já temos a equação de movimento com relação à θ (equação (4.6)), ela pode ser substituída na equação (4.10) e depois de organizados os termos encontramos a equação de movimento com relação ao φ ,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -JS^2 a^2 \left[\frac{\nabla^2 \theta}{\sin \theta} - \cos \theta (\nabla \varphi)^2 - \frac{1}{\lambda^2} \cos \theta \right], \quad (4.11)$$

como já tínhamos

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = JS^2 a^2 [\sin \theta \nabla^2 \varphi + 2 \cos \theta \nabla \theta \cdot \nabla \varphi], \quad (4.6)$$

onde $\lambda = a/\sqrt{2\Delta}$ é o tamanho da parede de domínio com distância a entre os sítios vizinhos, estas são as duas equações de movimento em coordenadas esféricas encontradas a partir do hamiltoniano inicial e do comutador $\frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathcal{S}_i]$.

Vamos nos restringir nas equações (4.6) e (4.11) à $\varphi = \bar{\varphi}$ constante, ou seja, $\bar{\varphi} = 0$ e $\theta = \bar{\theta}(x)$, assim a equação (4.11) se torna

$$\frac{1}{\sin \bar{\theta}} \frac{d^2 \bar{\theta}}{dx^2} - \frac{1}{\lambda^2} \cos \bar{\theta} = 0, \quad (4.12)$$

que usando as condições de contorno

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \cos \bar{\theta} = \pm 1, \quad (4.13)$$

como pode ser visualizado na Figura 7.

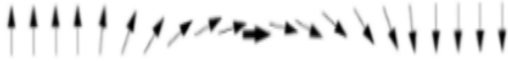


Figura 7. Uma parede de domínio separada no nosso sistema (Figura 4 b) nela notamos inversão dos spins apenas com relação a o ângulo θ .

A equação (4.13) pode ser integrada dando o seguinte

$$\cos \bar{\theta} = -\tanh \frac{x}{\lambda}, \quad (4.14)$$

colocando a origem do sistema no centro da parede de domínio temos

$$\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{r}) = (\sin \bar{\theta} \cos \bar{\varphi}, \sin \bar{\theta} \sin \bar{\varphi}, \cos \bar{\theta}) = \hat{x} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} - \hat{z} \tanh \frac{x}{\lambda}. \quad (4.15)$$

Agora procedemos para calcular as pequenas oscilações da configuração da parede de domínio dada pela equação (4.15). Para isto vamos adicionar às equações de movimento em coordenadas esféricas (equações (4.6) e (4.11) as pequenas flutuações em torno da magnetização de equilíbrio

$$\theta = \bar{\theta}(x) + \xi(\mathbf{r}, t), \quad \varphi = \bar{\varphi}(x) + \frac{\eta(\mathbf{r}, t)}{\sin \bar{\theta}}, \quad (4.16)$$

$\xi(\mathbf{r}, t) \ll 1$ e $\eta(\mathbf{r}, t) \ll 1$ são os modos de ondas de spin transversal e longitudinal se propagando na parede de domínio (Figura 3.a).

Como os spins variam sua direção de magnetização apenas em relação a θ (conforme Figura 7) e temos que $\bar{\varphi} = 0$, substituindo as flutuações das equações (4.16) em $\mathbf{S}(\mathbf{r}) = S(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$, obtemos $\mathbf{S} = \bar{\mathbf{S}} + \delta\mathbf{S}$, onde o primeiro termo do lado direito é devido à solução estática e o segundo termo é somente em função de ξ e η , ou seja, das flutuações. Vamos agora obter a partir das equações de movimento encontradas em coordenadas esféricas e das flutuações as novas equações de movimento começando por substituir as equações (4.16) nas equações (4.6) e (4.11), temos que fazer também uma análise de todos os termos destas equações. Começando por φ

$$\nabla\varphi = \frac{\eta}{\lambda} \sinh \frac{x}{\lambda} \hat{x} + \cosh \frac{x}{\lambda} \nabla\eta, \quad (4.17)$$

e sua derivada segunda fica

$$\nabla^2\varphi = \frac{\eta}{\lambda^2} \cosh \frac{x}{\lambda} + \frac{2}{\lambda} \sinh \frac{x}{\lambda} \frac{\partial\eta}{\partial x} + \cosh \frac{x}{\lambda} \nabla^2\eta. \quad (4.18)$$

Agora com relação à θ

$$\nabla\theta = \frac{1}{\lambda} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} \hat{x} + \nabla\xi, \quad (4.19)$$

a derivada segunda,

$$\nabla^2\theta = -\frac{1}{\lambda^2} \tanh \frac{x}{\lambda} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} + \nabla^2\xi. \quad (4.20)$$

Substituindo as equações (4.15), (4.16), (4.17) e (4.18) nas equações (4.6) e (4.11) e organizando seus termos obtemos

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \xi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -[\nabla^2 - V(x)]\eta(\mathbf{r}, t), \quad (4.21.a)$$

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\nabla^2 - V(x)]\xi(\mathbf{r}, t), \quad (4.21.b)$$

onde $j = \frac{Ja^2}{\hbar}$, e o potencial $V(x)$ é dado por

$$V(x) = \frac{1}{\lambda^2} \left[2 \tanh^2 \frac{x}{\lambda} - 1 \right], \quad (4.22)$$

que atua sobre ondas de spin (magnons) na parede de domínio, ele vai à $\frac{1}{\lambda^2}$ quando $x \rightarrow \pm\infty$, como pode ser visto na Figura 9, fazendo a combinação das equações (4.21.a) e (4.21.b), temos

$$\frac{\partial^2 \xi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -j^2 [\nabla^2 - V(x)]^2 \xi(\mathbf{r}, t), \quad (4.23.a)$$

$$\frac{\partial^2 \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -j^2 [\nabla^2 - V(x)]^2 \eta(\mathbf{r}, t). \quad (4.23.b)$$

Estas equações tem soluções do tipo $b_q(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, onde $b_q(\mathbf{r})$ é definido mais adiante. Elas preenchem o espaço de $\xi(\mathbf{r}, t)$ e $\eta(\mathbf{r}, t)$ e satisfazem a equação de autovalor

$$|\nabla^2 - V(x)|b_q(\mathbf{r}) = -\frac{\omega}{j}b_q(\mathbf{r}). \quad (4.24)$$

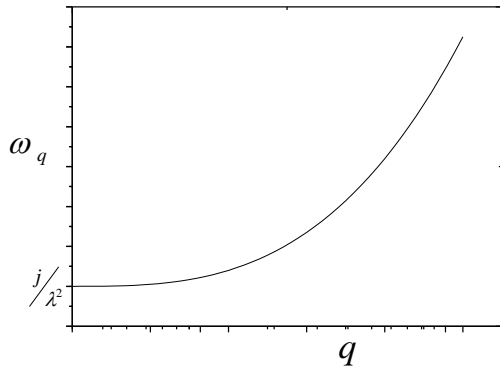
A solução da equação (4.24) tem a seguinte forma

$$b_q(\mathbf{r}) = e^{iq\mathbf{r}}, \quad (4.25)$$

com isto e fazendo a comparação da equação (4.22) e o seu gráfico obtemos que a relação entre ω_q e q é dada por

$$\omega_q = j \left[q^2 + \frac{1}{\lambda^2} \right], \quad (4.26)$$

onde $\frac{j}{\lambda^2}$ é o gap, ou seja a energia mínima para se excitar uma onda de spin, esta é a dispersão para os modos de ondas de spin usuais que influenciam as propriedades de transporte à temperaturas maiores que o gap de anisotropia, um esquema de gráfico para a equação (4.26) é mostrado na Figura 8. Os magnons se propagam tanto em um sistema unidimensional como em um sistema em duas dimensões. O espectro de magnons sobre uma parede de Bloch foi originalmente descrito por [42], por meio de um estudo da ressonância magnética nuclear na parede de domínio.



qq

Figura 8. Gráfico da dispersão de modos de onda de spin com gap na anisotropia (equação (4.26)).

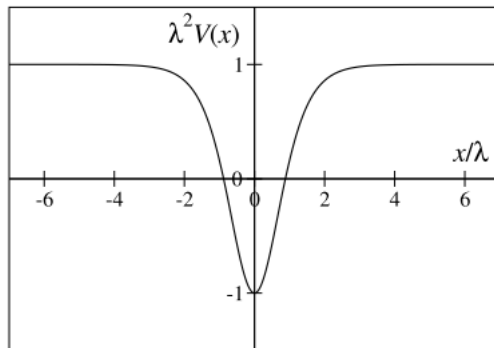


Figura 9. Função potencial que determina os auto-estados da equação (4.22) (potencial que atua nos magnons na parede de domínio).

Para encontrar os modos de ondas de spin sem o gap escrevemos a solução $b_q(\mathbf{r}) = f(x)g(y)$, substituindo na equação (4.24) obtemos

$$\left[\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{g} \frac{d^2 g}{dy^2} - V(x) = -\frac{\omega}{j} \right], \quad (4.27)$$

e fazendo a separação de variáveis vamos ficar com

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - V(x) \right] f(x) = \left[q^2 - \frac{\omega}{j} \right] f(x) = -l^2 f(x), \quad (4.28.a)$$

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} + q^2 \right] g(y) = 0, \quad (4.28.b)$$

em y a solução é imediata $g(y) = e^{iqy}$. Em uma dimensão $g(y)$ é constante, a equação (4.28.b) admite somente $q = 0$ como solução e $l^2 = \frac{\omega}{j}$ no lado direito da equação (4.28.a).

Esta supressão da coordenada y faz com que nosso sistema tenda a ter apenas uma dimensão e é precisamente a razão da inexistência de modos de ondas de spin sem gap se propagando na parede de domínio unidimensional. Para tentar fazer isto ficar um pouco mais claro vamos fazer $l = 0$ na equação (4.28.a), ou seja, tomando o modo zero e fazendo a derivada da equação (4.11) com $\theta = \bar{\theta}$ e $\varphi = \bar{\varphi}$ e depois derivando com relação à x , temos

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\lambda^2} (\sin^2 \bar{\theta} - \cos^2 \bar{\theta}) \right] \frac{d\bar{\theta}}{dx} = 0, \quad (4.29)$$

$\cos \bar{\theta} = -\tanh \frac{x}{\lambda}$, aqui estamos suprimindo as flutuações em y , podemos reescrevê-la da seguinte forma

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - V(x) \right] \frac{d\bar{\theta}}{dx} = 0. \quad (4.30)$$

Comparando as equações (4.30) e (4.28.a), e colocando $l = 0$, temos como solução

$$b_q(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = \frac{d\bar{\theta}}{dx} e^{i(qy-\omega t)} = \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} e^{i(qy-\omega t)}. \quad (4.31)$$

A solução em uma dimensão é obtida colocando $q = 0$ como anteriormente dito, para isto é necessário considerar $\omega = 0$ e $l = 0$, dando o modo zero que é estático, ou seja $b_q(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda}$, este modo é uma pequena deformação estática da estrutura da parede de domínio que é finita somente perto do seu centro. E em duas dimensões temos que para $l = 0$ a dispersão obtida é

$$\omega_q = jq^2. \quad (4.32)$$

Esta é a equação que descreve os modos de onda de spin sem gap que se propagam em um sistema com duas dimensões ou mais, na Figura 10 temos o seu gráfico de seu comportamento.

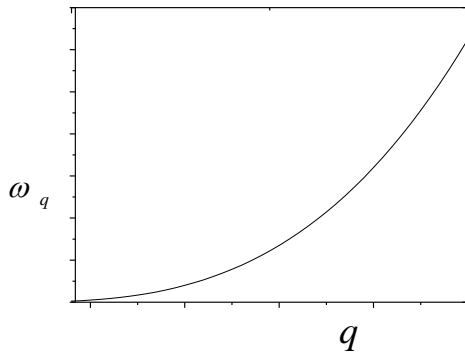


Figura 10. Gráfico dos modos de ondas de spin sem gap equação (4.32).

O modo zero está associado à direção x na equação (4.28.a) e torna-se uma propagação de onda de spin na direção y com sua dispersão dada pela equação (4.32), e localizada na parede de domínio. Isto só é possível em sistemas com duas dimensões ou mais. Agora encontraremos as soluções quantizadas para estes modos de ondas de spin, primeiramente temos que $\psi^\pm = \xi \pm i\eta$ e assim $\xi = \frac{1}{2}(\psi^+ + \psi^-)$ e $\eta = \frac{1}{2i}(\psi^+ - \psi^-)$, com estas relações podemos fazer a combinação das equações (4.21.a) e (4.21.b) e encontrar

$$\frac{i}{j} \frac{\partial \psi^\pm}{\partial t} = \pm[\nabla^2 - V(x)]\psi^\pm. \quad (4.33)$$

A solução geral é escrita da forma (feito no apêndice B)

$$\xi(\mathbf{r}, t) = \sum_q \left(A_q^\xi u_q(\mathbf{r}) + A_q^{*\xi} u_q^*(\mathbf{r}) \right) c'_q, \quad (4.34.a)$$

$$\eta(\mathbf{r}, t) = \sum_q \left(A_q^\eta u_q(\mathbf{r}) - A_q^{*\eta} u_q^*(\mathbf{r}) \right) c'_q, \quad (4.34.b)$$

onde os $A_q^{(\xi, \eta)}$ são amplitudes complexas e dependentes do tempo ($\propto e^{-i\omega t}$) e c'_q é uma constante real. Substituindo estes resultados nas equações (4.19.a) e (4.19.b) e fazendo uso da equação (4.24) encontramos a relação entre os campos transversal e longitudinal

$$\eta[gy] = \xi \left[qy - \frac{\pi}{2} \right]. \quad (4.35)$$

Estes modos podem ser importantes a baixas temperaturas e provém das paredes de domínio da amostra, assim os domínios magnéticos são a fonte da existência destes modos. Sabemos que se a anisotropia for positiva as paredes de domínio naturais tendem a desaparecer quando a amostra estiver abaixo de uma temperatura crítica, este fato limita a existência de magnons sem gap abaixo desta temperatura. No entanto sistemas em 2D com grandes aplicações em spintrônica foram fabricados [41] permitindo que pudessem ser feitos milhares de paredes de domínio em monocamadas ferromagnéticas abaixo da temperatura crítica. Estas amostras apresentam uma resistividade diferente do que é conhecido pela literatura [5,6,37], pode ser que esta diferença exista por causa da presença destes magnons previstos em [7,8] que ficam dentro da parede e se propagam abaixo da temperatura crítica do gap de anisotropia em sistemas com 2D ou mais.

Capítulo 5

Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

Neste capítulo é estudado um sistema bidimensional ferromagnético em que temos o interesse de entender como respondem a uma perturbação dinâmica, os modos de ondas de spin sem gap. O sistema está esquematizado na Figura 11. Ele consiste de algum arranjo que faz gerar um campo magnético com uma intensidade muito pequena na direção z da amostra (perpendicular a monocamada). As frequências de ressonância dependentes da interação efetiva J usada no modelo, que por sua vez pode ser estimada a partir da temperatura crítica da transição ferromagnética. Devido a isto, espera-se diferentes regiões de frequência dependendo da origem do material investigado. Portanto, o arranjo ilustrado na Figura 11 é apenas sugestivo, o campo oscilante pode, por exemplo, ser uma das componentes de um campo eletromagnético (luz) incidindo em um experimento de absorção. Para tratar a perturbação fazemos o uso da teoria de resposta linear, descrita no capítulo 3, que é muito utilizada quando precisamos de uma solução formal para um sistema físico sob a ação de uma pequena perturbação [29,31,38]. Para resolver o problema, ao hamiltoniano adicionamos um termo de interação dos spins locais com o campo magnético que esta sendo aplicado, que agora passa ter a seguinte forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - J\Delta \sum_i (S_i^z)^2 - \mu_B B(t) \sum_i S_i^z, \quad (5.1)$$

onde $B(t)$ é o campo magnético no sítio i , e μ_B é o magnéton de Bohr ($\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$) que faz o acoplamento entre o spin local e o campo. Neste trabalho é usado $B(t) = B^z$, onde z é a direção perpendicular à monocamada.

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

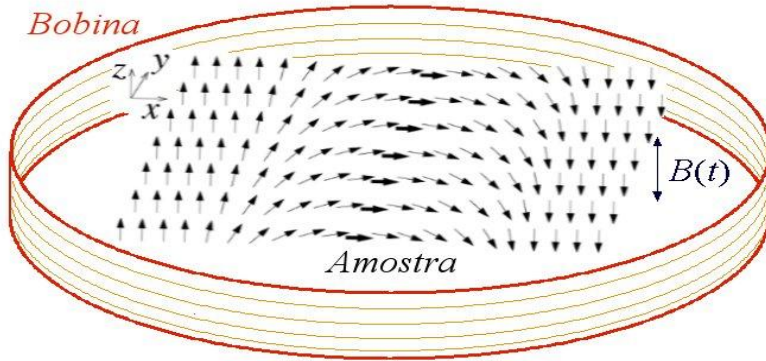


Figura 11: Ilustração de um arranjo hipotético para aplicação de um campo oscilante a uma monocamada ferromagnética.

Este novo problema pode ser resolvido da mesma forma que no capítulo 4, resolvendo o comutador $\frac{dS_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, S_i]$, usando coordenadas esféricas e derivadas parciais, chega-se às equações de movimento que são parecidas, pois como o campo magnético é aplicado na direção z , este comuta com o S_z na equação de movimento, assim $\frac{\partial S_z}{\partial t}$ é o mesmo que o estudado no capítulo 4 e conseqüentemente $\frac{\partial \theta}{\partial t}$, assim temos apenas um termo a mais nas equações de movimento nas direções x e y devido ao campo, portanto resolvendo da mesma forma obtemos

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = JS^2 a^2 [\sin \theta \nabla^2 \varphi + 2 \cos \theta \nabla \theta \cdot \nabla \varphi], \quad (5.2.a)$$

que é exatamente a mesma equação (4.6) do capítulo 4, e

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -JS^2 a^2 \left[\frac{\nabla^2 \theta}{\sin \theta} - \cos \theta (\nabla \varphi)^2 - \frac{1}{\lambda^2} \cos \theta - \frac{\mu B^z}{Ja^2 S} \right], \quad (5.2.b)$$

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

que difere apenas por $\left(\frac{\mu B^2}{Ja^2S}\right)$ na equação (5.2.b) que é devido ao campo aplicado. Novamente, tomando a solução como dada pela equação (4.16) para as flutuações em torno da magnetização de equilíbrio, obtemos, em primeira ordem,

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \xi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -[\nabla^2 - V(x)]\eta(\mathbf{r}, t), \quad (5.3. a)$$

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\nabla^2 - V(x)]\xi(\mathbf{r}, t) - \frac{\mu B(t)}{Ja^2} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda}, \quad (5.3. b)$$

que formam um conjunto de equações diferenciais não homogêneas. Note que elas diferem das equações (4.19.a) e (4.19.b) apenas pelo termo que contém o campo magnético (último termo da equação (5.3.b)). A solução destas equações para a parte homogênea, ou seja, sem a presença do termo com o campo magnético é obtida no Apêndice B. Neste vamos encontrar a solução não homogênea, usando funções de Green dependentes do tempo e da posição.

Na equação (5.3.b) fazemos $B(t) = B_0 \Theta(L_y - y) \Theta(y) e^{i\omega t}$, onde Θ é a função degrau, cujo produto aqui usado está ilustrado na Figura 12. Esta escolha tem o intuito de limitar as dimensões da amostra, a região em que o campo é não nulo. Assim o último termo da equação (5.3.b) tem a seguinte forma,

$$F(\mathbf{r}, t) = F_0 \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} \Theta(L_y - y) \Theta(y) e^{i\omega t}, \quad (5.4)$$

onde, $F_0 = -\frac{\mu B_0}{Ja^2}$.

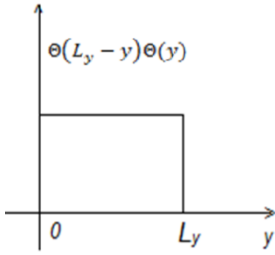


Figura 12. Ilustração do produto entre as funções degrau usadas para limitar a região de atuação do campo.

Para a parte homogênea ($B = 0$), temos como solução modos que podem ser escritos em termos de autoestados, numa série cujas amplitudes são $A_q = \Gamma_q e^{i\omega t}$ (conforme apêndice B), onde Γ_q é uma constante de normalização e terá seu valor encontrado mais a frente.

Como veremos adiante, poderemos representar o resultado da perturbação introduzida pelo pequeno campo magnético oscilante em termos dos autoestados não perturbados, com amplitudes $A'_q = A_q + \Delta A_q$, que nos dará a resposta para cada modo.

Devido à perturbação que está sendo aplicada ao sistema, temos que encontrar a solução $\psi_{\pm} = \psi_{\pm}^0 + \delta\psi_{\pm}$, onde $\delta\psi_{\pm} = \delta\xi + i\delta\eta$, e o primeiro termo é a solução da parte homogênea, conforme apêndice C. Substituindo $\delta\xi$ e $\delta\eta$ nas equações (5.3.a) e (5.3.b) e combinando estas equações temos

$$[\nabla^2 - V(x)]\delta\psi_{\pm} \pm \frac{i}{j} \frac{\partial \delta\psi_{\pm}}{\partial t} = -F(\mathbf{r}, t). \quad (5.5)$$

Nesta equação, pode-se aplicar as transformadas de Fourier dependentes do tempo que tem a seguinte forma,

$$F_{\pm}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\pm i\omega t} F(\mathbf{r}, t) \text{ e } \overline{\delta\psi_{\pm}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\pm i\omega t} \delta\psi_{\pm}, \text{ a equação (5.5) se torna,}$$

$$\left[K + \frac{\omega}{j} \right] \overline{\delta\psi_{\pm}} = -F_{\pm}(\mathbf{r}, \omega), \quad (5.6)$$

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

onde $K = [\nabla^2 - V(x)]$ e $\overline{\delta\psi_{\pm}}$ tem a seguinte expansão em termos das autofunções de K,

$$\overline{\delta\psi_{\pm}} = 2 \sum_q \varphi_q^{\pm}(\omega) u_{\pm q}(\mathbf{r}), \quad (5.7)$$

onde $u_{\pm q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{\lambda\pi}} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} e^{\pm iqy}$.

Aplicando K aos dois lados da equação (5.7), obtemos

$$K \overline{\delta\psi_{\pm}} = -2 \sum_q \varphi_q^{\pm}(\omega) \left(\frac{\omega_q}{j} \right) u_{\pm q}(\mathbf{r}), \quad (5.8)$$

e lembrando que $\omega_q = jq^2$ (encontrado no capítulo 4 para os modos de ondas de spin sem gap), substituindo a equação (5.8) em (5.6), ficamos com

$$- \sum_q 2 \frac{(\omega_q - \omega)}{j} \varphi_q^{\pm}(\omega) u_{\pm q}(\mathbf{r}) = -F_{\pm}(\mathbf{r}, \omega). \quad (5.9)$$

Integrando, obtemos

$$- \sum_{q'} \frac{2(\omega_{q'} - \omega)}{j} \varphi_{q'}^{\pm}(\omega) \int d\mathbf{r} u_{\mp q'}(\mathbf{r}) u_{\pm q'}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} u_{\mp q}(\mathbf{r}) F_{\pm}(\mathbf{r}, \omega), \quad (5.10)$$

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

e podemos passar a soma do lado esquerdo para uma integral $(\sum_{q'} = \frac{L_y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq')$, temos aqui também que a integral $\int d\mathbf{r} u_{\mp q}(\mathbf{r}) u_{\pm q'}(\mathbf{r}) = \delta(q - q')$, e fazendo uso da delta de Dirac, temos que $\int_{-\infty}^{+\infty} dq' \delta(q - q') = 1$, desta forma a equação (5.10) é levada ao seguinte par de equações

$$\varphi_q^+ = -\frac{j\pi}{2(\omega_q - \omega)L_y} \int d\mathbf{r} u_q^*(\mathbf{r}) F_+(\mathbf{r}, \omega), \quad (5.11.a)$$

$$\varphi_q^- = \frac{j\pi}{2(\omega_q - \omega)L_y} \int d\mathbf{r} u_q(\mathbf{r}) F_-(\mathbf{r}, \omega), \quad (5.11.b)$$

como φ^\pm é um numero real podemos fazer $\varphi^* = \varphi^-$, assim temos

$$\varphi_q^+(\omega) = \varphi_q(\omega) = \frac{\pi j U_q(\omega)}{2(\omega_q - \omega)L_y}, \quad (5.12)$$

fazendo o uso da transformada inversa de Fourier temporal temos

$$U_q(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d\mathbf{r} u_q^*(\mathbf{r}) e^{i\omega t} F(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} U_q(t), \quad (5.13)$$

onde $U_q(t) = \int d\mathbf{r} u_q^*(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}, t)$, $F(\mathbf{r}, t)$ é definida pela equação (5.4). Como é o campo magnético que está perturbando o sistema, podemos substituir a equação (5.13) na solução para as flutuações dos modos de ondas de spin, assim temos

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

$$\overline{\delta\xi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_q \frac{j\pi}{2(\omega_q - \omega)L_y} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (U_q(t)e^{i\omega t} u_q + U_q^*(t)e^{-i\omega t} u_q^*), \quad (5.14. a)$$

$$\overline{\delta\eta} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i} \sum_q \frac{j\pi}{2(\omega_q - \omega)L_y} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (U_q(t)e^{i\omega t} u_q - U_q^*(t)e^{-i\omega t} u_q^*). \quad (5.14. b)$$

Aplicando novamente a transformada de Fourier temporal, as equações para as flutuações de ondas de spin tomam a forma

$$\delta\xi = \sum_q \frac{\pi j U_q(\omega)}{2(\omega_q - \omega)L_y} u_q(\mathbf{r}) + \frac{\pi j U_q^*(\omega)}{2(\omega_q - \omega)L_y} u_q^*(\mathbf{r}), \quad (5.15. a)$$

$$\delta\eta = -i \sum_q \frac{\pi j U_q(\omega)}{2(\omega_q - \omega)L_y} u_q(\mathbf{r}) - \frac{\pi j U_q^*(\omega)}{2(\omega_q - \omega)L_y} u_q^*(\mathbf{r}). \quad (5.15. b)$$

Resolvendo a integral da equação (5.13) encontramos a expressão para $U_q(t)$, e a substituímos nas equações (5.15.a) e (5.15.b)

$$U_q(t) = \frac{f_0(t)}{2\sqrt{\lambda\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \operatorname{sech}^2 \frac{x}{\lambda} \int_0^L dy e^{-iqy} = -\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{(e^{-iqL_y} - 1)}{iq} f_0(t), \quad (5.16)$$

onde $f_0(t) = -\frac{\mu_B B(t)}{J a^2} = \frac{\mu_B B(t)}{j \hbar}$.

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

Esta última equação consiste de uma parte estática e o termo que encontramos que é a flutuação devida ao campo aplicado. Este termo é denotado por ΔA_q e tem a seguinte forma,

$$\Delta A_q = \frac{1}{c'_q} \frac{\pi j U_q(t)}{(\omega_q - \omega) L_y}, \quad (5.17)$$

onde $c'_q = 2\sqrt{\lambda\pi}c_q$ e $c_q = \frac{a}{2} \frac{1}{\sqrt{\lambda L_y}}$ é uma constante de normalização usada mais a frente.

Substituindo a equação (5.16) na (5.17) ficamos com

$$\Delta A_q = -\frac{jf_0(t)(e^{-iqL_y} - 1)}{2iqc_q L_y (\omega_q - \omega)}. \quad (5.18)$$

O sistema todo é descrito da seguinte forma

$$A_q + \Delta A_q = \Gamma_q e^{i\omega t} + \Delta A_q, \quad (5.19)$$

$$A_q + \Delta A_q = \left\{ 1 - \frac{jf_0(t)(e^{-iqL_y} - 1)e^{-i\omega t}}{2iqc_q L_y (\omega_q - \omega)\Gamma_q} \right\} A_q, \quad (5.20)$$

onde Γ_q é um fator de normalização e tem a seguinte forma

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

$$\Gamma_q = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{L_y}} [\langle u_q | \xi_0(\mathbf{r}, 0) \rangle + i \langle u_q | \eta_0(\mathbf{r}, 0) \rangle], \quad (5.21)$$

$$c_q \Gamma_q = \frac{1}{4L_y} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \langle u_q | \psi_0^+(\mathbf{r}, 0) \rangle. \quad (5.22)$$

Substituindo na equação (5.20) obtém-se

$$A_q + \Delta A_q = \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{2j f_0(t) (e^{-iqL_y} - 1) e^{-i\omega t}}{iq(\omega_q - \omega) \langle u_q | \psi_0^+(\mathbf{r}, 0) \rangle} \right\} A_q, \quad (5.23)$$

e fazendo $f_q(t) = -\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{2j f_0(t) (e^{-iqL_y} - 1) e^{-i\omega t}}{iq(\omega_q - \omega) \langle u_q | \psi_0^+(\mathbf{r}, 0) \rangle}$, esta expressão é a flutuação em torno do equilíbrio, a solução completa sendo dada então por

$$A_q + \Delta A_q = [1 + f_q(t)] A_q. \quad (5.24)$$

Para encontrarmos o valor de Γ_q precisamos fazer uma integração no primeiro termo da equação (5.21), escolhendo arbitrariamente o primeiro termo de (5.21), temos $\langle u_q | \xi_0(\mathbf{r}, 0) \rangle = \frac{L_y}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$, assim $\frac{2}{L_y} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \langle u_q | \xi_0(\mathbf{r}, 0) \rangle = 1$ e $\langle u_q | \eta_0(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$, pois Γ_q é um fator de normalização, a equação (5.23) toma a forma

$$A_q + \Delta A_q = \left\{ 1 - \frac{4j f_0(t) (e^{-iqL_y} - 1) e^{-i\omega t}}{iqL_y(\omega - \omega_q)} \right\} A_q, \quad (5.25)$$

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

temos definido que $f_0(t) = -\frac{\mu_B B(t)}{J\alpha^2} = \frac{\mu_B B(t)}{\hbar j}$, substituindo na equação (5.25) ficamos com

$$A_q + \Delta A_q = \left\{ 1 + \frac{4\mu_B B(t)(e^{-iqL_y} - 1)e^{-i\omega t}}{iqL_y \hbar(\omega - \omega_q)} \right\} A_q, \quad (5.26)$$

e assim

$$f_q(t) = \frac{4\mu_B B(t)(1 - e^{-iqL_y})e^{-i\omega t}}{iqL_y \hbar(\omega - \omega_q)}. \quad (5.27)$$

Como podemos notar, se retirarmos o campo magnético externo teremos $f_q(t) = 0$, e como solução apenas o primeiro termo do lado direito da equação (5.26). Esta última expressão pode ser separada em uma parte real e uma parte imaginária, porém antes adicionamos uma frequência extra no denominador da equação (5.27) para podermos depois plotarmos os gráficos dos modos de ondas de spin, assim temos

$$f_q(t) = \frac{4\mu_B(1 - e^{-iqL_y})B(t)e^{-i\omega t}}{iqL_y \hbar(\omega - \omega_q + i\Omega)}, \quad (5.28)$$

sendo $i\Omega$ a frequência adicionada “à mão”. Fazendo uma transformada de Fourier temos

$$f_q(\omega) = \frac{4\mu_B B_0(1 - e^{-iqL_y})}{iqL_y \hbar(\omega - \omega_q + i\Omega)}. \quad (5.29)$$

Esta equação pode ser separada em uma parte real e outra parte imaginária a fim de encontrarmos o fator de forma dinâmico do sistema

$$\Re[f_q(\omega)] = -\frac{4\mu_B B_0}{qL_y \hbar} \left(\frac{\Omega(1 - \cos qL_y) + \sin qL_y (\omega - \omega_q)}{(\omega - \omega_q)^2 + \Omega^2} \right), \quad (5.30)$$

$$\Im[f_q(\omega)] = -\frac{4\mu_B B_0}{qL_y \hbar} \left(\frac{(\omega - \omega_q)(1 - \cos qL_y) - \Omega \sin qL_y}{(\omega - \omega_q)^2 + \Omega^2} \right). \quad (5.31)$$

Como podemos notar estas duas equações dependem da intensidade do campo magnético que está sendo aplicado, fazendo o uso de teoria de resposta linear sabemos que a parte real de um sistema como este corresponde à parte reativa, já a parte dissipativa, ou seja, quando o sistema perde energia emitindo magnons é a parte imaginária, neste caso a equação (5.31) é o resultado procurado, ela é a função resposta ao campo aplicado em termos dos autoestados do sistema como um todo. Esta equação representa o espectro das excitações causadas pela perturbação externa aplicada ao sistema (neste caso, o campo magnético oscilante), a equação (5.31) está relacionada à densidade de correlações neste sistema que é um sistema de muitos corpos (spins).

Logo à frente nas Figuras (13-16 e 18) temos alguns gráficos da equação (5.31), tomamos o módulo desta equação com a intenção de podermos enxergar com mais nitidez os pontos onde há ressonância, na Figura 17 é apresentado um gráfico de como é o comportamento real sem tomarmos o módulo da equação (5.31). São considerados alguns valores de campo aplicado com uma intensidade “baixa” numa amostra de SiRuO₃ com $L_y = 2 \cdot 10^{-6}$ metros (mesmo tamanho que em [40]), para a frequência que foi colocada “a mão” foi dado um valor bem pequeno ≈ 10 Hz, a distância média entre os sítios vizinhos é de mais ou menos 10^{-10} metros e uma interação de troca com o valor de

mais ou menos $J = 4,2 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$ [40]. Notamos também que com o aumento da frequência, vai havendo uma diminuição da intensidade do pico de $f_q(\omega)$ quando se aproxima da ressonância, ou seja, quando $\omega = \omega_q$. Logo abaixo temos os gráficos para o módulo da parte imaginária de $f_q(\omega)$.

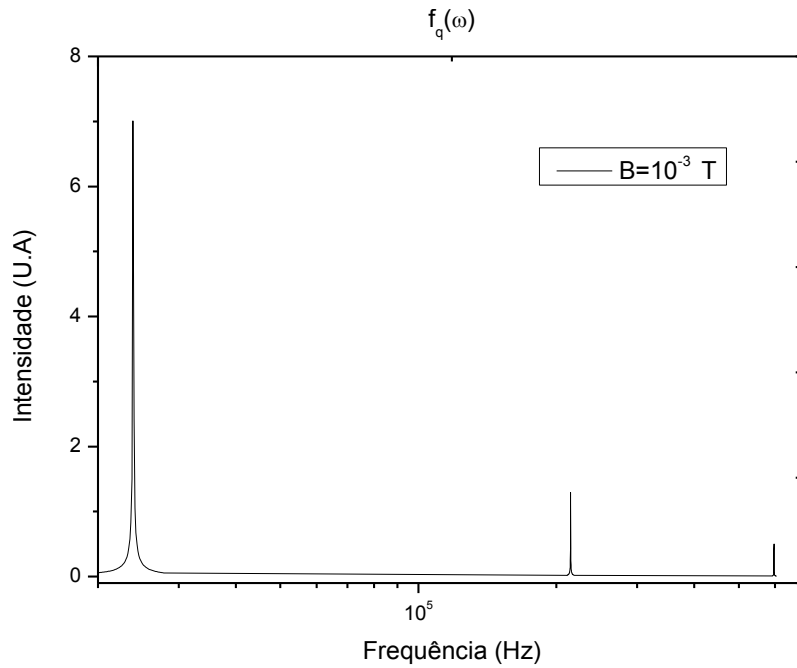


Figura 13. Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-3} Tesla aplicado.

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

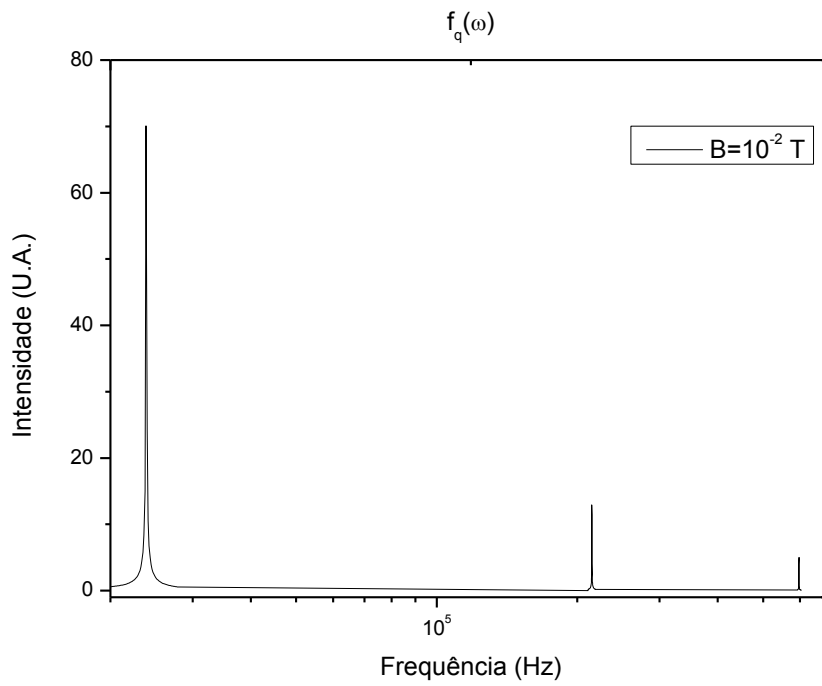


Figura 14. Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-2} Tesla aplicado.

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

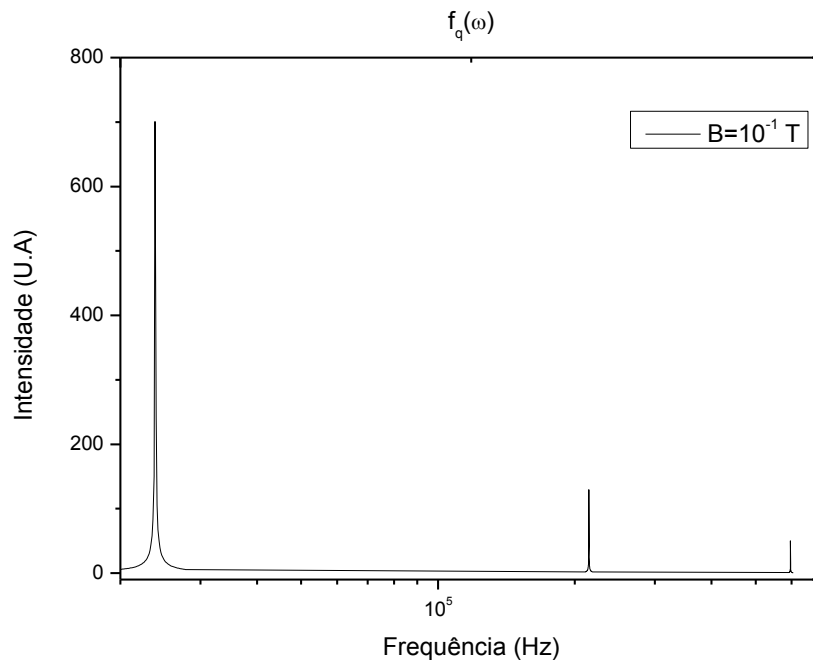


Figura 15. Picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-1} Tesla aplicado.

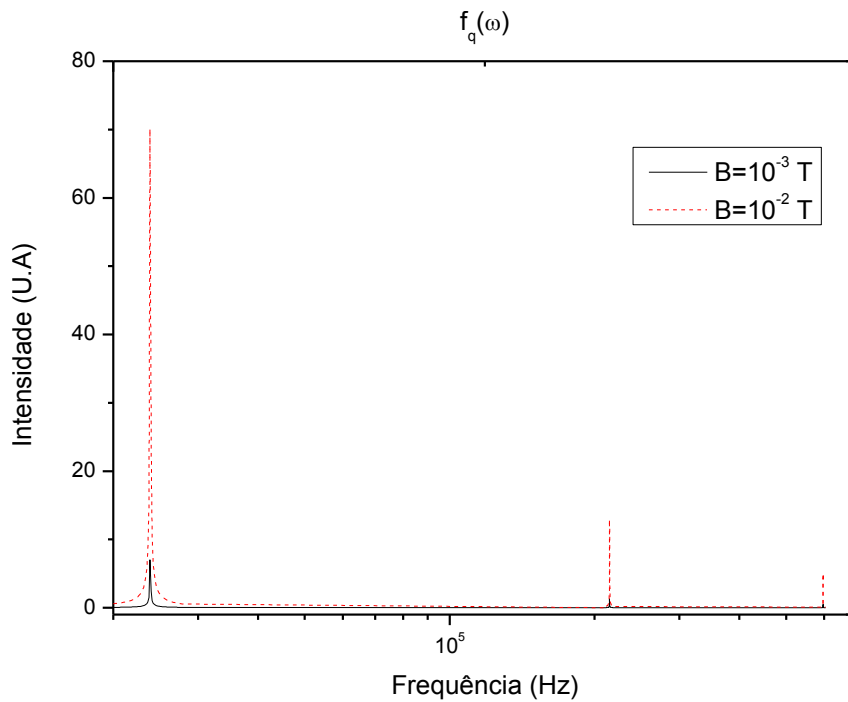


Figura 16. Comparação entre a intensidade dos picos de ressonância estimados para o nosso sistema de acordo com a equação (5.31) com um campo de 10^{-3} Tesla aplicado (linha preta contínua) e com um campo de 10^{-2} Tesla aplicado (linha vermelha pontilhada).

Nestes gráficos as frequências de ressonância estão estimadas em aproximadamente 23868,4 Hz no primeiro pico, $2,15 \times 10^5$ Hz para o segundo, e $5,97 \times 10^5$ Hz para o terceiro, do quarto pico em diante não coloquei nos gráficos, pois as frequências de ressonância são muito altas e os gráficos ficariam de difícil visualização.

Como podemos notar com o aumento da frequência na equação (5.31) o valor da intensidade máxima do pico diminui. Também notamos que quanto maior a intensidade do campo aplicado mais intenso é o pico na frequência de ressonância.

O próximo gráfico mostra o comportamento real da amostra, ou seja, sem tomar o módulo.

Capítulo 5. Resposta de uma monocamada com parede de domínio a um campo magnético oscilante.

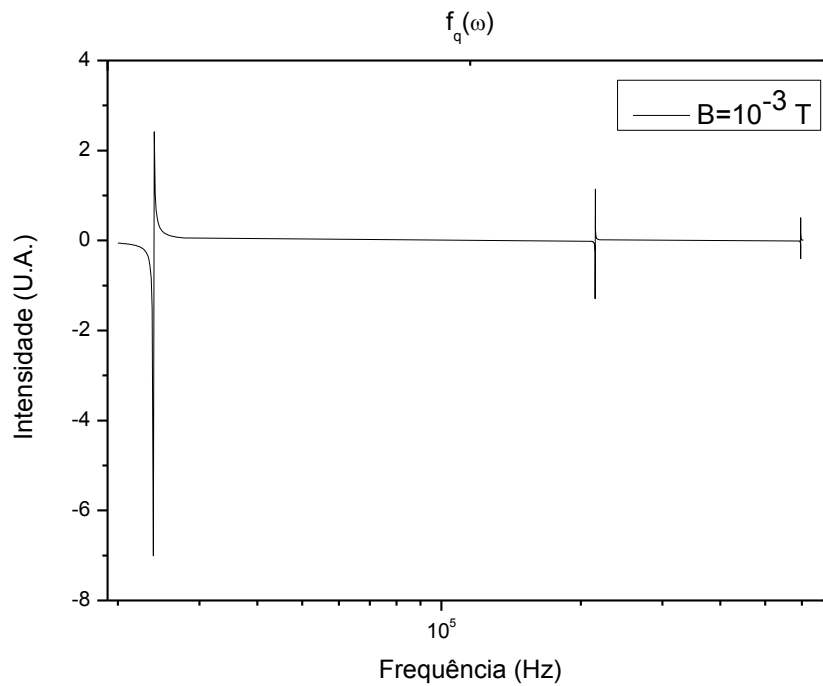


Figura 17. Gráfico do comportamento real da amostra depois de um campo aplicado na forma de uma pequena perturbação conforme a equação (5.31).

O gráfico a seguir mostra a diferença entre uma amostra em que foi aplicado um pequeno campo $B_0 = 10^{-3}$ T e uma sem a aplicação de campo magnético.

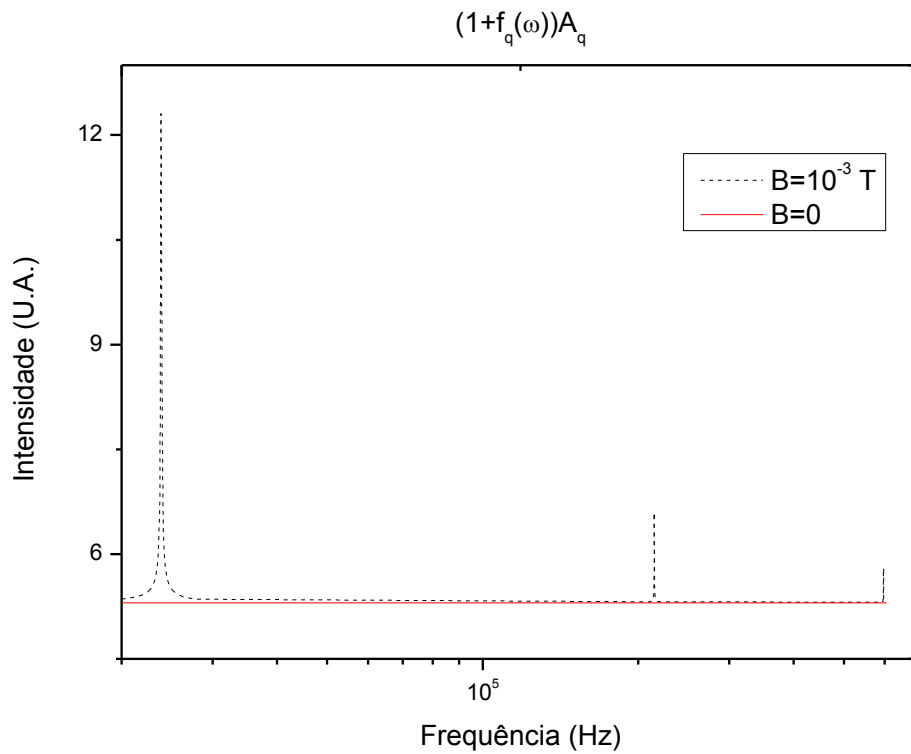


Figura 18. Diferença entre a amostra com uma perturbação aplicada (linha preta e pontilhada) e sem a perturbação (linha vermelha linear e contínua).

Neste gráfico a linha preta contínua mostra o comportamento da amostra sem a presença do campo, equação (5.27), que é o primeiro termo da esquerda, ou seja, A_q e a linha vermelha pontilhada é a soma $A_q + \Delta A_q$, mostrando que mesmo para um campo bem pequeno o sistema responde emitindo magnons com alta intensidade na frequência de ressonância.

Capítulo 6

Conclusões

O modelo de Heisenberg se destaca no estudo do magnetismo com origem em momentos magnéticos localizados.

No segundo capítulo é feita uma pequena apresentação da teoria básica do modelo de Heisenberg para descrever a interação de troca entre sítios de spins vizinhos (equação (2.10)). Também é feita uma discussão de que a interação entre átomos magnéticos não é suficiente para explicar a origem do magnetismo em sólidos como afirmou P. Weiss [1]. O magnetismo tem origem nas interações Coulombianas entre os sítios e também através do princípio de exclusão de Pauli [25], ou seja, ele é um efeito puramente quântico. Neste modelo também vimos que não é necessário fornecer energia para mudarmos a direção de magnetização em uma rede de spins homogênea, pois o hamiltoniano é isotrópico com relação à direção dos spins. Por fim é feita uma pequena discussão sobre modelo de Heisenberg com a presença de domínios magnéticos e sobre as paredes de domínio.

No terceiro capítulo é feita uma breve introdução a teoria de resposta linear e discutido como ela é usada no estudo de sistemas físicos, pois na maioria das vezes quando queremos saber algo sobre um sistema qualquer incidimos algum tipo de perturbação neste sistema e medimos a resposta apresentada por ele à perturbação. Os capítulos 2 e 3 são uma breve revisão teórica que tem como objetivo introduzir alguns os conceitos e idéias básicas que estão por traz da teoria de que se trata esta dissertação.

No quarto capítulo é feito um estudo da propagação de ondas de spin (magnons) em sistemas ferromagnéticos bidimensionais com paredes de domínio conforme [7,8]. Estas ondas de spin têm grande importância na fabricação de dispositivos spintrônicos, por isso seu estudo se tornou de grande interesse nos últimos anos. Como mostra a literatura, os magnons precisam de certa energia (gap) para se propagarem na parede, porém em meados da década de 1990 [4] foram fabricadas amostras ferromagnéticas com paredes de domínio em duas dimensões que mesmo a temperaturas mais baixas que o gap de anisotropia (~150 K) apresentam valores como, por exemplo, de calor

específico e da resistividade que diferem da literatura [5,6,37] conhecida até então. Através de um estudo a partir do modelo de Heisenberg anisotrópico por [7,8], chegou-se à conclusão de que a razão de existir estas diferenças pode ser devida a presença de magnons sem gap que se propagam em uma dimensão nas paredes de domínio com duas dimensões ou mais.

No quinto capítulo aplicamos um campo magnético a este sistema ferromagnético bidimensional a fim de obter os picos de ressonância na forma de uma resposta a esta perturbação aplicada em um sistema como o da Figura 11. Usamos neste capítulo as transformadas de Fourier temporal, funções de Green além da teoria de resposta linear que é introduzida no capítulo 3 a fim de encontrar o fator de forma dinâmico deste sistema (resposta linear ao campo).

Como se sabe de um sistema elétrico como o proposto neste trabalho, quando o campo oscilante atinge a frequência de ressonância da amostra, esta interage com o campo absorvendo energia deste e emitindo magnons com alta intensidade de energia. Podemos notar pelos gráficos apresentados no capítulo 5 que a resposta à perturbação depende da intensidade do campo que incide no material e causa modificações nas equações para as flutuações de ondas de spin tanto transversal como longitudinal, como podemos notar as diferenças entre as equações (4.34.a) e (4.34.b) do capítulo 4 e as equações (5.15.a) e (5.15.b) do capítulo 5. Fazendo o uso de teoria de resposta linear temos que a resposta perturbação aplicada se dá pela parte dissipativa que corresponde à parte imaginária, ou seja, a equação (5.31). As modificações nas equações de propagação de ondas de spin podem causar alguma influência no transporte de elétrons de condução na parede de domínio [4,41], causando algum tipo de interferência no funcionamento de aparelhos spintrônicos que sofrem a ação de campos magnéticos. Este trabalho pode servir talvez como uma motivação para futuros experimentos nesta área.

Apêndice A

Derivadas Finitas.

Agora é introduzido o conceito de derivada finita que é usado no Capítulo 4, para encontrar as equações de movimento para as paredes de domínio, inicialmente supomos uma rede e spins infinita, temos

$$2 \frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \quad (\text{A. 1})$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad (\text{A. 2})$$

onde h é a distância entre os sítios, a derivada segunda fica

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x+2h) + f(x-2h) - 2f(x)}{4h^2}, \quad (\text{A. 3})$$

tomando $2h = \rho$ e substituindo na equação (A.3) obtemos

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x+\rho) + f(x-\rho) - 2f(x)}{\rho^2}. \quad (\text{A. 4})$$

Esta é equação para os momentos magnéticos de spin conforme a equação (4.2) supondo uma rede quadrada onde os spins estão a uma distância a uns dos outros, temos a seguinte forma

$$\mathbf{S}_{ix+1} + \mathbf{S}_{ix-1} = a_x^2 \frac{\partial^2 \mathbf{S}_{ix}}{\partial x^2} + 2\mathbf{S}_{ix}. \quad (\text{A.5})$$

O mesmo pode-se aplicar na coordenada y , assim a soma sobre todos os momentos de spin tem a seguinte forma

$$\sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = \sum_i \mathbf{S}_i (a^2 \nabla^2 \mathbf{S}_i + 2d\mathbf{S}_i), \quad (\text{A.6})$$

d é a dimensão da rede de spin (1,2,3), que neste caso é 2 (estamos lidando com uma rede em duas dimensões), passando essa soma para uma integral temos

$$\sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \left(\mathbf{S} \nabla^2 \mathbf{S} + 4 \frac{\mathbf{S}^2}{a^2} \right), \quad (\text{A.7})$$

esta passagem do meio discreto para o contínuo é de grande importância para encontrar as equações de movimento no sistema de monocamadas ferromagnéticas bidimensionais, pois temos primeiro que encontrar as equações de movimento em coordenadas esféricas para depois encontrar seus modos de ondas de spin com suas respectivas flutuações.

Apêndice B

Solução da parte das equações (4.39.a) e (4.39.b) e da parte homogênea das equações (5.3.a) e (5.3.b).

As equações de movimento são

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \xi_0}{\partial t} = -(\nabla^2 - V(x))\eta_0, \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \eta_0}{\partial t} = (\nabla^2 - V(x))\xi_0, \quad (\text{B.2})$$

conforme encontrado em [7,8].

Podemos agora combinar estas duas equações através dos operadores de levantamento e abaixamento,

$$\psi_0^\pm = \xi_0 \pm i\eta_0, \quad (\text{B.3})$$

isto é possível quando o $\psi_0^{+*} = \psi_0^-$, combinando (B.1) e (B.2), temos

$$\frac{1}{j} \frac{\partial \psi_0^\pm}{\partial t} = \pm i(\nabla^2 - V(x))\psi_0^\pm, \quad (\text{B.4})$$

assim

$$\left[(\nabla^2 - V(x)) \pm \frac{i}{j} \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi_0^\pm = 0. \quad (\text{B.5})$$

Introduzindo uma função $f_q^\pm = u_q(\mathbf{r})e^{\mp i\omega_q t}$, onde $u_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{\lambda\pi}} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} e^{iqy}$ e substituindo no lugar de ψ_0^\pm na equação (B.5), temos

$$\left[(\nabla^2 - V(x)) \pm \frac{i}{j} \frac{\partial}{\partial t} \right] f_q^\pm = 0, \quad (\text{B.6})$$

$$\left[(\nabla^2 - V(x)) + \frac{\omega_q}{j} \right] u_q(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{B.7})$$

A solução é da seguinte forma,

$$\psi_0^+ = \sum_q 2\Gamma_q u_q(\mathbf{r}) e^{-i\omega_q t} c'_q, \quad (\text{B.8})$$

$$\psi_0^- = \sum_q 2\Gamma_q^* u_q^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_q t} c'_q, \quad (\text{B.9})$$

onde $c'_q = 2\sqrt{\lambda\pi}c_q$, $c_q = \frac{a}{2} \frac{1}{\sqrt{\lambda L_y}}$ é um fator de normalização, e $\Gamma_q = \frac{L_y}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$, encontrado no capítulo 5.

Combinando (B.3) temos

$$\xi_0 = \frac{1}{2}(\psi_0^+ + \psi_0^-), \quad (\text{B.10})$$

$$\eta_0 = \frac{1}{2i}(\psi_0^+ - \psi_0^-), \quad (\text{B.11})$$

chegamos então nas soluções para os modos de ondas de spin, são elas

$$\xi_0 = \sum_q (A_q u_q(\mathbf{r}) + A_q^* u_q^*(\mathbf{r})) c'_q, \quad (\text{B.12})$$

$$\eta_{0=-i} \sum_q (A_q u_q(\mathbf{r}) - A_q^* u_q^*(\mathbf{r})) c'_q. \quad (\text{B.13})$$

Esta é a solução homogênea no capítulo 5 e também a solução do capítulo 4.

Bibliografia:

- [1] Weiss P, Journal de Physique et Appliquee, **6**, 661 (1907).
- [2] Heisenberg W. K, Zeitschorft fur Physik, **49**, pag(559619-636) (1298).
- [3] Bethe H. A, Zur Theorie der metalle, Z. Physik, **71**, 34 pag(205-226) 1931.
- [4] Gregg J.F, Allen W, Ounadjela K, Viret M, Hehn M, Thompson S.M, and Coey J.M.D, Phys. Rev. Lett., **77**, 1580 (1996).
- [5] Taylor G.R, Isin A, Coleman R.V, Phys. Rev., **165**, 621 (1968).
- [6] Levy P.M, Zhang S, Phys. Rev. Lett., **79**, 5110 (1997).
- [7] Villares Ferrer A, Farinas P.F, Caldeira A. O, Phys. Rev. Lett., **91**, 22 (2003).
- [8] Villares Ferrer A, Farinas P.F, Caldeira A. O, Philosophical Magazine, **85**, 20, pag(2293-2322), (July 2005).
- [9] Griinberg P, Schreiber R, Pang Y, Brodsky M. B, Sowers H, Phys. Rev. Lett., **57**, 2442 (1986).
- [10] Baibich M.N, Broto J.M, Fert A, Nguyen Van Dau F, Petroff F, Eitenne P, Creuzet G, Friederich A, and Chazelas J, Phys. Rev. Lett., **61**, 2472 (1988).
- [11] Vogler C, Bruckner F, Fuger M, Bergmair B, Huber T, Fidler J, and Suess D, Journal of Appl. Phys., **109**, 123901 (2011).

Bibliografia.

[12] Kostylev M, Schrader P, Stamps R. L, Gubbiotti G, Carlotti G, Adeyeye A. O, Goolaup S, and Singh N, Appl. Phys.Lett., **92**, 132504 (2008).

[13] Chumak A. V, Serga A. A, Hillebrands B, and Kostylev M. P, Appl. Phys. Lett., **93**, 022508 (2008).

[14] Chumak A. V, Neumann T, Serga A. A, Hillebrands B, and Kostylev M. P, J. Phys. D: Appl. Phys, **42**, 205005 (2009).

[15] Wang Z. K, Zhang V. L, Lim H. S, Ng S. C, Kuok M. H, Jain S, and Adeyeye A. O, Appl. Phys. Lett., **94**, 083112 (2009).

[16] Topp J, Heitmann D, Kostylev M. P, and Grundler D, Phys. Rev. Lett., **104**, 207205 (2010).

[17] Duerr G, Huber R, Grundler D, Journal. Phys, **24**, 024218 (2012).

[18] Bloch L, Z. Physik, **74**, 295 (1932).

[19] Ashcroft N. W, Mermin N. D, Solid State Physics , First Edition, Brooks/Cole (1976).

[20] Neusser S, Bauer H. G, Duerr G, Huber R, Mamica S, Woltersdorf G, Krawczyk M, Back C. H, and Grundler D, Phys. Rev. B, **84**, 184411 (2011).

[21] Duerr G, Thurner K, Topp J, Huber R, and Grundler D, Phys. Rev. Lett., **108**, 227202 (2012).

[22] Topp J, Podbielski J, Heitmann D, Grundler D, Phys. Rev. B, **78**, 024431 (2008).

Bibliografia.

[23] Akhiezer A. I, Baryakhtar V. G, Peletminski S. U, Spin Waves , Interscience Publishers, New York (1968).

[24] Jackson J. D, Classical Elettrodynamics, Third Edition, John Wiley & Sons, Inc. (1998).

[25] White R. M , Quantum Theory of Magnetism, Third Edition (2007)

[26] Goldstone J, Salam A e Wheinberg S, Phys. Ver., **127**, 3 (1962).

[27] Leeuw F. H, Van den Doel R, Enz V, Rep. Prog. Phys., **43**, n° 5, pag (659-783) (1980).

[28] Hansen P, Phys of Magnetic Garnets, Amsterdan , pag (56-133) (1978).

[29] Platzman P. M, Wolff P. A, Waves and Interactions in Solid State Plasmas, Academic Press, (1973).

[30] Nozières, P. Pines D, The Theory of Quantum Liquids, Perseus Books, (1999).

[31] Cohen-Tannoudji C, Dui B, Laloe F, Quantum Mechanics, Vol. 2, John Wiley (1977).

[32] Ebels U, Radulescu A, Henry Y, Piraux L, Ounadjela K, Phys. Rev. Lett. **84**, 983 (2000).

[33] Dumpich G, Krome T. P, Hausmanns B, Magn J, Magn. Mater, **248**, 241 (2002).

[34] Tataru G, Zhao Y, Muñoz M, García N, Phys. Rev. Lett. **83**, 2030 (1999).

Bibliografía.

- [35] García N, Muñoz M, Zhao Y, Phys. Rev. Lett. **82**, 2923 (1999).
- [36] Chung S. H, Muñoz M, García N, Egelhoff W. F, Gomez R. D, Phys. Rev. Lett. **89**, 287203 (2002).
- [37] Cabrera G.G, Falicov F, Phys. Stat. Sol. B, **61**, 539, pag(62-217) (1974).
- [38] Kubo R, Can. J. Phys., **34**, 1274 (1956).
- [39] Kubo R, J. Phys. Soc. Jap., **12**, 570 (1957).
- [40] Feigensohn M, Klein L., Reiner J.W, Beasley M.R, Phys. Rev. B **67** 134436 (2003).
- [41] Taniyama T, Nakatani I, Namikawa T, Yamazaki Y, Phys. Rev. Lett., **82**, 2780 (1999).
- [42] Winter J. M, Phys. Rev., **124**, 2 (1961).