

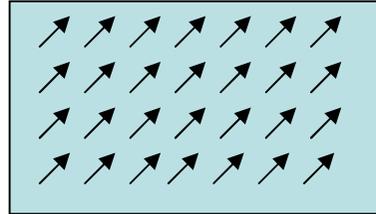
Magnetismo dos sistemas nanoestruturados

Curso MAP-FIS

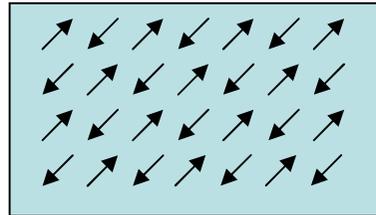
1. Efeitos da baixa dimensão e do tamanho nanoscópico para formação dos estados magnéticos e as suas dinâmicas nos nanosistemas (até o magnetismo molecular).
 - 1a. Redução do parâmetro de ordem e temperatura crítica.
 - 1b. Quantificação espacial dos estados excitados.
2. Efeitos específicos da superfície (anisotropia de Néel) nos filmes ultrafinos.
 - 2a. As interações indirectas (de tipo RKKY) em multicamadas.
 - 2b. As características relacionadas dos processos de ressonância magnética e de magnetoóptica (incluindo BLS).
3. Efeitos das interações dipolares para estados e excitações magnéticos dos sistemas nanoestruturados.
 - 3a. Degenerescências específicas de estado de base (de tipo Luttinger-Tisza) e o seu levantamento.
4. Métodos numéricos de estudo dos sistemas nanoestruturados magnéticos.
 - 4a. Métodos de OOMF e multiscale.
 - 4b. Simulações dos estados de equilíbrio e dinâmicas dos domínios magnéticos.

Comparamos os sistemas magnéticos, tradicionais para física até os 90:

ferromagnetes



antiferromagnetes



ferrimagnetes

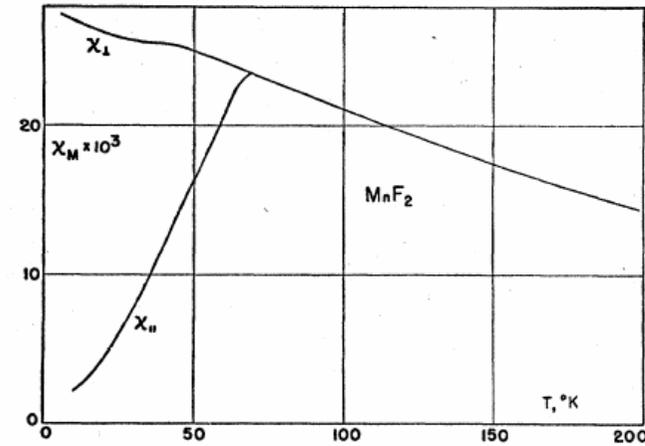
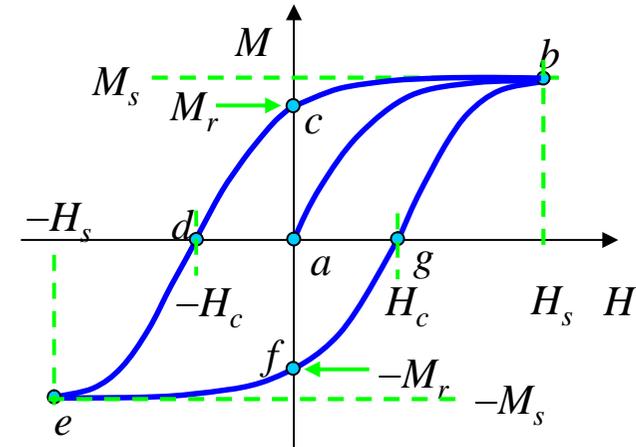
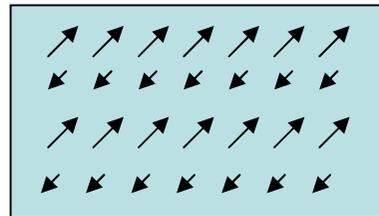
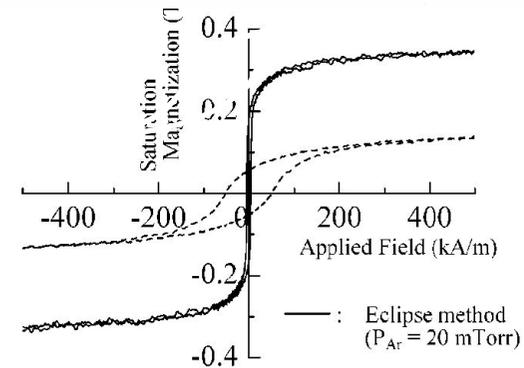
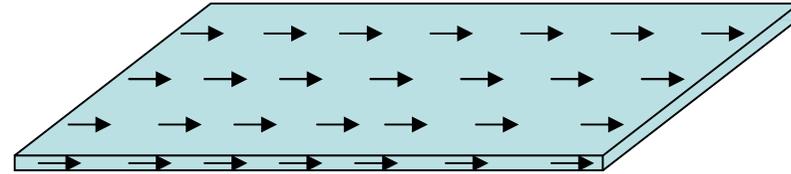


FIG. 4. Molal magnetic susceptibility of MnF_2 parallel and perpendicular to c axis of crystal.

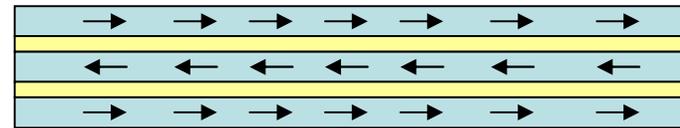


com os novos sistemas e dispositivos nanoestruturados,

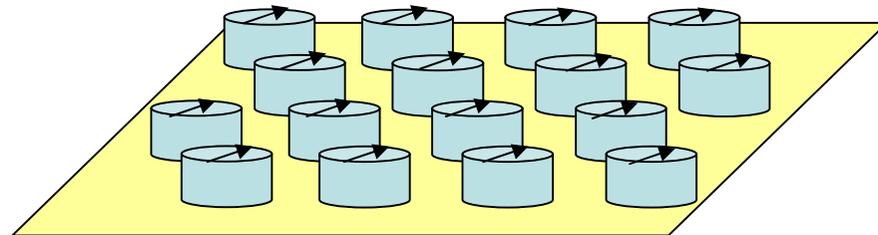
filmes magnéticos finos e ultrafinos



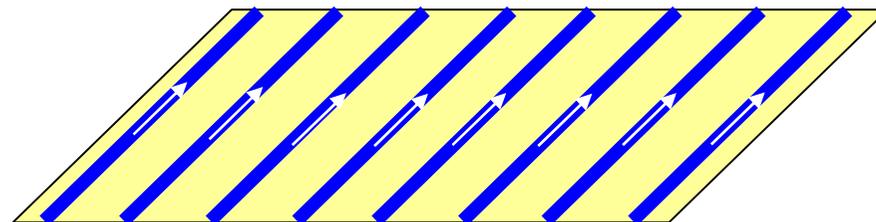
multicamadas



micro- e nanodots



nanofios



etc.

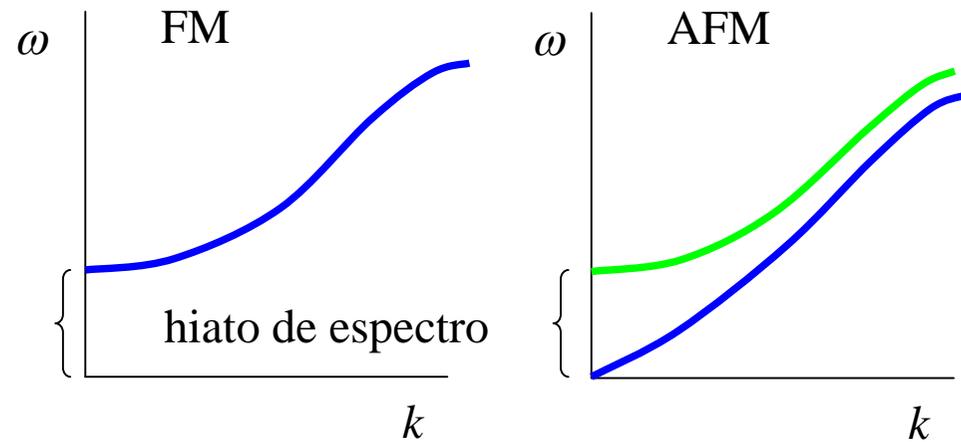
podemos destacar as seguintes novas características:

1. Restrição espacial e dimensional que produz modificação substancial das condições para ordem magnética e a sua estabilidade térmica.
2. O papel mais pronunciado das interacções magnéticas, menos importantes nos sistemas tradicionais (volúmicos e macroscópicos), como dipolares ou spin-orbitais.
3. Efeitos de estrutura atómica discreta e o espectro discreto dos níveis de energia. Diferenças entre quantificação espacial do sistema contínuo e o discreto.
4. Sensibilidade elevada dos momentos magnéticos aos factores externos, especialmente as correntes polarizadas. Fenómenos de spin-torque, spin-switch e de spin-Hall.

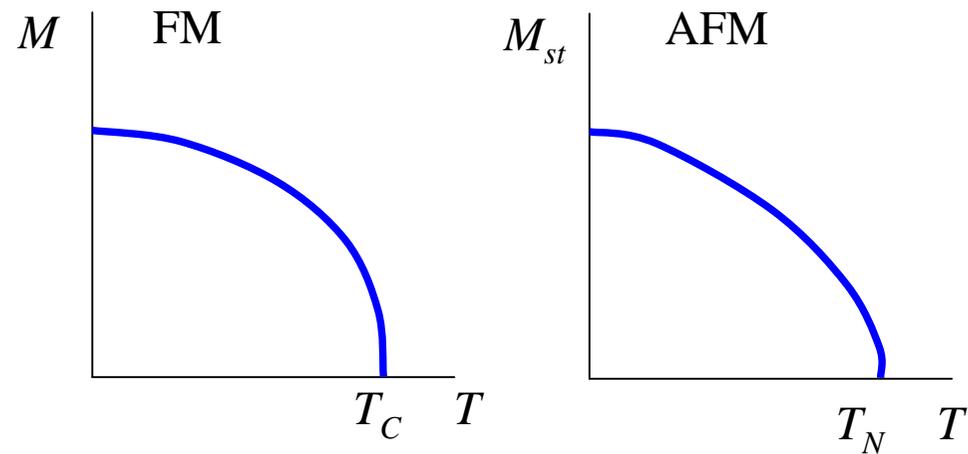
Efeito dimensional nos sistemas tradicionais

Sistemas magnéticos 3D

Espectro e densidade de estados das excitações magnéticas



Lei térmica de magnetização



Teorema de Mermin-Wagner

Formulação original

ABSENCE OF FERROMAGNETISM OR ANTIFERROMAGNETISM IN ONE- OR TWO-DIMENSIONAL ISOTROPIC HEISENBERG MODELS*

N. D. Mermin[†] and H. Wagner[‡]

Laboratory of Atomic and Solid State Physics, Cornell University, Ithaca, New York

(Received 17 October 1966)

It is rigorously proved that at any nonzero temperature, a one- or two-dimensional isotropic spin- S Heisenberg model with finite-range exchange interaction can be neither ferromagnetic nor antiferromagnetic. The method of proof is capable of excluding a variety of types of ordering in one and two dimensions.

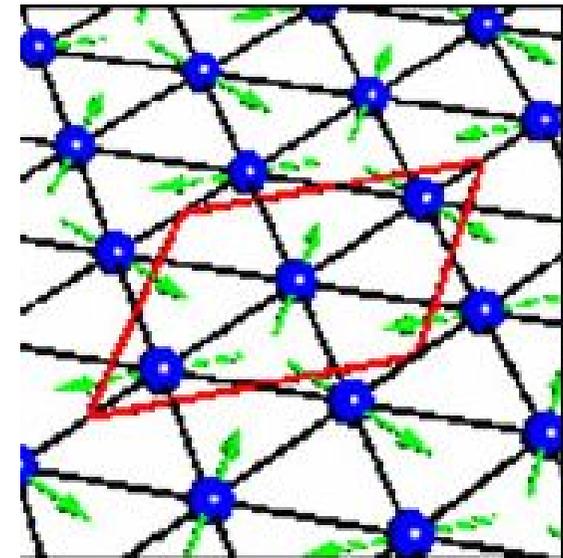
As condições necessárias de teorema:

- a) Isotropia das interações
- b) Alcance finito das interações

O teorema não impede existência das ordens sem longo alcance

Magnetismo não colinear

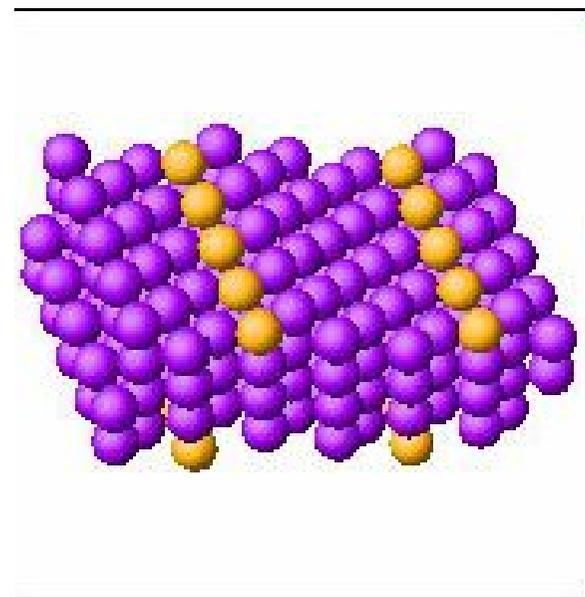
Ao contrário das estruturas FM ou AFM, no arranjo não colinear a direcção da magnetização pode variar de um átomo para outro por ângulos arbitrários. Em particular, tais estruturas podem formar-se na rede triangular, devido à frustração topológica. A imagem mostra o estado periódico de Néel nesta rede. Aqui os spins co-planares fazem os ângulos de 120° entre os próximos vizinhos. A célula elementar (em vermelho) contém os 3 átomos. A magnetização total M na célula é nula. Os spins na imagem pertencem ao plano da rede. As orientações de spins com respeito aos eixos da rede definem-se pela interacção spin-órbita. (Segundo P.Kurz, G. Bihlmayer, S.Blügel)



Interacção spin-órbita e anisotropia magnetocristalina.

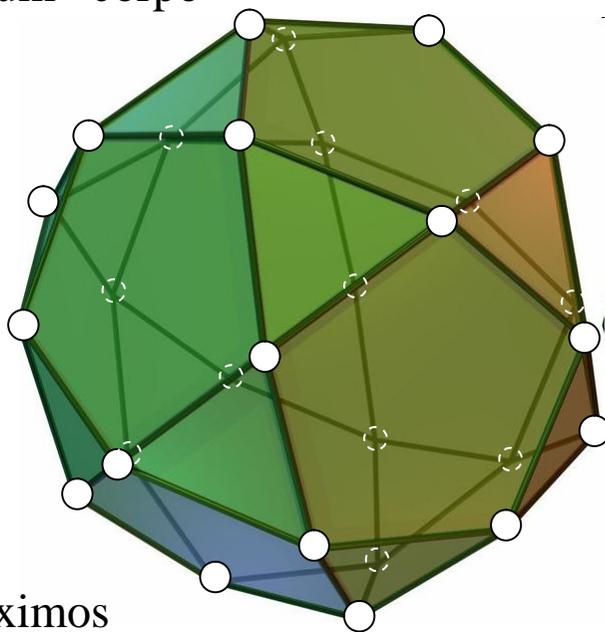
A gravação magnética não seria possível sem efeito relativista chamado acoplamento spin-orbital. Ele determina orientação dos spins com respeito à rede cristalina ou anisotropia magnetocristalina. A força do efeito define a densidade de armazenamento no dispositivo da memória magnética. Portanto a procura dos novos materiais com elevadas anisotropias magnetocristalinas tem uma importância considerável e o entendimento teórico destas dependências materiais chegou depois dos intensos cálculos numéricos *ab initio*. A imagem amostra degraus na face Pt (111) decorados pelos átomos de Co. Assim formados fios de Co são um exemplo do sistema magnético de baixa dimensão, dispendo de altamente anisotrópica magnetização fora do plano.

(Segudo X.Nie, A. Shick, G. Bihlmayer, S.Blügel)



Modificada teoria de ondas de spin para nanomagnets: aplicação à molécula
de Keplerate $\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$
Olivier Céspedes and Timothy Ziman
Institut Laue Langevin, B.P. 156, 38042 Grenoble, France.

30 átomos de Fe formam o
icosidodecahedro, um corpo
Kepleriano



cada Fe tem 4 próximos
vizinhos Fe

O icosidodecahedro é o poliedro com 20 faces triangulares e 12 faces pentagonais. Tem 30 vértices idênticos, com 2 triângulos e 2 pentágonos a encontrar-se no cada vértice, e 60 idênticas arestas que separam triângulos dos pentágonos. As coordenadas canónicas para os vértices dum icosidodecahedro são as permutações cíclicas de $(0,0,\pm\tau)$, $(\pm 1/2, \pm\tau/2, \pm(1+\tau)/2)$, onde $\tau = (1+\sqrt{5})/2$ e a razão de ouro.

Aquí o tamanho de espaço de Hilbert, $6^{30} \approx 10^{23}$, impossibilita usar as técnicas da diagonalização numérica exacta.

Portanto os autores adoptaram abordagem diferente, primeiro resolvendo o problema de campo médio (de facto, o clássico), e depois introduzindo as correções quânticas dentro de método dos bosões de Holstein-Primakoff.

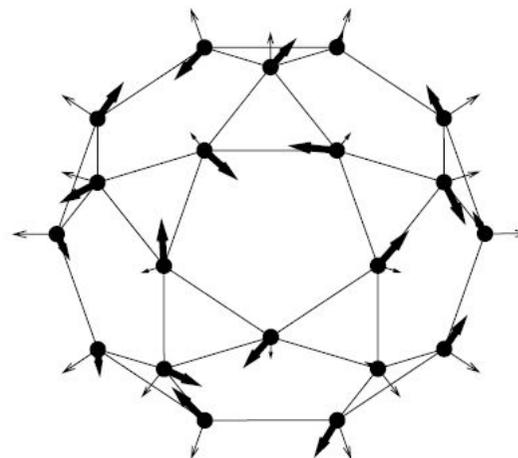
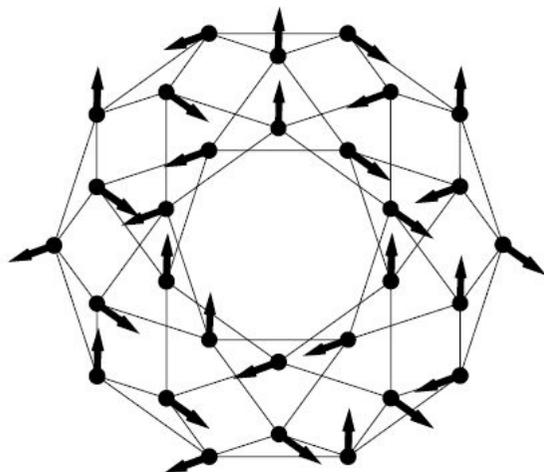
Agindo assim, foi artificialmente quebrada a simetria, permitindo a surgir uma ordem magnética.

Para re-estabelecer a simetria, foi usada a técnica de Takahashi a que consiste em forçar posteriormente a magnetização tornar-se nula no cada sítio.

Isso permite encontrar as fases sem magnetização das subredes, quer dizer, sem quebra da simetria de inversão temporal.

Hamiltoniano microscópico:

$$H = J \sum_{\langle j,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{i=1}^{30} D^{(i)} S_i^{(i)2}$$



Modelo 1: $D^{(i)}$ igual para todos i , dirigido segundo normal ao plano de imagem

Modelo 2: $D^{(i)} = D\hat{R}_i$
(setas finas)

$D > 0$, plano fácil, ou

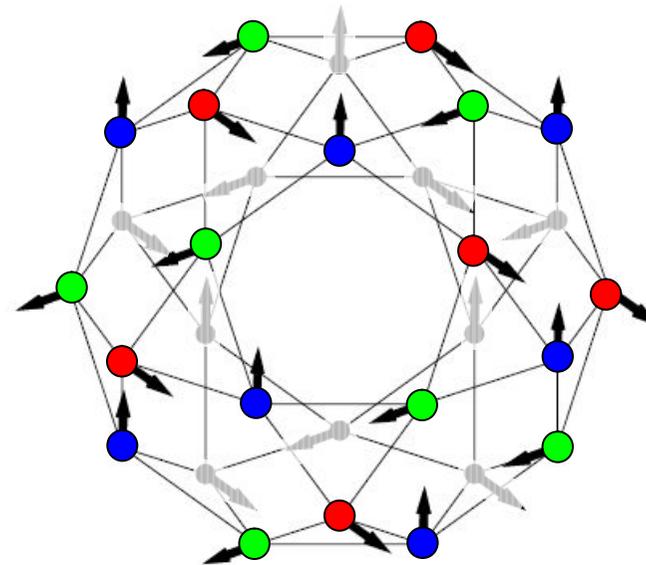
$D < 0$, eixo fácil,

Em ambos casos anisotropia considera-se fraca $|D|/J = 0.1$, justificada pelo facto de ião Fe^{3+} ter a camada d pre-enchida ($L_{\text{tot}}=0$). Admitem-se ambos tipos de anisotropia: plano facil ou eixo facil. Para acoplamento de Zeeman foi escolhido o factor $g = 2$. Para temperatura $T = 0$, procura-se o mínimo da energia $E = \langle H \rangle$. O último se obteve pela iteração numérica das $3N$ equações de auto-consistência de campo médio para os spins quânticos, partindo dos estados iniciais aleatórios (até 10^4).

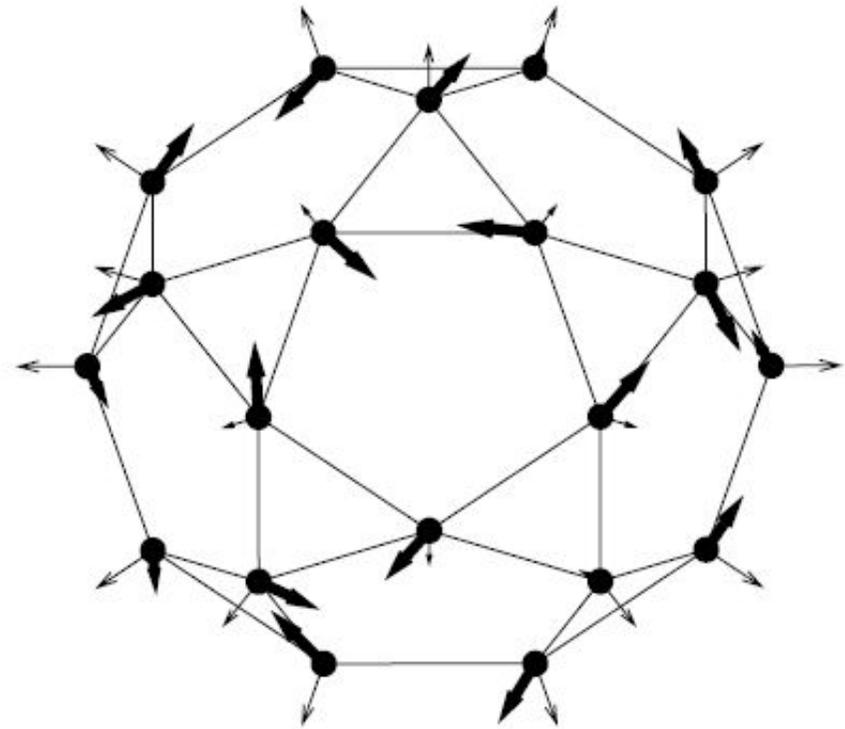
$$H_{m-f}^{(i)} = J \sum_{\langle j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \langle \mathbf{S}_j \rangle + D^{(i)} S_i^{(i)2}, \quad i = 1, \dots, 30$$

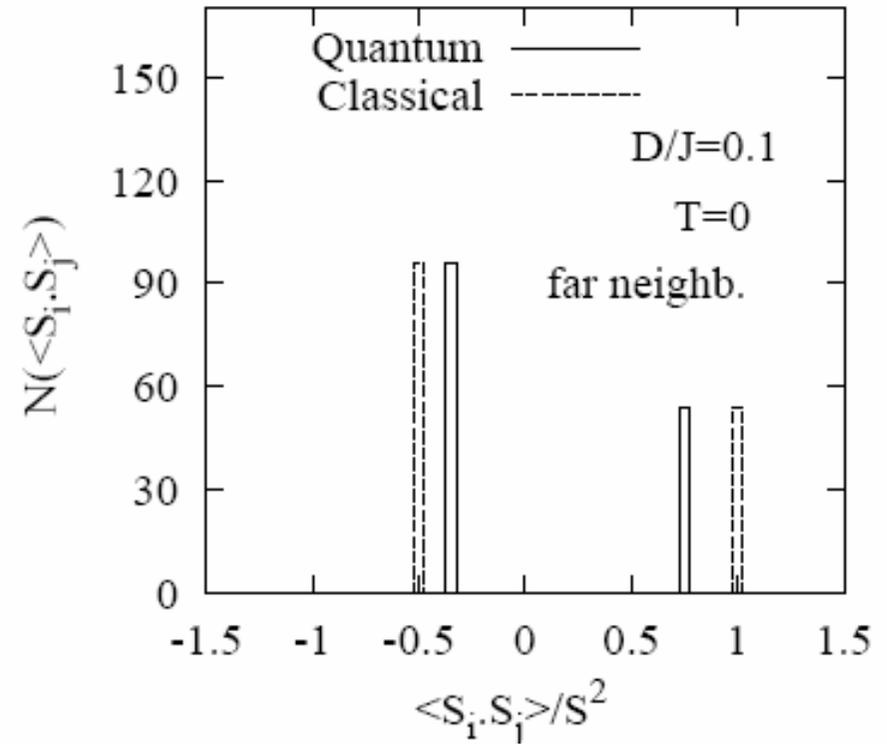
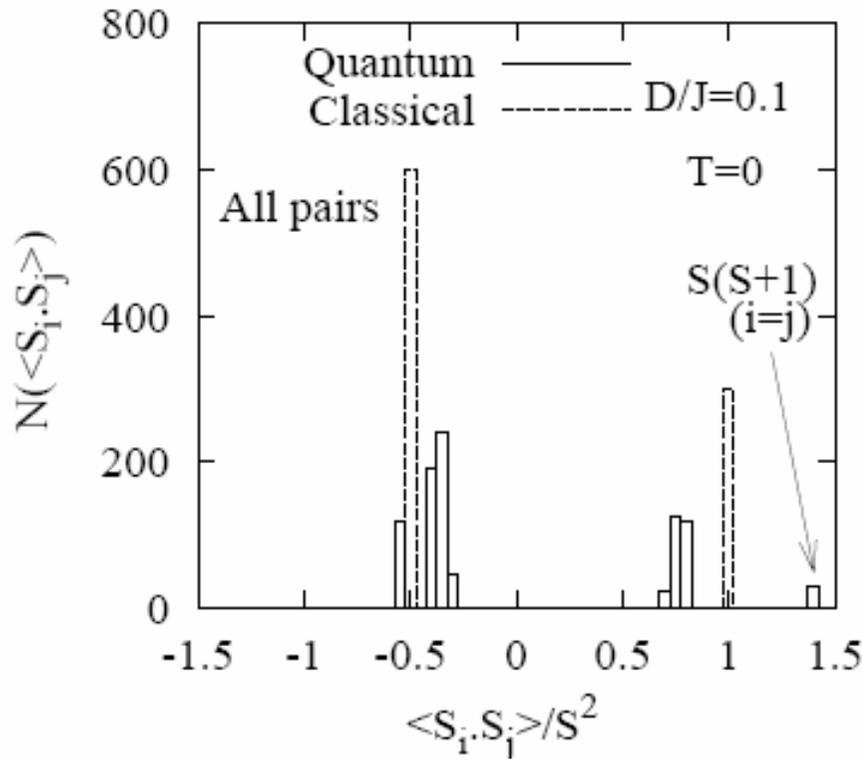
$$\langle \mathbf{S}_j \rangle = \langle 0 | \mathbf{S}_j | 0 \rangle_{m-f}^{(i)}.$$

Para modelo 1 com anisotropia de plano facil, o sistema na temperatura nula converge à simples ordem magnética de três subredes 120° . A presente anisotropia faz os spins manter-se no plano perpendicular ao vector \mathbf{D} . A energia por spin é simplesmente $E_0/N = -S^2$. Reparámos que substituindo S^2 por $S(S + 1)$ não dá a estimativa correcta da energia de ponto zero. Por isso, é necessário calcular as correcções quânticas (ver abaixo) as que podem ter valores diferentes.

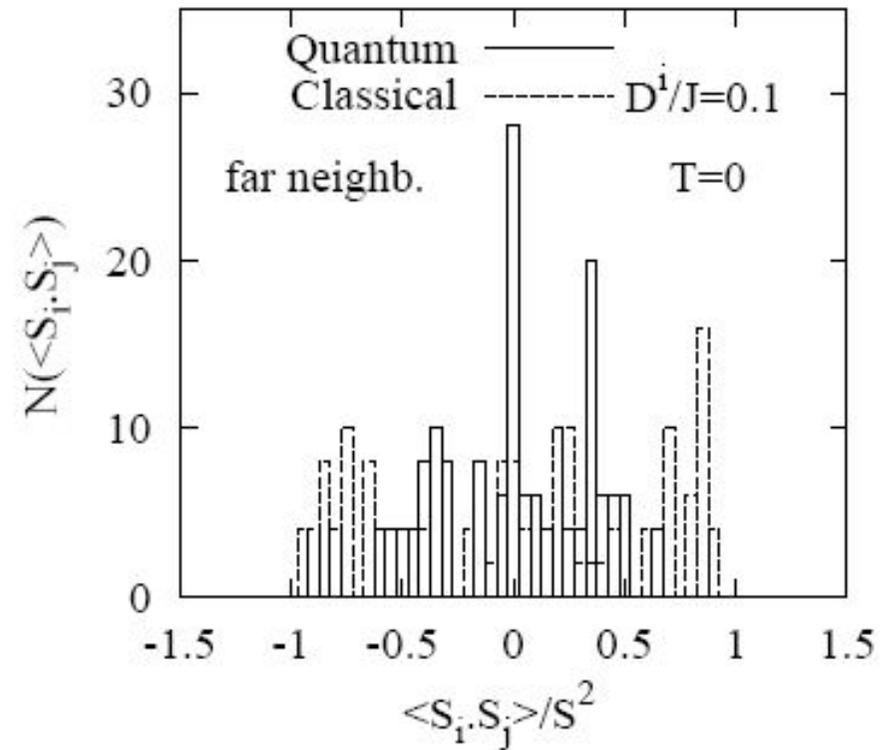
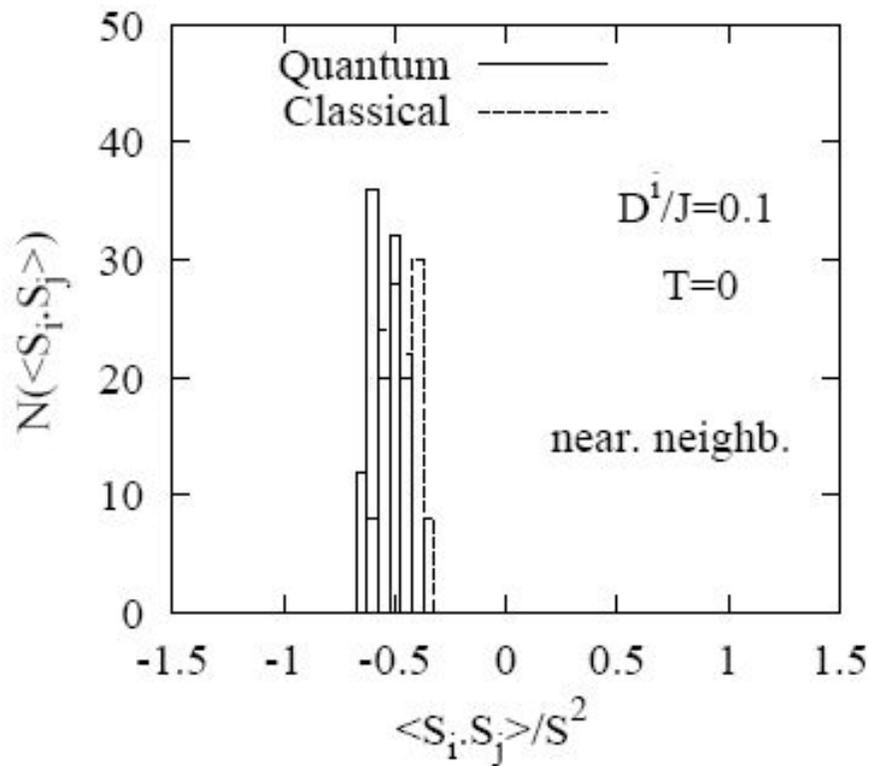


Para modelo 2, o estado é muito próximo à ordem de 120° excepto de que é mais tangencial à esfera. Para vê-lo mais claro, consideramos a distribuição dos produtos scalares classicos $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = \langle \mathbf{S}_i \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_j \rangle$. A maioria dos pares dos próximos vizinhos apresenta o produto scalar próximo a $-1/2$, correspondendo ao ângulo de 120° , mas alguns desviam deste ângulo. A energia é $E_0/N = -0.989S^2$ para $D/J = 0.1$. É interessante que o estado acomoda bém a anisotropia local de 1 ião: a energia aumenta apenas por um décimo da anisotropia.





Números das enlaces com o valor dado da função de correlação para os todos 900 enlaces (esquerda) e para os vizinhos distantes (direita). Eixo de anisotropia global. As correlações quânticas $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ obtidas por método de Takahashi quando as clássicas são simplesmente $\langle S_i \cdot S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$. O estado de base clássico é coplanar de 3 subredes com ângulos 120° . De direita mostra-se que as flutuações quânticas reduzem as correlações entre vizinhos distantes, embora não completamente.



Número das enlaces com o dado valor da correlação entre os próximos vizinhos (esquerda) e os mais distantes (direita). Eixo de anisotropia local. As correlações clássicas e quânticas definidas como acima.

Foi encontrado o grande número dos estados degenerados, provavelmente devidos ao grande número das simetrias de icosdodecahedro.

Modas de Holstein-Primakoff em sistemas de tamanho finito

Tendo resolvido o problema de campo médio, se pode introduzir as primeiras correcções quânticas, expandindo a energia livre à volta de estado de campo médio.

Para este fim, usam-se os novos eixos de referência z' no cada sítio i ., coincidente com a direcção clássica do problema de campo médio. Depois aplica-se a representação de Holstein-Primakoff para os spins em termos dos operadores bosónicos neste referencial:

$$S_i^{+'} = \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i} a_i, \quad S_i^{-'} = a_i^\dagger \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i},$$
$$S_i^{z'} = S - a_i^\dagger a_i.$$

onde as linhas correspondem ao novo eixo local. Expandindo o Hamiltoniano até segunda ordem em operadores Bose a_i, a_i^\dagger , se obteve a forma dos bosões livres no espaço real:

$$H = E_0 \left(1 + \frac{1}{S} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (A_{ij} a_i^\dagger a_j + B_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \text{h.c.})$$

onde E_0 é a energia de campo médio encontrada acima. Os coeficientes A_{ij} e B_{ij} ($O(S)$) são as funções dos acoplamentos e das matrizes de rotação local.

Hamiltoniano deste tipo habitualmente diagonaliza-se pela transformação de Bogoliubov assegurando os caracteres bosónicos dos estados finais. Esta transformação geralmente se construi nos sistemas com anisotropia bastante forte, mas não directamente para o caso da simetria contínua que produz as modas de Goldstone. Neste caso, o procedimento de bosonização torna-se singular, como se conhece bem para a rede infinita triangular lattice onde o Hamiltoniano não pode ser bosonizado para os impulsos $k = 0$ ou $k = \pm 4\pi/3$.

Em qualquer caso, no sistema finito, as modas de Goldstone não são genéricas porque obviamente não pode existir a fase com quebra de simetria. Este problema foi abordado por Takahashi e Hirsch & Tang com a imposta condição de magnetização ser nula no cada sítio do sistema finito,

$$\langle S_i^z \rangle = S - \langle a_i^\dagger a_i \rangle = 0,$$

e estas N restrições locais habitualmente implicam introdução dos N diferentes factores de Lagrange:

$$H' = H + \sum_{i=1}^N \lambda_i a_i^\dagger a_i.$$

Os $\{\lambda_i\}$ podem também ser vistos como os locais potenciais químicos para os spin-flips, porque $a_i^\dagger a_i$ é o operador de número dos spin-flips no sítio i . Para incluir estes termos adicionais, o Hamiltoniano H se modifica por simples substituição de A_{ij} por $A'_{ij} = A_{ij} + \lambda_i \delta_{ij}$ e juntando o termo constante à energia, $(1/2) \sum_i \lambda_i$. Agora todas as grandezas, em particular o espectro das excitações, vão depender em factores $\{\lambda_i\}$. Eles se determinam pelas soluções das N equações de restrição. Neste curso se deve diagonalizar o Hamiltoniano H' e depois calcular os valores médios no estado de base, como os $\langle a_i^\dagger a_i \rangle$. Adição dos factores de Lagrange finitos remove as modas de Goldstone e permite construir a transformação de Bogoliubov.

O Hamiltoniano diagonalizado obteve a forma:

$$H' = E_0 + \frac{E_0}{S} + \sum_{j=1}^N \omega_j \left(a_{\omega_j}^\dagger a_{\omega_j} + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \lambda_j$$

onde $a_{\omega_j}^\dagger$ é o operador bosónico de criação da excitação com energia ω_j . Notamos que a energia de ponto zero está dada pelo

$$E_0 / S + \frac{1}{2} \sum_j (\omega_j - \lambda_j),$$

(os dois últimos termos se cancelam para o simples ferromagnet uniaxial). A transformação de Bogoliubov fornece também os operadores próprios a custo dos operadores locais de Holstein-Primakoff e todos valores médios como os $\langle a_i^\dagger a_i \rangle$ podem ser calculados. Depois resolvem-se as restrições pela rotina numérica comum, calculando as raízes das equações não-lineares. Sendo definidos os factores de Lagrange, o estado assegura os valores $\langle S_i \rangle = 0$. Depois calculam-se as diferentes grandezas físicas, como o espectro das excitações ω_j e a energia total $E(T)$. O último requiere definição explícita dos factores de Lagrange para cada temperatura e subtracção de potencial químico dos magnões.

Também calculam-se as funções de correlação de dois pontos $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ no estado de base. A sua solução só vale para as temperaturas baixas porque o análise começa de mínimo para baixas temperaturas que normalmente se difere de mínimo para estado paramagnético. Se espera que a solução presente desvia da exacta quando $T \sim T_N$ (a temperatura de Néel de campo médio para o sistema clássico).