



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS - UFAL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Espalhamento estacionário de mágmons 1D por um  
defeito de ligação anisotrópico e antissimétrico**

REINALDO FREIRE DA FONSECA

MACEIÓ-AL, DEZEMBRO DE 2024

---

Dissertação de Mestrado

Espalhamento estacionário de mágmons  $1D$  por um defeito  
de ligação anisotrópico e antissimétrico

REINALDO FREIRE DA FONSECA

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

Orientador: Prof. Dr. Marcelo L. Lyra

Maceió-AL, Dezembro de 2024

*Instituto de Física - UFAL*

**Catalogação na Fonte  
Universidade Federal de Alagoas  
Biblioteca Central  
Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Cláudio Albuquerque Reis – CRB-4 – 1753

F676e Fonseca, Reinaldo Freire da.

Espalhamento estacionário de mágmons 1D por um defeito de ligação anisotrópico e antissimétrico / Reinaldo Freire da Fonseca. – 2024.  
[137] f. : il.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2024.

Bibliografia. f. 122-127.  
Apêndice. 128-[137].

1. Física. 2. Spintrônica. I. Título.

CDU: 537.874



**Universidade Federal de Alagoas**  
**Instituto de Física**  
**Programa de Pós Graduação em Física**

BR 104 km 14, Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil  
FONE : (82) 3214-1423

**ATA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO PÓS-GRADUANDO REINALDO FREIRE DA FONSECA, REALIZADA NO DIA CINCO DE DEZEMBRO DE DOIS MIL E VINTE E QUATRO.**

Aos cinco dias do mês de dezembro de dois mil e vinte e quatro, às quatorze horas, em sessão pública realizada no Auditório do Instituto de Física, o professor Italo Marcos Nunes de Oliveira, na qualidade de Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Física, instalou os trabalhos para defesa de dissertação de mestrado do Pós-Graduando **Reinaldo Freire da Fonseca**. O Coordenador apresentou a Banca Examinadora constituída pelos seguintes professores: Marcelo Leite Lyra, como presidente da banca examinadora e orientador, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Adauto José Ferreira de Souza, da Universidade Federal de Pernambuco e Luan Felipe Santos Martins, pós-doc no Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; e como suplentes: Maria Socorro Seixas Pereira, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; e Jordana Torrico Ferreira, da Universidade Federal de Alfenas. Em seguida, o presidente da banca convocou o candidato a expor seu trabalho de dissertação, intitulado: **“Espalhamento estacionário de mágmons 1D por um defeito de ligação anisotrópico e antissimétrico”**. Após a exposição do candidato, teve início a arguição por parte da banca examinadora. O presidente da banca examinadora, após solicitar perguntas ou comentários do público presente, suspendeu os trabalhos para que fosse realizado o julgamento. **A banca examinadora decidiu aprovar o candidato com conceito “A”**. Nada mais havendo a tratar, foi encerrada a sessão, da qual eu, Victor Xavier Brito, secretário do Programa de Pós-Graduação em Física, lavrei a presente ata, que vai assinada por mim e que depois de lida e aprovada, será assinada pelo presidente da banca examinadora e demais membros, pelo candidato e por testemunhas que quiserem. Maceió, cinco de dezembro de dois mil e vinte e quatro.

Documento assinado digitalmente  
**MARCELO LEITE LYRA**  
Data: 11/12/2024 08:35:32-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente  
**LUAN FELIPE SANTOS MARTINS VERISSIMO**  
Data: 05/12/2024 17:47:04-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente  
**VICTOR XAVIER BRITO**  
Data: 20/12/2024 15:39:21-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente  
**ADAUTO JOSE FERREIRA DE SOUZA**  
Data: 05/12/2024 17:34:35-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente  
**REINALDO FREIRE DA FONSECA**  
Data: 05/12/2024 17:19:49-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

## DEDICATÓRIA

À toda minha família e amigos, em especial a minha esposa e aos meus pais, que apesar de todas as dificuldades sempre me incentivaram e apoiaram.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por tornar possível a realização de toda a minha trajetória. Agradeço à minha família pelo apoio e suporte. Especialmente, minha esposa Ketly Santos e meus pais, por toda a ajuda, motivação e conselhos. Agradeço ao meu orientador Marcelo Leite Lyra, pela dedicação e paciência durante toda a pesquisa e também durante o período de escrita desta dissertação. Agradeço a professora Maria Socorro Seixas Pereira que me ajudou e ensinou muito. Também agradeço a todos os professores do instituto de Física que participaram de alguma forma da minha jornada durante o mestrado. Agradeço a todos os meus amigos, que em muitos momentos me ajudaram, apoiaram, aconselharam e foram essenciais no decorrer do curso nas disciplinas e também na construção desta dissertação. Em especial, Max Wendell, Raline Araújo, Luís Gomes, José Grimário, Marconi Junior, Ysak Anykueury e Victor Gustavo.

## RESUMO

A compreensão dos fenômenos de transporte de ondas de magnetização em meios com impurezas é fundamental para o desenvolvimento da spintrônica, uma tecnologia análoga à eletrônica, que explora o grau de liberdade do spin dos elétrons. Estudamos o espalhamento de mágmons ferro e antiferromagnéticos unidimensionais por um defeito de ligação. Consideramos um defeito com acoplamento de troca  $J_1$ , anisotropia transversal  $\Delta$  e interação Dzyaloshinskii–Moriya  $D$ . O defeito de ligação conecta duas cadeias de spins laterais com primeiros vizinhos com acoplamento de troca isotrópico de Heisenberg  $J$ . O defeito de ligação é responsável por um acoplamento de Heisenberg anisotrópico e uma interação antissimétrica do tipo Dzyaloshinskii–Moriya. Dentro de uma abordagem semiclássica, a teoria do espalhamento estacionário é usada para calcular os espectros de transmissão de excitações de mágmons em função dos parâmetros de acoplamento no defeito de ligação. Comparamos as propriedades espectrais de mágmons ferro e antiferromagnéticos. Uma banda plana de transmissão transparente ocorre para uma superposição particular de valores dos acoplamentos de defeitos anisotrópicos e antissimétricos. Além disso, revelamos um modo transparente de mágmons ferromagnéticos em uma região do espaço de parâmetros de acoplamento do defeito que está ausente no caso de mágmons antiferromagnéticos.

**Palavras-chaves:** Spintrônica; Mágmons; Espalhamento estacionário; Espectro de transmissão.

## ABSTRACT

Understanding the phenomena of magnetization wave transport in media with impurities is fundamental for the development of spintronics, a technology analogous to electronics, which exploits the degree of freedom of electron spin. We studied the scattering of one-dimensional iron and antiferromagnetic magnons by a bonding defect. We consider a defect with  $J_1$  exchange coupling,  $\Delta$  transverse anisotropy, and Dzyaloshinskii–Moriya  $D$  interaction. The bonding defect connects two chains of lateral spins with first neighbors with Heisenberg isotropic exchange coupling  $J$ . The bonding defect is responsible for an anisotropic Heisenberg coupling and an antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya-type interaction. Within a semiclassical approach, the theory of stationary scattering is used to calculate the transmission spectra of magnon excitations as a function of the coupling parameters in the bonding defect. We compared the spectral properties of iron and antiferromagnetic magnons. A transparent transmission flat band occurs for a particular superposition of values of the anisotropic and antisymmetric defect couplings. In addition, we reveal a transparent mode of ferromagnetic magnons in a region of the defect coupling parameter space that is absent in the case of antiferromagnetic magnons.

**Keywords:** Spintronics; Magnons; Stationary scattering; Transmission spectrum.

# Sumário

Capa . . . . .	
Folha de rosto . . . . .	
Dedicatória . . . . .	3
Agradecimentos . . . . .	4
Resumo . . . . .	5
Abstract . . . . .	6
<b>1 Introdução</b>	<b>18</b>
<b>2 Momento Magnético e Spin do Elétron</b>	<b>30</b>
2.1 Momento Magnético . . . . .	30
2.2 Spin do elétron . . . . .	39
<b>3 Magnetização e Ordenamento Magnético</b>	<b>50</b>
3.1 Magnetização . . . . .	50
3.2 Diamagnetismo . . . . .	55
3.3 Paramagnetismo . . . . .	57
3.4 Ferromagnetismo . . . . .	62
3.5 Antiferromagnetismo . . . . .	75
<b>4 Modelo e Método</b>	<b>81</b>

4.1	Energia de interação de troca . . . . .	81
4.2	Hamiltoniano de Heisenberg . . . . .	86
4.3	Interação de troca Antissimétrica . . . . .	88
4.4	Mágnons em cadeias de spin ferro e antiferromagnéticas . . . . .	90
4.5	Espalhamento de mágnons ferromagnéticos por um defeito de ligação	96
4.6	Espalhamento de mágnons antiferromagnéticos por um defeito de ligação . . . . .	103
<b>5</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>110</b>
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>119</b>
<b>A</b>	<b>Artigo Publicado</b>	<b>128</b>

# Listas de Figuras

1.1	Em (a) é mostrado o estado fundamental de um ferromagneto simples, onde os spins estão uniformemente separados por uma distância $a$ e orientados na mesma direção. Em (b) um spin está invertido, configurando uma possível excitação. Em (c) é ilustrado uma onda de spin na configuração de spins em linha. Sucessivos spins em movimento de precessão em fase por um ângulo constante. Por fim, em (d) os spins são observados de cima, possibilitando a observação do comprimento de onda. observa-se que a onda de spin é desenhada a partir das extremidades superiores dos vetores de spin, que estão em fase com uma diferença angular constante ao longo da configuração.	20
	Figura adaptada a partir de [1].	
1.2	Estrutura do problema estudado no trabalho [2], mostrando a propagação da onda de spin através da estrutura com múltiplas camadas periódicas uniformes e ferromagnéticas.	25







- 4.4 Representação esquemática de uma onda de spin incidente em uma cadeia de spins ferromagnética com um defeito de ligação anisotrópico e antissimétrico. A região defeituosa possui propriedades magnéticas distintas em relação ao restante das cadeias laterais, o que origina diferentes relações de dispersão para as ondas de spin. A onda de spin ao atingir o defeito, pode ser parcialmente transmitida e parcialmente refletida a depender dos parâmetros de interações do defeito. Todos os spins estão alinhados paralelamente na mesma direção no estado fundamental ferromagnético saturado.  $a$  é o espaçamento da rede desta configuração de spins. (Fonte: Elaborado pelo autor) . . . . . 100
- 4.5 Representação esquemática de uma cadeia de spins antiferromagnética com defeito de ligação. O acoplamento de troca antiferromagnética que conecta as cadeias laterais é  $J$ . O defeito de ligação tem um acoplamento de troca mais fraco  $J_1$  com uma anisotropia transversal  $\Delta$  e interação Dzyaloshinskii-Moriya antissimétrica  $D$ .  $a$  é o espaçamento da rede. Os spins apresentam uma configuração alternada, com orientações antiparalelas (opostas) em sítios vizinhos no estado fundamental semiclássico de Néel.  $a' = 2a$  representa a célula unitária desta configuração de spins. (Fonte: Elaborado pelo autor). . . 103









# Capítulo 1

## Introdução

O magnetismo é uma propriedade fundamental da matéria que desperta interesses tanto por sua compreensão, quanto por suas possíveis aplicações industriais. Um dos temas mais relevantes dentro dessa área é o estudo das ondas de spin em sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade, devido ao seu grande potencial para aplicações tecnológicas avançadas e controle de propriedades quânticas. Nesta dissertação, serão tratadas algumas das propriedades do magnetismo, que são importantes para o avanço de tecnologias como os circuitos magnônicos, interferometria magnônica, conversores spin-onda/fotônica e sensores magnônicos. Estudaremos a propagação e espalhamento das ondas de spin em cadeias unidimensionais ferro e antiferromagnéticas com defeito de acoplamento, abordando temas como magnetização, tipos de ordenamentos magnéticos, ondas de spin, mágmons e possíveis aplicações no campo da computação quântica.

Oscilações coletivas em um sistema de spins são denominadas por ondas de spin. A explicação para este fenômeno é que a perturbação se propaga pelo sistema

na forma de uma onda. A quantização das ondas de spin em um sistema de spins acoplados é definida pela literatura como mágnon. Os mágnons precisam apenas de uma condição para surgirem e esta condição é que spins de sítios diferentes interajam. Os mágnons aparecem em vários tipos de materiais, dentre eles, os ferromagnéticos e antiferromagnéticos que são o foco deste trabalho [10][11, 12].

Os mágnons são considerados quasipartículas que surgem da interação entre spins vizinhos através da interação de troca. Esta é fundamentada a partir do princípio de exclusão de Pauli. Um ferromagneto no estado fundamental tem todos os seus spins orientados na mesma direção, isto é, paralelamente. Pequenas oscilações nos spins podem ser descritas pelo comportamento de um oscilador harmônico, pois perturbações sutis provocam ligeiros desvios do alinhamento em relação ao estado fundamental. Estes desvios fazem os spins oscilarem em torno de sua posição inicial que são também posições de equilíbrio [13]. Veja a figura 1.1 a seguir :

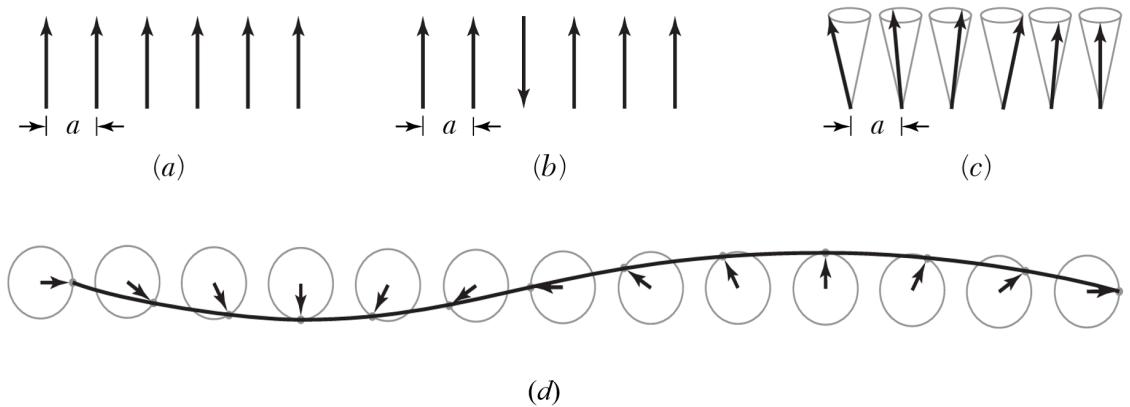


Figura 1.1: Em (a) é mostrado o estado fundamental de um ferromagneto simples, onde os spins estão uniformemente separados por uma distância  $a$  e orientados na mesma direção. Em (b) um spin está invertido, configurando uma possível excitação. Em (c) é ilustrado uma onda de spin na configuração de spins em linha. Sucessivos spins em movimento de precessão em fase por um ângulo constante. Por fim, em (d) os spins são observados de cima, possibilitando a observação do comprimento de onda. observa-se que a onda de spin é desenhada a partir das extremidades superiores dos vetores de spin, que estão em fase com uma diferença angular constante ao longo da configuração. Figura adaptada a partir de [1].

Os diferentes modos de precessão dos spins de uma cadeia em um campo magnético externo afetam a energia do sistema. No modo uniforme, o movimento de precessão dos spins acontece em fase, logo é sincronizado sem diferença de ângulo de rotação, mantendo a menor energia de excitação. Neste modo, as ondas de spin têm como característica o comprimento de onda infinito que não contribui de maneira adicional à frequência de precessão. Já a frequência ou taxa de precessão depende apenas do campo externo. Outro modo muito importante é o modo coletivo. Neste, o movimento de precessão dos spins acontece fora de fase, onde a fase varia no espaço. Outra maneira de entender o modo coletivo é pensar que os spins estão em fase com uma diferença angular constante e gradual entre todos os spins ao longo da configuração, passando a ideia de que cada spin possui um pequeno avanço ou

atraso no movimento de precessão em relação ao seu anterior. Uma fase completa é determinada pela diferença angular de  $2\pi$  entre o primeiro e o último spin, onde todos os spins contribuem de maneira contínua para a formação da onda (ver a Fig.1.1d). O modo coletivo tem comprimento de onda finito e possui maior energia em comparação ao modo uniforme, pois no modo coletivo a energia de interação de troca contribui. A contribuição da energia de troca aumenta quando o comprimento de onda diminui e isso favorece o aumento da energia total da excitação. À medida em que o comprimento de onda diminui, os spins ficam em estados mais próximos. Estes têm orientações com diferenças de fase. Sabemos que a interação de troca tentará alinhar estes spins. Logo, a interação de troca tende a aumentar a energia do sistema[1, 11, 14, 15, 16].

Os mágmons mediam a interação entre os spins vizinhos e isso define a relação de dispersão. Esta é responsável por descrever como as ondas de spin se propagam no material. A frequência natural do sistema  $\omega$  (frequência do modo normal), assim como a relação de dispersão, dependem do vetor de onda  $k$ , que define tanto a forma quanto o comprimento de onda da oscilação do sistema. O vetor de onda  $k$  é escrito como a razão entre uma fase completa  $2\pi$  pelo comprimento da onda de spin  $\lambda$ , que representa a distância entre os spins que completam um ciclo completo de fase, logo  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ . Assim,  $k$  define o número de oscilações que a onda de spin executa em uma determinada distância [13, 1, 11].

O controle das propriedades magnéticas de materiais avançados está no centro de novas tecnologias promissoras, destinadas a suprir a crescente demanda por armazenamento e por processamento de dados mais eficientes. De fato, o magnetismo

moderno reside em pelo menos dois campos de pesquisa emergentes, com propostas semelhantes para lidar com essa busca. A spintrônica [17, 18] combina as propriedades da carga e do spin do elétron para criar dispositivos capazes de controlar a ordem magnética usando correntes polarizadas por spin. O processo para criação dessas correntes envolve a detecção e manipulação dos spins dos elétrons, estes podem ser polarizados a partir da interação com materiais ferromagnéticos, campos elétricos ou consequência do acoplamento spin-orbita. Essas interações tornam possível o alinhamento dos spins em uma orientação preferencial, gerando as correntes polarizadas por spin. Por outro lado, a Magnônica [19, 20] explora o controle e propagação de mágmons, a quase-partícula de ondas de spin, com um propósito semelhante. O segundo caso examina fenômenos ondulatórios [21] na dispersão dos mágmons ao longo do material, como a transmissão eficiente em nanoestruturas artificialmente projetadas [22, 23]. A comunidade científica tem testemunhado um crescente interesse de pesquisa nas últimas décadas no controle do processo de espalhamento de ondas de spin ao longo de materiais dado o enorme potencial de aplicações em novos dispositivos [22, 24], metamateriais [25, 26] e computação baseada em ondas de spin [27, 28].

Configurações distintas foram empregadas para investigar propostas de dispositivos para controlar a dispersão de ondas de spin de forma eficaz [29, 20]. Os cristais magnônicos [19, 30], por exemplo, são materiais magnéticos artificialmente estruturados, nos quais as propriedades dos mágmons são controladas por uma variação periódica nas propriedades magnéticas, como a saturação magnética ou a interação de troca [23, 24, 31, 26]. Eles são análogos aos cristais fotônicos em óptica, onde a estrutura periódica leva à formação de intervalos de banda e ao controle

da propagação da onda. Existem propostas para explorar cristais magnônicos como sensores [32] e processamento de dados [33]. Por exemplo, o diodo de onda de spin [34, 35] é crucial no controle da direção de propagação da onda de spin e fornece a estrutura básica para implementar circuitos magnônicos [36, 37], processamento de sinais [2, 38, 39] e dispositivos não recíprocos. Os dispositivos não recíprocos possuem propriedades de propagação das ondas de spin que dependem da direção de deslocamento das mesmas. Logo, uma onda de spin que se propaga em uma determinada direção pode possuir amplitude, frequência ou fase diferente daquelas que viajam na direção contrária. A não reciprocidade está associada a quebra de simetria e também a introdução de anisotropias estruturais ou magnéticas no material [25, 40, 41].

Estruturas magnéticas periódicas e defeitos locais induzem efeitos interessantes na transmissão e na localização de ondas de spin. Por exemplo, nos cristais magnônicos a propagação das ondas de spin só ocorrem em faixas de frequência específicas, chamadas de bandas permitidas. As faixas de frequência as quais não são possíveis a propagação das ondas de spin são conhecidas por intervalos de bandas proibidas. Ao introduzir defeitos como alterações na periodicidade ou na composição do material, podem ser produzidas regiões onde as ondas de spin ficam confinadas, dando origem aos modos localizados. Os modos localizados podem ocorrer em frequências que antes no material sem defeito seriam proibidas. Os defeitos podem atuar como armadilhas para as ondas de spin, de forma que é possível concentrá-las nestas determinadas regiões, permitindo o controle das ondas de spin, que é fundamental para o desenvolvimento de dispositivos magnônicos [2, 3].

Nos trabalhos [2, 3] são analisadas as propagações das ondas de spin através estruturas periódicas formadas a partir da junção de várias camadas magnéticas. Em [2] as camadas possuem a mesma espessura, porém apresentam magnetizações diferentes. Já em [3], as camadas iniciais *a* e *b* possuem espessuras e valores de anisotropia magnéticas diferentes, que se repetem periodicamente. Nos dois casos, origina-se um material estruturado de maneira que afeta o comportamento das ondas de spin, devido às periodicidades dos mesmos. Ao inserir uma camada magnética com dimensões e valor de anisotropia magnética distinta, ela ocasiona a ruptura da simetria estrutural do material e isso permite que as ondas de spin que antes ficavam em regiões ou zonas não permitidas sejam localizadas na camada com espessura diferente e produz modos aprisionados ou localizados dentro dos intervalos de banda magnônicas, conhecidos como bandas de parada (do inglês "stopbands"). As bandas de parada são intervalos de frequência em estruturas periódicas. A camada com espessura diferente atua como um defeito, que confina as ondas de spin em uma determinada frequência dentro da banda de parada, provocando o surgimento de modos localizados. Estes trabalhos estudam a dispersão, a reflexão e a transmissão das ondas de spin em diferentes configurações de simetria e defeitos. Por fim, são feitas analogias entre as estruturas magnéticas estudadas com cristais fotônicos, sugerindo ser possível entendê-los como cristais magnônicos unidimensionais. A seguir, veja as figuras 1.2 e 1.3 que ilustram as estruturas dos materiais estudados.

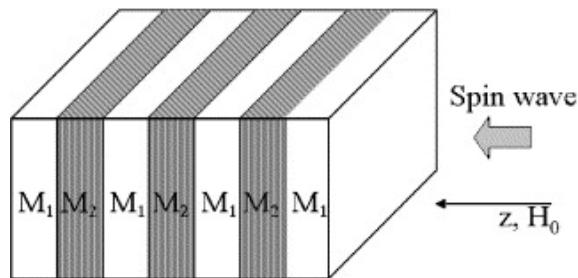


Figura 1.2: Estrutura do problema estudado no trabalho [2], mostrando a propagação da onda de spin através da estrutura com múltiplas camadas periódicas uniformes e ferromagnéticas.

A figura 1.3 a seguir, mostra a inserção de uma camada magnética com espessura e valor de anisotropia magnética distinta em relação as camadas periódicas do material. Essa camada adicional pode atuar como um defeito, capaz de confinar as ondas de spin em uma certa frequência dentro da banda de parada, possibilitando o surgimento de modos localizados.

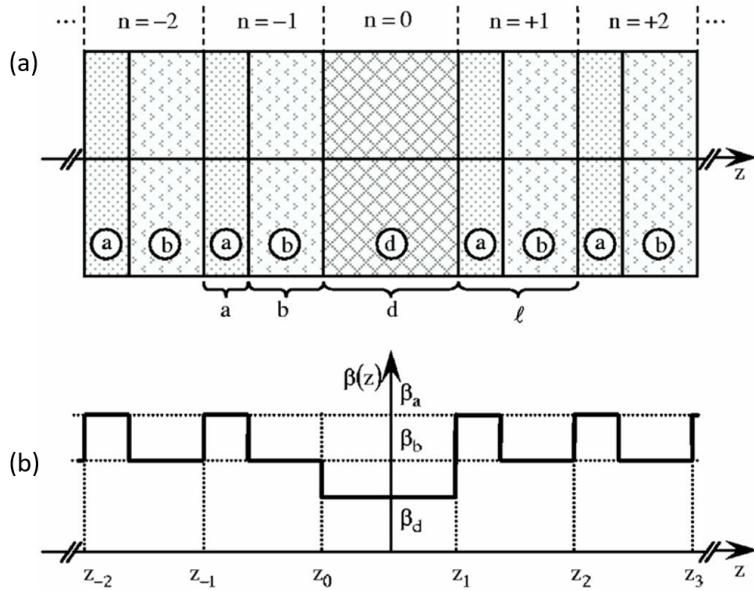


Figura 1.3: (a) Estrutura do problema estudado no trabalho [3], mostrando as diferentes espessuras entre as camadas  $a$  e  $b$  do filme fino de um cristal magnônico finito e unidimensional que repetem-se periodicamente. A camada  $d$  adicionada possui espessura maior e pode ser entendida como um defeito. Além da espessura diferente entre as camadas, temos também valores distintos de anisotropia associados. Na Figura (b) podemos observar que as camadas apresentam valores distintos de anisotropia  $\beta_a$ ,  $\beta_b$  e  $\beta_d$  ao longo do eixo de anisotropia  $\beta(z)$ . É considerado que as anisotropias, o campo magnético interno e a direção de magnetização estática são todos perpendiculares às camadas do cristal magnônico.

Os efeitos de um campo magnético não homogêneo em filmes ferromagnéticos modificam a amplitude e a fase da onda de spin transmitida. O campo localizado em uma heterogeneidade age como uma barreira. Assim, a propagação da onda de spin pode ser controlada ajustando a magnitude do campo magnético [42, 43]. Além disso, foi investigada a influência de defeitos de rede em cristais magnônicos bidimensionais, baseados em uma rede hexagonal de antiponto  $Ni_{80}Fe_{20}$  [44]. A relação entre a topologia e a densidade dos defeitos demonstrou impactar a ressonância ferromagnética das ondas de spin. Os defeitos de linha também estão presentes nos

cristais magnônicos bidimensionais devido à localização da onda de spin ao longo dessas linhas, uma característica com aplicação potencial em guias de onda na faixa de frequências de micro-ondas [44, 45].

Estudos recentes sobre filmes ferromagnéticos finos, exploram diferentes maneiras de induzir defeitos locais por meio de interações anisotrópicas, incluindo anisotropia magnética controlada por tensão, uma técnica promissora para materiais magnônicos em nanoscalas [4]. O trabalho em questão estuda a reflexão e a transmissão das ondas de spin quando são criadas fronteiras internas no material, essas fronteiras são produzidas por regiões com variações de anisotropia ou campo magnético de polarização. O estudo considera tanto a amplitude das ondas de spin, quanto as mudanças de polarização das mesmas quando elas incidem e atravessam a fronteira de anisotropia. Foram observados resultados interessantes como: ao considerar a polarização ocorreu aumento do coeficiente de reflexão da amplitude da onda de spin; tanto as ondas transmitidas quanto as refletidas sofrem mudança de fase, com o aparecimento de uma fase adicional  $\Delta\phi \neq 0, \pi$ ; criação de ondas adicionais que tem decaimento rápido nas proximidades da fronteira anisotrópica; mesmo com mudanças significativas na polarização da onda transmitida, uma onda de spin pode ultrapassar a fronteira finita de anisotropia sem sofrer reflexão, para isso é necessário que uma condição de ressonância específica seja atendida. Segue a ilustração dos sistemas estudados que levam em consideração as fronteiras internas no material, produzidas por variações de anisotropia ou campo magnético de polarização:

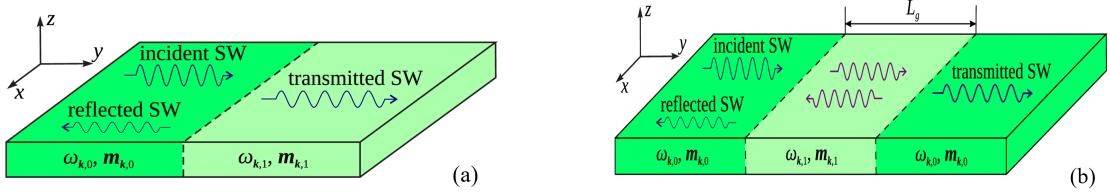


Figura 1.4: (a) ilustra uma onda de spin (SW) se propagando em um guia de onda ferromagnético (FM) com uma fronteira anisotrópica interna. A fronteira separa o guia de onda em duas regiões, essas regiões possuem diferentes propriedades magnéticas, o que origina diferentes relações de dispersão e polarização para as ondas de spin. A onda de spin ao atingir a fronteira, pode ser parcialmente transmitida e parcialmente refletida. Na Figura (b) temos um caso similar, porém o guia de onda possui duas fronteiras internas que delimitam uma região com comprimento finito  $L_g$  que possui parâmetros magnéticos distintos. A onda de spin incidente tem o mesmo comportamento descrito na figura anterior, porém a parte transmitida da onda atinge a segunda fronteira, podendo novamente ser parcialmente transmitida e parcialmente refletida novamente, resultando em um maior conjunto de ondas de spins no material. Figura adaptada de [4].

De fato, defeitos de superfície na forma de rugosidade induzem heterogeneidades anisotrópicas nas superfícies do filme magnético fino. Esses defeitos superficiais se acoplam à dinâmica da onda de spin e afetam diretamente os mecanismos de transmissão e reflexão dos mágmons [46]. Trabalhos anteriores que investigam os efeitos das impurezas em sistemas magnéticos e de elétrons de baixa dimensão são dignos de menção, uma vez que as impurezas quânticas produzem fenômenos fascinantes de muitos corpos quando incorporadas a um ambiente hospedeiro [47, 48]. Por exemplo, as impurezas demonstraram afetar a condutividade térmica de dielétricos ferromagnéticos 2D [49]. A influência das impurezas no espectro de ondas de spin de ímãs 2D antiferromagnéticos e não colineares também foi abordada [47, 50]. Trabalhos recentes investigaram o efeito das impurezas no emaranhamento de sistemas quânticos de muitos corpos [51, 52], como a localização do emaranhamento na cadeia XY spin-1/2, induzida por um único defeito representado por um campo de

fixação [53] e a criticidade quântica no modelo típico de bóson de spin de impureza quântica acoplado a um banho [54]. A transmissão de ondas de spin ao longo da cadeia de Heisenberg  $1D$  com segmentos de impurezas aleatórias também foi investigada há vários anos [55], destacando a possibilidade de transmissão de ondas de spin ressonantes sem reflexão.

Neste trabalho, investigamos o processo estacionário de espalhamento de ondas de spin em um sistema composto por duas cadeias de spin de Heisenberg isotrópicas semi-infinitas interconectadas por um defeito de ligação com interação  $XXZ$  anisotrópica e uma contribuição antissimétrica de Dzyaloshinskii-Moriya. Ambos os casos de mágmons ferro e antiferromagnéticos serão considerados. Dentro de uma abordagem semiclássica, determinaremos o coeficiente de transmissão dos mágmons de entrada e exploraremos a influência das características de acoplamento de defeitos, contrastando as principais características do espalhamento de mágmons ferro e antiferromagnéticos. Em particular, mostraremos que o defeito de ligação pode se tornar transparente sob combinações específicas dos parâmetros físicos do defeito.

No próximo capítulo, discutiremos acerca do momento magnético e do spin do elétron. Os principais tipos de momentos magnéticos são o orbital e o de spin, e são originados a partir de propriedades diferentes. Um é relacionado ao momento angular do elétron devido ao movimento orbital e o outro se relaciona com o spin do elétron, que é uma propriedade intrínseca da partícula. Em seguida falaremos sobre o spin do elétron, através do experimento de Stern-Gerlach, abordaremos brevemente o contexto histórico do desenvolvimento da Mecânica Quântica e falaremos sobre os principais operadores e propriedades quânticas utilizados nesta pesquisa.

# Capítulo 2

## Momento Magnético e Spin do Elétron

### 2.1 Momento Magnético

O principal objeto de estudo no magnetismo é o momento magnético. Este pode ser definido como uma propriedade das partículas de gerar campo magnético e indicar a sua magnitude e direção. Outra importante característica é a capacidade de interagir com um campo magnético externo. O surgimento do momento de dipolo magnético ocorre a partir de variadas fontes, as principais são os movimentos orbitais dos elétrons em volta núcleo atômico e o spin [11][5].

Os principais tipos de momentos magnéticos são o orbital e o de spin. O momento magnético orbital ocorre devido ao movimento orbital dos elétrons em torno do núcleo atômico. O elétron é uma partícula que possui carga elétrica e realiza movimento orbital. Logo, este movimento origina uma corrente elétrica que

é associada a um campo magnético. Desta maneira, ocorre a formação do momento magnético orbital [56] [11]

O momento magnético de spin está relacionado ao spin que é uma propriedade intrínseca da partícula. Este tipo de momento magnético não está associado ao movimento do elétron em torno do núcleo atômico. Este pode ser interpretado de forma simples como a precessão do vetor de spin em torno de um eixo definido pelo campo magnético externo. Contudo, vale lembrar que os movimentos do spin não correspondem simplesmente a rotações clássicas [56] [11].

No eletromagnetismo clássico, o momento magnético está relacionado com correntes elétricas e é a base do entendimento acerca dos materiais magnéticos. O momento magnético é um vetor e, portanto, é capaz de nos dizer a magnitude e orientação do dipolo magnético. Fazendo uma combinação entre o eletromagnetismo clássico e a mecânica quântica podemos analisar o movimento circular do elétron e encontrar o momento magnético que está ligado ao momento magnético orbital do elétron. Este tem relação com os números quânticos orbital e magnético, respectivamente  $l$  e  $m$  [5].

O momento magnético orbital pode ser descrito classicamente através do eletromagnetismo, e de maneira mais rigorosa e abrangente pela mecânica quântica. Consideremos o elétron com carga  $-e$  e massa  $m$  orbitando o núcleo atômico, com uma órbita de Bohr circular de raio  $r$  e com velocidade em módulo  $v$ . A partir desta consideração, é possível encontrar a relação entre o momento magnético orbital  $\mu_l$  e o momento angular  $\vec{L}$ . A figura 2.1 a seguir, ilustra o sistema descrito.

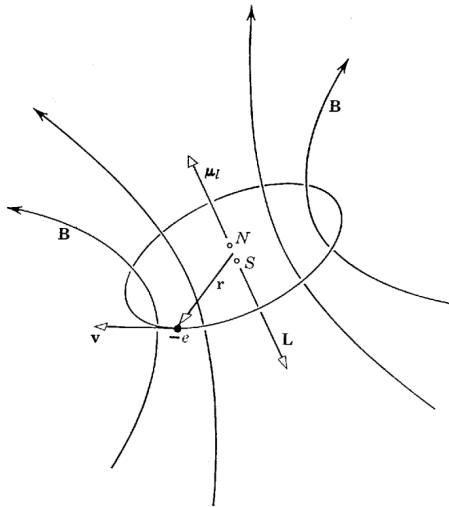


Figura 2.1: Elétron movendo-se em uma órbita de Bohr. Fonte da figura [5].

A figura 2.1 ilustra um elétron em uma órbita de Bohr, sendo  $\vec{\mu}_l$  o momento de dipolo magnético orbital e  $\vec{L}$  o momento angular orbital deste elétron. O movimento da carga dá origem ao campo magnético indicado pelas linhas curvadas. No centro da figura encontramos o dipolo magnético fictício, com seus polos Norte e Sul, que seria capaz de gerar um campo magnético idêntico longe da espira.

O elétron gera um momento de dipolo magnético orbital  $\vec{\mu}_l$  devido ao seu movimento em torno do núcleo. Esse fenômeno está associado ao fato do elétron ser uma partícula carregada. A criação de uma corrente ocorre devido ao movimento orbital da partícula carregada em torno do núcleo. De acordo com a teoria eletromagnética, uma espira de corrente gera uma campo magnético e este campo se observado de uma longa distância da espira é o mesmo que o campo magnético produzido por um dipolo magnético localizado no centro da espira e com orientação perpendicular ao plano orbital, ou seja, a área do plano da corrente [56][5].

Em seguida, associamos o momento de dipolo magnético a uma espira. Isto

é possível pois o campo magnético gerado pela espira depende do produto entre a secção reta de sua área e a corrente, quando consideramos pontos distantes da espira [57]. A espira possui seção de área reta  $A$  e corrente  $i$ . Esta associação é feita por conveniência de acordo com o eletromagnetismo e chegamos então a seguinte expressão para o módulo de  $\vec{\mu}_l$ :

$$\mu_l = iA. \quad (2.1)$$

Sendo o módulo da corrente definido por

$$i = \frac{e}{\tau}. \quad (2.2)$$

Sabemos que a corrente é definida como a quantidade de carga que flui em um ponto por unidade de tempo. Onde  $e$  é a carga elétrica de um elétron e  $\tau$  é o período de tempo para que o elétron percorra a órbita completa. Podemos então reescrever a equação 2.2 da seguinte maneira:

$$i = \frac{ev}{2\pi r}. \quad (2.3)$$

O período  $\tau$  foi substituído pela relação entre a velocidade linear  $v$  da partícula em sua trajetória circular e o perímetro da órbita  $2\pi r$

$$\tau = \frac{2\pi r}{v}. \quad (2.4)$$

Substituindo a equação 2.3 da corrente  $i$  e a área  $A = \pi r^2$  na equação 2.1 do módulo do momento de dipolo magnético orbital, obtemos

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

simplificando

$$\mu_l = \frac{evr}{2}. \quad (2.6)$$

Podemos encontrar a relação entre o momento de dipolo magnético orbital  $\vec{\mu}_l$  e o momento angular orbital  $\vec{L}$ . O momento de dipolo magnético fictício no centro da área da espira aponta na direção perpendicular ao plano orbital e ao mesmo tempo é antiparalelo ao momento angular. A grandeza  $\mu_l$  nos diz qual é a intensidade do dipolo magnético que depende da caga e da velocidade do elétron, assim como do raio orbital. A razão pela qual o momento de dipolo magnético é antiparalelo ao momento angular orbital é o sinal da carga do elétron. Caso estivéssemos analisando um sistema onde uma carga positiva estivesse em movimento,  $\vec{\mu}_l$  e  $\vec{L}$  apontariam na mesma direção.

O movimento circular do elétron o faz possuir momento angular orbital  $\vec{L}$ . O elétron é uma partícula que possui massa e este movimento da massa  $m$  em torno do núcleo é o responsável. Podemos calcular  $\vec{L}$  da seguinte maneira:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \quad (2.7)$$

Sendo  $\vec{r}$  o vetor posição do elétron em relação ao núcleo e  $\vec{p} = m\vec{v}$  é o momento

linear do elétron, dado pelo produto entre a massa  $m$  e a velocidade  $\vec{v}$ . Como  $\vec{r}$  e  $\vec{v}$  são perpendiculares entre si no movimento orbital, o módulo de  $\vec{L}$  será:

$$L = mr v. \quad (2.8)$$

Fazendo a razão entre os módulos de  $\vec{\mu}_l$  e de  $\vec{L}$ ,

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{\frac{evr}{2}}{mr v} = \frac{e}{2m}. \quad (2.9)$$

Também podemos escrever  $\vec{\mu}_l$  na forma vetorial a partir da equação,

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{L}. \quad (2.10)$$

Vamos multiplicar a expressão acima por  $\frac{\hbar}{\hbar}$ , sendo  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , a constante de Planck reduzida. Sabemos que o Magnetón de Bohr é escrito como  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ , logo a expressão vetorial de  $\vec{\mu}_l$  pode ser reescrita em termos de  $\mu_B$

$$\vec{\mu}_l = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}, \quad (2.11)$$

resta apenas adicionar o fator giro-magnético  $g_l$

$$\vec{\mu}_l = \frac{g_l \mu_B}{\hbar} \vec{L}. \quad (2.12)$$

Este fator é responsável por ajustar a relação entre o momento de dipolo

magnético e o momento angular, dependendo se estamos considerando o momento angular orbital ou o momento angular de spin. Quando o momento angular for puramente orbital  $g \approx 1$  e quando for puramente momento angular de spin  $g \approx 2$  [8].

Podemos escrever também a componente  $Z$  do momento de dipolo magnético orbital  $\mu_{l_z}$ , para isso é considerada apenas a componente  $L_z$  do momento angular orbital, veja a seguir:

$$\mu_{l_z} = \frac{g_l \mu_B}{\hbar} L_z. \quad (2.13)$$

Podemos ver que as expressões finais de  $\vec{\mu}_l$  e  $\mu_{l_z}$  não dependem do raio e da frequência orbital, logo não é dependente da teoria mecânica. Dito isto, as expressões são válidas tanto para momento de dipolo magnético orbital, quanto para o momento de dipolo magnético de spin.

A relação entre o momento de dipolo magnético orbital e o momento angular orbital é válida em muitos contextos, porém pode não ser o bastante para descrever alguns fenômenos que envolvem interações mais complexas, como a interação de troca entre os spins, o acoplamento spin-órbita e outras interações quânticas que surgem nos sistemas eletrônicos correlacionados [58, 59]. Aqui será introduzida a relação do momento de dipolo magnético de spin com o momento angular intrínseco ou de spin. Na próxima seção falaremos sobre o spin do elétron, onde descreveremos de maneira mais detalhada o experimento de Stern-Gerlach para explicá-lo. Falaremos rapidamente aqui sobre o experimento para auxiliar na compreensão do

momento de dipolo magnético de spin.

No experimento de Stern-Gerlach, um feixe de átomos de prata passa por um campo magnético não homogêneo que exerce forças sobre os momentos de dipolo magnéticos dos átomos. A interação dos momentos de dipolo magnético dos átomos com o campo magnético não homogêneo provoca a separação do feixe em duas partes. Essa separação evidencia a quantização do momento angular total, sendo posteriormente compreendida como uma evidência experimental da existência do spin do elétron, onde cada parte do feixe está associado a um possível valor do spin do elétron em relação ao eixo do campo magnético. [6].

Este resultado não era esperado, pois ainda não se tinha conhecimento do spin. No exemplo, o átomo de prata é usado e este possui momento de dipolo magnético orbital na componente  $z$  igual a zero. Isto nos diz que o momento angular  $L_z$  é nulo devido a camada eletrônica  $s$  ser a ultima com um elétron distribuído. A explicação para a separação dos feixes está na existência do spin ou momento angular intrínseco  $\vec{S}$  que está diretamente ligado ao momento de dipolo magnético de spin  $\vec{\mu}_s$ . Estes são os responsáveis pela separação dos feixes dos átomos de prata. Uma importante consideração é o fato do momento angular total  $\vec{J}$  ser dado pela soma dos momentos angulares orbital e de spin, respectivamente  $\vec{L}$  e  $\vec{S}$  [6][8].

O experimento de Stern-Gerlach pode ser tratado como um sistema de dois níveis e possui natureza quântica. Um dos objetivos é observar a ação que o campo magnético  $\vec{B}$  realiza nos átomos de prata. Devido ao momento angular intrínseco  $\vec{S}$  dos elétrons, o feixe se divide em componentes discretas. Os átomos possuem momento de dipolo magnético  $\vec{\mu}$  se o spin nuclear for desconsiderado. É visto que o

momento magnético do átomo como um todo provem somente do momento angular intrínseco de um único elétron, localizado na ultima camada semi-preenchida (5s). Portanto o  $\vec{\mu}$  é proporcional ao spin do elétron  $\vec{S}$  [6] [60]. Desta maneira,

$$\vec{\mu}_s \propto \vec{S}. \quad (2.14)$$

As relações entre o momento magnético e o spin são as seguintes:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S}, \quad (2.15)$$

$$\mu_{s_z} = \frac{-g_s \mu_B}{\hbar} S_z = -g_s \mu_B m_s. \quad (2.16)$$

Na primeira relação temos  $\vec{\mu}_s$ , o momento magnético de spin,  $g_s$  o fator giromagnético do spin,  $\mu_B$  o Magneton de Bohr,  $\hbar$  constante de Planck dividida por  $2\pi$  e  $\vec{S}$  operador do momento angular de spin. Na segunda relação aparecem  $\mu_{s_z}$ , que é a componente  $Z$  do momento magnético de spin,  $S_z$  que é a componente  $Z$  do momento angular intrínseco e  $m_s$  número quântico magnético de spin. Acontece uma simplificação na última igualdade devido  $S_z = m_s \hbar$ .

O fator giromagnético  $g_s$  é uma constante de proporcionalidade que relaciona o momento angular intrínseco com o momento magnético. O valor de  $g_s$  é um pouco maior que 2, sendo descrito pela Eletrodinâmica Quântica. Este valor de  $g_s$  diz que a contribuição do spin para o momento magnético é um pouco maior do que a contribuição do momento angular orbital. As partículas possuem momento magnético, este por sua vez, tem ligação direta com o movimento orbital e com o

spin. O elétron é um ótimo exemplo, pois ao orbitar o núcleo atômico gera um momento magnético proporcional associado ao movimento em torno do núcleo. A relação do spin com o momento magnético também é proporcional, porém o fator de proporcionalidade é  $g_s$ , o que torna o comportamento do momento magnético associado ao spin um pouco diferente do momento magnético associado ao momento angular orbital [8][60].

A energia de interação entre o momento magnético  $\vec{\mu}_s$  e o campo magnético  $\vec{B}$  é dada por

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.17)$$

A energia potencial mostrada na equação 2.17 é associada a interação entre  $\vec{\mu}_s$  e  $\vec{B}$ . O sinal negativo nesta equação nos diz que o momento magnético tende a se alinhar com o campo magnético para minimizar a energia potencial do sistema.

## 2.2 Spin do elétron

A compreensão humana acerca dos fenômenos da natureza sempre evoluiu com o passar do tempo. Isto se aplica não somente ao que é possível observar em nível macroscópico, mas também em nível microscópico [61]. O início do século XX foi um período revolucionário para as Ciências da Natureza, pois foi um momento de síntese do conhecimento acumulado a partir experimentos e resultados que são pilares da compreensão dos fenômenos microscópicos, antes não explicados de forma satisfatória pela Física Clássica. Logo, surgiu a necessidade de uma nova teoria que fosse mais abrangente e completa em suas aplicações. Muitas personalidades

da Física e áreas afins foram extremamente importantes para o desenvolvimento e formulação da Mecânica Quântica, dentre eles estão Heisenberg, Schrödinger e Dirac. [6]

O Spin é uma propriedade física intrínseca das partículas e gera campo magnético, não possuindo análogo na física clássica. O elétron foi a primeira partícula cujo spin foi detectado. Em 1925 Uhlenbeck e Goudsmit propuseram o spin com o propósito de explicar a separação de linhas no espectro do hidrogênio, chamada de estrutura fina e hiperfina que até então não era compreendida. As evidências acerca deste fenômeno quântico foram observadas um pouco antes, no experimento de Otto Stern e Walter Gerlach em 1922 na Alemanha [61]. [57] [60].

Antes do experimento de Stern-Gerlach, era esperado com base na física clássica, que os momentos angulares e os momentos magnéticos associados às partículas poderiam assumir valores contínuos. Seguindo esse entendimento, o resultado esperado para o experimento de Stern-Gerlach era um espectro contínuo de  $\mu_z$  variando entre  $-|\vec{\mu}|$  à  $|\vec{\mu}|$ , sendo  $\vec{\mu}$  o momento magnético [6]. A expectativa seguia a compreensão clássica, onde os momentos angulares poderiam se orientar em qualquer direção do espaço. Nesse período, ainda não havia a compreensão do momento angular intrínseco  $\vec{S}$ , logo o momento angular total  $\vec{J}$  deveria ser igual ao momento angular orbital  $\vec{L}$ . O átomo de prata (Ag) possui número atômico 47, ao fazer a distribuição eletrônica, observa-se que a última camada distribuída é  $5s$ , possuindo um elétron desemparelhado; as camadas anteriores estão completamente preenchidas. O momento angular orbital é igual a zero para a camada  $s$ . Se o spin for desconsiderado, o momento angular total do átomo seria igual ao orbital, ou seja,

nulo. Desta maneira, o momento de dipolo magnético associado do átomo de prata deveria ser zero, de acordo com a visão clássica [57] [60].

O experimento de Stern-Gerlach é descrito da seguinte forma: Um feixe de átomos de prata é emitido através de um pequeno furo no forno a alta temperatura. O feixe de átomos que conseguiu escapar passa por um colimador, que é um dispositivo utilizado para direcionar e suavizar a radiação. Em seguida, passa por um campo magnético não homogêneo, gerado por dois imãs, onde um tem aresta pontiaguda e no outro a aresta é plana, provocando uma força sobre os momentos de dipolo magnéticos dos átomos. A interação dos momentos de dipolo magnético dos átomos com o campo magnético não homogêneo provoca a separação do feixe em duas partes. Essa separação evidencia a quantização do momento angular total, sendo posteriormente compreendida como uma evidência experimental da existência do spin do elétron, onde cada parte do feixe está associada a um possível valor do spin do elétron em relação ao eixo do campo magnético. Por fim, os feixes atingem um anteparo, onde apenas dois valores discretos do momento magnético  $\mu_z$  foram observados, descritos por dois pontos bem definidos e separados correspondentes às projeções do spin  $m_s = 1/2$  e  $m_s = -1/2$ , mostrando que os momentos angulares assumem valores quantizados e não contínuos [6, 60]. Segue a ilustração do experimento de Stern-Gerlach:

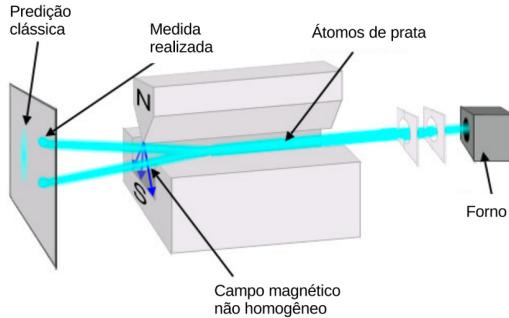


Figura 2.2: Esboço do experimento de Stern-Gerlach. A figura foi adaptada a partir de [6].

A partir dos resultados experimentais, fica clara a existência do momento angular intrínseco  $\vec{S}$ , também chamado de spin. O spin  $\vec{S}$  é um operador vetor, sendo associado ao número quântico  $s$  que representa o valor do spin de uma determinada partícula [57]. A multiplicidade das componentes do momento angular quântico é definida por  $2s + 1$ . No experimento de Stern-Gerlach o feixe de átomos de prata foi dividido em duas componentes após passar pelo campo magnético não-homogêneo, logo o valor do número quântico  $s$  é facilmente encontrado ao igualarmos  $2s + 1 = 2$ . Resolvendo a equação, encontramos o valor do spin do elétron  $s = 1/2$  [60].

Os operadores de spin descrevem as propriedades do momento angular intrínseco e possuem autovalores bem definidos para determinados estados de spin [6]. A relação do operador do momento angular de spin ao quadrado  $S^2$  e do operador momento angular de spin na componente  $S_z$  com os números quânticos  $s$  e  $m_s$  é dada da seguinte forma:

$$S^2|s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle, \quad (2.18)$$

$$S_z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle. \quad (2.19)$$

A primeira relação mostra que o operador  $S^2$  atua sobre o estado  $|s, m_s\rangle$  e tem como resultado um autovalor  $\hbar^2 s(s+1)$  multiplicando o estado original. A segunda relação mostra que o operador  $S_z$  atua sobre o estado  $|s, m_s\rangle$  e tem como resultado um autovalor  $\hbar m_s$  multiplicando o estado original. Sendo  $|s, m_s\rangle$  o estado de spin,  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ ,  $s$  é o número quântico do spin, que pode ser um inteiro ou um semi-inteiro e  $m_s$  é o número quântico magnético de spin, que varia de  $-s$  a  $+s$  em passos de 1. Para elétrons que possuem  $s = \frac{1}{2}$ , os valores possíveis de  $m_s$  são  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$ . Os autovetores são representados por  $|\uparrow\rangle$  quando o spin do elétron está orientado para cima, ou seja,  $m_s = +\frac{1}{2}$  e  $|\downarrow\rangle$  para quando o spin do elétron está orientado para baixo, com  $m_s = -\frac{1}{2}$ .

Retomando a interpretação do experimento de Stern-Gerlach, partindo da consideração de que o campo magnético não-uniforme está orientado na direção  $Z$ . A medida a ser feita será na componente  $z$  dos spins dos elétrons. As relações entre o operador  $S_z$  e seus autoestados de spin  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , para o caso de uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  são as seguintes:

$$S_z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \quad (2.20)$$

$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \quad (2.21)$$

Isso significa que  $|\uparrow\rangle$  é um autovetor de  $S_z$  com autovalor  $+\frac{\hbar}{2}$  e  $|\downarrow\rangle$  é um autovetor de  $S_z$  com autovalor  $-\frac{\hbar}{2}$ . Então os valores possíveis são

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (2.22)$$

Também é possível escrever o operador  $S_z$  utilizando a notação da equação 2.23,

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|). \quad (2.23)$$

A equação 2.23 acima, mostra o operador  $S_z$  escrito como combinação linear dos operadores de projeção dos estados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ . Sendo  $|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$  o operador projeção associado ao estado de spin  $|\uparrow\rangle$  cuja projeção no eixo  $z$  tem autovalor  $\frac{\hbar}{2}$ , enquanto  $|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$  é o operador projeção associado ao estado de spin  $|\downarrow\rangle$  cuja projeção no eixo  $z$  possui autovalor  $-\frac{\hbar}{2}$ .

Os autovetores de  $S_z$ ,  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$  são escritos matricialmente da seguinte maneira:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Estes autovetores formam uma base e obedecem as condições de ortogonalidade descritas abaixo:

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1, \quad (2.26)$$

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0, \quad (2.27)$$

Como  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$  são autovetores do operador  $S_z$ , a combinação linear deles pode representar um estado qualquer  $|\alpha\rangle$ :

$$|\alpha\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle, \quad (2.28)$$

As constantes  $a$  e  $b$  descrevem a densidade de probabilidade. Tomando  $|a|^2$  teremos a probabilidade do elétron estar no estado  $|\uparrow\rangle$ , da mesma forma para  $|b|^2$ , que nos dá a probabilidade de encontrar o elétron no estado  $|\downarrow\rangle$ . A soma de todas as probabilidades do sistema deve totalizar 1, então:  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ .

Outros operadores importantes na mecânica quântica também serão vistos neste trabalho, destacando o caso específico do spin-1/2, onde o espaço de Hilbert é bidimensional e descrito pelos estados base  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ . O operador identidade é um operador linear, e nesta representação pode ser aplicado em qualquer vetor

pertencente ao espaço de Hilbert, sem alterá-lo.

$$\mathbb{I} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|. \quad (2.29)$$

Os operadores  $S_+$  e  $S_-$  são chamados de operadores de levantamento e abaixamento de spin, respectivamente e atuam subindo ou descendo os estados de spin de uma partícula. Estes operadores também pertencem à álgebra restrita ao spin-1/2, atuando sobre os estados base do sistema e modificando suas projeções no eixo do campo magnético, sendo escritos como:

$$S_+ = \hbar |\uparrow\rangle\langle\downarrow|, \quad (2.30)$$

$$S_- = \hbar |\downarrow\rangle\langle\uparrow|. \quad (2.31)$$

Os operadores  $S_+$  e  $S_-$  acima, são ambos não hermitianos. Aplicando  $S_+$  num sistema de spin  $\frac{1}{2}$ , em que o estado de spin está inicialmente para baixo  $|\downarrow\rangle$ , ocorrerá a transformação do estado de spin para  $\hbar |\uparrow\rangle$ , logo  $S_+$  atua aumentando o valor do número quântico de spin  $m_s$  em uma unidade. Aplicando  $S_-$  no estado com spin para cima inicialmente  $|\uparrow\rangle$ , transformará o estado inicial no estado de spin  $\hbar |\downarrow\rangle$ , logo  $S_-$  atua diminuindo o valor do número quântico de spin  $m_s$  em uma unidade.

Caso  $S_+$  seja aplicado num estado inicialmente com spin para cima  $|\uparrow\rangle$ , ocorrerá a transformação em um estado nulo. O estado nulo também será obtido quando  $S_-$  for aplicado em  $|\downarrow\rangle$ . Fisicamente,  $S_+$  aumenta a componente de spin por uma unidade de  $\hbar$ . Caso a componente já esteja em seu valor máximo, o valor obtido

é um estado nulo. De maneira similar,  $S_-$  diminui a componente de spin por uma unidade de  $\hbar$ . Caso a componente já esteja em seu valor mínimo, o valor obtido também será um estado nulo.

Os operadores de levantamento e abaixamento são relacionados às componentes  $S_x$  e  $S_y$  do operador de spin  $\vec{S}$  no contexto do spin-1/2, sendo descritos como combinações lineares dessas componentes no espaço de Hilbert bidimensional, da seguinte forma:

$$S_+ = S_x + iS_y, \quad (2.32)$$

$$S_- = S_x - iS_y. \quad (2.33)$$

As definições dos operadores  $S_+$  e  $S_-$  acima são fundamentais para a descrição das transições entre os estados de spin. Os operadores  $S_x$  e  $S_y$  correspondem às componentes do operador de spin  $\vec{S}$  ao longo das coordenadas  $x$  e  $y$  respectivamente e podem ser compreendidos como mediadores dessas transições de estados de spin no espaço de Hilbert. Combinando os operadores  $S_+$  e  $S_-$ , é possível escrever  $S_x$  e  $S_y$

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-), \quad (2.34)$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-). \quad (2.35)$$

Os operadores  $S_x$  e  $S_y$  podem também ser escritos em função dos estados de

spin:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad (2.36)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2i} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| - |\downarrow\rangle\langle\uparrow|). \quad (2.37)$$

Escritos desta maneira, estamos considerando o caso específico do spin 1/2.

Podemos observar que  $S_x$  e  $S_y$  trocam os estados de spin  $|\uparrow\rangle$  para  $|\downarrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  para  $|\uparrow\rangle$  quando aplicados, devido a estrutura bidimensional do espaço de Hilbert que descreve o spin 1/2. As mudanças de estados devido  $S_y$  diferem por uma fase complexa  $i$ . Podemos interpretar que, estes operadores quando aplicados produzem transições entre os estados de spin.

O operador  $\vec{S}$  pode ser escrito como a soma dos operadores  $S_x$ ,  $S_y$  e  $S_z$ , representando respectivamente as componentes  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  do spin, como já foram detalhados antes. Podemos representar estes operadores como matrizes, veja a seguir:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

A partir das matrizes dos operadores acima, é possível escrever as matrizes de Pauli, veja a seguir:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

No capítulo a seguir serão discutidos os tópicos de magnetização e ordenamento magnético. Dentro do tópico de magnetização, será explicada a relação entre os momentos magnéticos e a magnetização macroscópica apresentada por alguns materiais quando submetidos a ação de um campo magnético externo, assim como a susceptibilidade magnética destes. Dentro do tópico de ordenamentos magnéticos falaremos sobre o diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo e antiferromagnetismo. Serão explicadas de maneira breve o porque dos diferentes ordenamentos, as características de cada material e o que faz estes tipos de materiais terem comportamentos diferentes na presença de campos magnéticos e variações de temperatura.

# Capítulo 3

## Magnetização e Ordenamento Magnético

### 3.1 Magnetização

Anteriormente, foi discutida a existência do spin e suas evidências experimentais. Também foi discutida a relação entre o spin e o momento de dipolo magnético, origem para o estudo do magnetismo. A Mecânica Quântica permitiu o estudo microscópico do magnetismo na matéria. Agora faremos uso dos conceitos anteriores para discutir acerca dos Ordenamentos Magnéticos e Magnetização.

A magnetização  $\vec{M}$  pode ser definida como uma medida da intensidade do momento magnético de um determinado material por unidade de volume. A magnetização mensura o grau de alinhamento dos momentos magnéticos permanentes e induzidos dos átomos e moléculas em resposta a um campo magnético externo. O tipo de material e seu ordenamento magnético definem como o alinhamento ocorre.

O ferro é um exemplo de Material ferromagnético, nesse tipo de material os momentos magnéticos tendem a orientar-se na mesma direção de maneira espontânea, mesmo na ausência de campos externos. O óxido de manganês (MnO) é um material antiferromagnético, e nesse tipo de material os momentos magnéticos vizinhos orientam-se em direções opostas, provocando o cancelamento mútuo. Existem também os materiais paramagnéticos, como o alumínio, onde o alinhamento dos momentos magnéticos só acontece na presença de um campo magnético externo. Já os materiais diamagnéticos, por exemplo o cobre, os momentos magnéticos são induzidos e se orientam na direção oposta ao campo aplicado [59, 62, 11].

Para determinar a magnetização é escolhida uma pequena região do material magnético, porém com dimensões suficientes para conter um número razoavelmente grande de dipolos magnéticos individuais  $\vec{\mu}_i$ . A região escolhida tem volume  $v$  e momento de dipolo magnético total dado pela soma de todos os dipolos individuais  $\vec{\mu} = \sum_i \vec{\mu}_i$  contidos no volume. A magnetização  $\vec{M}$  é obtida a partir da divisão do momento magnético total da região  $\vec{\mu}$  pelo volume  $v$ :

$$\vec{M} = \frac{1}{v} \sum_i \vec{\mu}_i. \quad (3.1)$$

Na equação 3.1 fica claro que a magnetização é escrita como o momento magnético por unidade de volume. A magnetização descreve a resposta do material ao campo magnético em uma escala macroscópica, considerando a média dos dipolos magnéticos individuais.

A ação de um campo magnético externo  $\vec{H}$  pode resultar em respostas di-

ferentes, de acordo com o tipo de material. O comportamento global do material dependerá da reação dos momentos magnéticos orbital e intrínseco, respectivamente  $\vec{\mu}_l$  e  $\vec{\mu}_s$  em relação ao campo magnético. O primeiro,  $\vec{\mu}_l$  tem origem a partir do movimento orbital dos elétrons em torno do núcleo atômico, enquanto o segundo  $\vec{\mu}_s$  é associado ao spin do elétron e não depende do movimento orbital.[11, 56].

Ao aplicar um campo magnético externo  $\vec{H}$  em um material magnético, ele pode gerar uma magnetização  $\vec{M}$ , que caracteriza a resposta coletiva dos momentos de dipolo magnético das partículas que compõem o material. A soma de  $\vec{H}$  com  $\vec{M}$  resulta no campo de indução magnética, também chamado campo magnético total dentro do material  $\vec{B}_T$ , descrita na equação (3.4).

Em escala microscópica, cada momento de dipolo magnético  $\vec{\mu}$  experimenta um torque  $\vec{\tau}$  devido à interação com  $\vec{B}_T$ . O torque  $\vec{\tau}$  é dado pelo produto vetorial entre  $\vec{\mu}$  e  $\vec{B}_T$ , este torque tenta alinhar os dipolos magnéticos com o campo externo  $\vec{H}$ . A intensidade e a forma como os dipolos magnéticos individuais interagem com o campo magnético externo e entre si, determinam as propriedades magnéticas do material, como o seu tipo de magnetismo [63, 64]. O torque é expresso por:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}_T. \quad (3.2)$$

As orientações dos momentos magnéticos orbital  $\vec{\mu}_l$  e de spin  $\vec{\mu}_s$  em relação ao campo magnético externo  $\vec{H}$  são distintas, devido suas diferentes origens e ao mecanismo para minimizar energia. A origem de  $\vec{\mu}_l$  é o movimento orbital dos elétrons em torno do núcleo. Esse movimento produz uma corrente associada, que

ao interagir com o campo magnético externo experimenta uma força de Lorentz. A força de Lorentz resulta em um torque, este atua para orientar o momento magnético orbital de maneira antiparalela em relação ao campo magnético  $\vec{H}$ , minimizando a energia. Por outro lado, a origem do momento magnético de spin  $\vec{\mu}_s$  é o spin intrínseco do elétron. A interação entre  $\vec{\mu}_s$  e  $\vec{H}$  faz com que  $\vec{\mu}_s$  tenda a orientar-se paralelamente ao campo externo, buscando a configuração para minimizar a energia. Logo, as orientações opostas de  $\vec{\mu}_l$  e  $\vec{\mu}_s$  mostra que as naturezas são diferentes. O  $\vec{\mu}_l$  é influenciado pelas as forças que atuam na sua órbita (como a força de Lorentz) e  $\vec{\mu}_s$  responde diretamente à interação com  $\vec{H}$  [63, 64].

A magnetização  $\vec{M}$  é um vetor e pode ser escrito pelo produto entre a susceptibilidade magnética volumétrica  $\chi_m$  com o campo magnético externo, pois para certos materiais a magnetização é proporcional ao campo externo aplicado. Essa relação é mostrada na equação 3.3, sendo válida para materiais lineares em campos magnéticos fracos, como os materiais diamagnéticos e paramagnéticos, onde a  $\chi_m$  é considerada uma constante. A susceptibilidade magnética  $\chi_m$  é uma grandeza física adimensional (no sistema SI) que descreve a intensidade e a forma como o material responde a interação com um campo magnético externo. Em materiais não lineares, como os ferromagnéticos e antiferromagnéticos,  $\chi_m$  depende do campo magnético externo  $\vec{H}$ . Isso ocorre devido ao alinhamento completo dos momentos magnéticos quando  $\vec{H}$  aumenta, atingindo um limite conhecido por "saturação magnética". Após esse limite,  $\chi_m$  passa a tender a zero, pois a magnetização não pode aumentar, tornando a relação entre  $\vec{M}$  e  $\vec{H}$  não linear [11]. A relação descrita para materiais lineares é mostrada na equação 3.3 a seguir:

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}. \quad (3.3)$$

Alguns materiais possuem momentos de dipolo magnéticos permanentes, já outros podem ter momentos de dipolo magnéticos induzidos, quando submetidos a um campo magnético externo  $\vec{H}$ . A ação de  $\vec{H}$  sobre os momentos magnéticos permanentes e induzidos é tentar orienta-los em sua direção. O alinhamento destes momentos magnéticos gera uma magnetização induzida  $\vec{M}$  dentro do material. Esta magnetização induzida funciona como uma resposta do material ao campo externo aplicado, provocando alterações no campo magnético total  $\vec{B}_T$  que é sentido dentro do material, conhecido como campo de indução magnética [5, 8]. O campo magnético total é dado por:

$$\vec{B}_T = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}), \quad (3.4)$$

substituindo a expressão para  $\vec{M}$  encontrada em 3.3 na equação 3.4, podemos escrever o campo magnético total  $\vec{B}_T$  em termos do campo magnético externo aplicado  $\vec{H}$ . Considerando materiais lineares, onde a magnetização é proporcional ao campo magnético externo,

$$\vec{B}_T = \mu_0 (\vec{H} + \chi_m \vec{H}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \vec{H}, \quad (3.5)$$

$$\vec{B}_T = \mu \vec{H}. \quad (3.6)$$

Sendo  $\mu = \mu_0(1 + \chi_m)$ , esse termo é conhecido como a permeabilidade magnética do material.

De maneira semelhante, partindo da equação 3.4 podemos substituir  $\vec{H}$  encontrado a partir de 3.3 e escrever a magnetização  $\vec{M}$  em termos da susceptibilidade magnética  $\chi_m$  e do campo magnético total  $\vec{B}_T$ ,

$$\vec{B}_T = \mu_0(1 + \frac{1}{\chi_m})\vec{M}, \quad (3.7)$$

$$\vec{M} = \frac{\chi_m \vec{B}_T}{\mu_0(1 + \chi_m)}. \quad (3.8)$$

## 3.2 Diamagnetismo

Nos átomos, cada subcamada eletrônica tem um limite máximo de elétrons que podem ser distribuídos em seus orbitais atômicos. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, dois elétrons no mesmo átomo não podem estar no mesmo estado quântico simultaneamente. Desta forma, em cada orbital apenas dois elétrons podem ser acomodados, um com spin  $\uparrow$  e o outro com spin  $\downarrow$ . Quando essa subcamada está totalmente preenchida, significa que os pares de elétrons emparelhados antiparalelamente estão ocupando todos os estados disponíveis. Cada elétron tem um spin e gera momento de dipolo magnético intrínseco. O cancelamento dos spins dos elétrons emparelhados resulta em um momento de dipolo magnético intrínseco nulo para a subcamada. O movimento orbital dos elétrons também pode gerar mo-

mento magnético. Quando as subcamadas atômicas estão totalmente preenchidas, o momento de dipolo magnético orbital se cancela em pares. Isso ocorre devido haver simetria orbital entre os elétrons e também os movimentos orbitais acontecerem em sentidos opostos. Materiais compostos por átomos com momento magnético total nulo são chamados de diamagnéticos [5, 8].

Em materiais diamagnéticos a ação de um campo magnético externo  $\vec{H}$  gera uma magnetização induzida, com orientação no sentido oposto ao campo externo aplicado. Esse comportamento pode ser compreendido como uma consequência do movimento dos elétrons em torno do núcleo atômico, de maneira que a resposta ao campo magnético externo leva em consideração a minimização da variação da energia total do sistema. O comportamento diamagnético tem natureza quântica, sucedendo da interação entre os momentos magnéticos orbitais com o campo magnético externo. Desta maneira, o comportamento dos materiais diamagnéticos em relação a aplicação de campos magnéticos externos é uma leve repulsão. O diamagnetismo é o tipo de ordenamento magnético mais simples e todos os materiais o apresenta. Muitas das vezes é camuflado por outros tipos de magnetismos, que serão falados na sequência [11].

Materiais diamagnéticos não apresentam momentos de dipolo magnéticos permanentes na ausência de um campo magnético externo  $\vec{H}$ . Neste tipo de material, os momentos magnéticos orbital e de spin cancelam-se individualmente de forma natural. O efeito do diamagnetismo ocorre quando o material está sofrendo ação do campo magnético externo, porém o momento magnético induzido é em grande parte das vezes muito fraco, se comparado com outras formas de magnetismo e some

assim que o campo magnético externo é retirado. Um material diamagnético apresenta magnetização  $\vec{M}$  orientada no sentido oposto ao campo magnético externo  $\vec{H}$ , essa oposição resulta na redução do campo de indução magnética (campo total)  $\vec{B}_T$  dentro do material. Consequentemente a susceptibilidade magnética  $\chi_m$  é negativa, mostrando que a magnetização induzida possui orientação oposta à direção de  $\vec{H}$ . [10]. Uma característica que difere o diamagnetismo de outros tipos de materiais magnéticos é o fato de normalmente independe da temperatura. Com o aumento da temperatura acima de 0K, os estados de energia acima do estado fundamental tornam-se cada vez mais importantes para a determinação da susceptibilidade diamagnética, mas isso é um pequeno efeito [11].

### 3.3 Paramagnetismo

Nos materiais paramagnéticos os átomos possuem momento de dipolo magnético permanentes [5]. Já discutimos antes a relação entre os momentos magnéticos com os momentos angulares orbital e de spin, desconsiderando os momentos de dipolo magnético nuclear devido a sua pequena contribuição [6]. A interação entre os momentos angulares de spin e orbital com o campo magnético externo  $\vec{H}$  caracterizam o paramagnetismo em nível quântico [10].

Quando o átomo apresenta subcamadas eletrônicas sem preenchimento total, encontramos elétrons desemparelhados. Quando essas subcamadas não estão totalmente preenchidas significa que os elétrons desemparelhados não estão ocupando todos os estados disponíveis. Na condição de preenchimento parcial, existem elétrons com spins que não se cancelam devido estarem orientados na mesma direção. O não

cancelamento dos spins resulta em um momento de dipolo magnético intrínseco não nulo, tornando os átomos de determinados materiais paramagnéticos [5].

O movimento orbital dos elétrons em torno do núcleo gera momento magnético quando as subcamadas atômicas são parcialmente preenchidas. Os momentos de dipolo magnético orbital não se cancelam totalmente. Isso ocorre devido os elétrons nesta condição poderem ocupar os orbitais de maneira assimétrica, logo resulta em um momento de dipolo magnético orbital não nulo [5].

Em muitos átomos os momentos magnéticos dos elétrons podem se cancelar. Isso ocorre quando os pares de elétrons possuem spins opostos para poderem ocupar o mesmo orbital. Átomos com elétrons não emparelhados (elétrons com mesmo spin) resultam em um momento de dipolo magnético líquido. Os elétrons possuem momento de dipolo magnético associado ao seu spin e também ao seu momento angular orbital. Os materiais paramagnéticos possuem momentos magnéticos individuais mesmo sem a presença de campo magnético externo, porém não são alinhados espontaneamente na mesma direção, logo as orientações aleatórias provocam o cancelamento dos momentos, o que resulta em uma magnetização total igual a zero [10, 11].

Os materiais paramagnéticos sólidos tem como característica algum grau de isolamento de seus momentos de dipolo magnéticos individuais, o que possibilita independência entre os átomos quando expostos a campos magnéticos externos. Cada partícula quântica é descrita por uma função de onda. Esta descreve seu estado de energia e probabilidade de encontrá-la em uma região. Quando ocorre sobreposição significativa das funções de onda dos átomos, ocorre que elétrons de diferentes áto-

mos estão ocupando regiões muito próximas ou até mesmo compartilhando estados quânticos [8] [5].

A sobreposição das funções de onda eletrônicas dos átomos vizinhos pode afetar de maneira considerável as propriedades magnéticas de um material, podendo resultar em alterações das suas características. Os elétrons são férmons e obedecem ao princípio da exclusão de Pauli, que garante que dois elétrons não podem estar no mesmo estado quântico simultaneamente. A sobreposição significativa das funções de onda, tende a emparelhar os elétrons e consequentemente resulta no cancelamento dos momentos de dipolo magnéticos de spin, reduzindo ou até mesmo eliminando a resposta magnética do material. Logo, para um material apresentar comportamento paramagnético é preciso que não ocorram sobreposições significativas das funções de onda, assim os momentos de dipolo magnéticos dos elétrons não serão anulados [5][11].

Ao aplicarmos um campo magnético externo  $\vec{H}$ , os momentos de dipolo magnético são influenciados a se alinharem paralelamente ao campo externo. Isto ocorre devido a energia ser menor quando os momentos magnéticos estão alinhados paralelamente com o campo externo em comparação a quando os momentos magnéticos se orientam de maneira antiparalela ao mesmo. Desta maneira, o alinhamento paralelo é favorecido [5]. O alinhamento parcial dos momentos magnéticos com o campo externo provoca um campo magnético induzido dentro do material, este é adicionado ao campo externo, aumentando a intensidade do campo magnético total no material. O comportamento magnético descrito resulta em uma susceptibilidade magnética positiva, que indica que o material paramagnético sofre atração pelo

campo magnético externo [11][10].

Ao comparar o paramagnetismo com o diamagnetismo é possível destacar que no primeiro o campo induzido interno reforça o campo externo aplicado, resultando em uma susceptibilidade magnética positiva. No segundo, o campo induzido interno se opõe ao campo externo, o que resulta em uma susceptibilidade magnética negativa [5] [11].

É importante destacar que, o alinhamento dos momentos magnéticos individuais nos materiais paramagnéticos com o campo externo é parcial, pois a agitação térmica provoca desordem nos momentos magnéticos. Quanto mais intenso for o campo externo, maior a magnetização, de maneira que a magnetização líquida do material é proporcional ao campo externo aplicado. Ao retirar o campo externo, a magnetização líquida desaparece [10]. O alinhamento dos momentos de dipolo magnético individuais com o campo externo se opõem as variações de direções devido a agitação térmica, pois as mudanças de estado devido ao aumento da temperatura tendem a tornar a orientação dos momentos magnéticos aleatória [5].

A susceptibilidade magnética depende da temperatura, devido à influência das flutuações térmicas nos alinhamentos dos momentos magnéticos dos átomos ou íons em relação ao campo externo. A energia térmica é definida como  $k_B T$ , ela descreve a energia relacionada a agitação térmica das partículas que compõem o material paramagnético [5] [8].

A susceptibilidade magnética  $\chi_m$  mensura a resposta macroscópica de um material quando é aplicado um campo magnético externo  $\vec{H}$ . Essa resposta surge da interação microscópica entre os momentos de dipolo magnéticos  $\vec{\mu}$  com o campo

de indução magnética  $\vec{B}_T$ , descrita pela energia de interação magnética  $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_T$ . Essa interação microscópica define o alinhamento preferencial dos momentos de dipolo magnéticos com o campo externo, dando origem a uma magnetização total líquida, proporcional ao campo magnético externo, enquanto o material está sob ação do mesmo. Esta energia proveniente da interação magnética possui sinal negativo, indicando que o sistema tende a atingir a energia mínima quando ocorre o alinhamento dos momentos magnéticos com o campo magnético externo, o qual gera o campo de indução magnética  $\vec{B}_T$ , favorecendo a estabilidade energética. A susceptibilidade magnética  $\chi_m$  está diretamente relacionada à facilidade de alinhamento dos momentos magnéticos com o campo magnético externo, assim dependendo da energia de interação magnética [11] [10].

O comportamento da susceptibilidade está condicionado ao equilíbrio entre as energias térmica e a de interação magnética. Em baixas temperaturas a energia de interação magnética tem maior influência sobre os momentos de dipolo magnéticos, pois a energia térmica é pequena, favorecendo o alinhamento com um campo externo. Estas condições favorecem uma susceptibilidade maior. Com o aumento da temperatura, a energia térmica aumenta e provoca maior agitação nos momentos de dipolo magnéticos, consequentemente dificultando o alinhamento destes com o campo externo aplicado. Nestas condições a susceptibilidade do material diminui, assim como a magnetização [5].

A Lei de Curie mostra que para um campo magnético externo fraco, em temperaturas não muito baixas a susceptibilidade paramagnética  $\chi_m$  é inversamente

proporcional a temperatura:

$$\chi_m = \frac{C}{T}. \quad (3.9)$$

Sendo  $C$  a constante de Curie, que depende da natureza do material e dos momentos magnéticos dos átomos,  $T$  é a temperatura em Kelvin. Esta expressão nos diz que a susceptibilidade diminui à medida que a temperatura aumenta.

Os materiais paramagnéticos possuem susceptibilidade magnética positiva e fraca, sendo ligeiramente influenciados por campos magnéticos externos. O alinhamento dos momentos de dipolo magnéticos com o campo externo é parcial e apenas ligeiramente maior do que aqueles com momentos antiparalelos, devido à agitação térmica. Como resultado, a resposta magnética do material é fraca e consequentemente a susceptibilidade magnética tem uma pequena magnitude [5] [11].

A seguir, falaremos sobre o ordenamento ferromagnético, esse que apresenta uma susceptibilidade magnética muito maior que o ordenamento paramagnético quando estão sob influência de um campo externo. Nos materiais ferromagnéticos é possível observar efeitos de magnetização mesmo na ausência de um campo magnético externo, o que não é possível nos materiais paramagnéticos [10].

### 3.4 Ferromagnetismo

A compreensão do magnetismo está diretamente associada à Mecânica Quântica, uma vez que em sistemas clássicos o equilíbrio térmico obriga o sistema a possuir momento magnético igual a zero [65]. Existem algumas possibilidades de origem para o momento magnético de um átomo isolado, como o spin eletrônico, o

momento angular orbital, o spin nuclear e também a variação do momento angular orbital provocado pela ação de um campo magnético externo [5][66][67].

Tanto os materiais ferromagnéticos quanto os paramagnéticos são dependentes do desemparelhamento dos spins dos elétrons, que resulta em um momento de dipolo magnético total diferente de zero. Vimos que no paramagnetismo, os momentos magnéticos individuais não devem interagir de maneira significativa. Isso é uma das diferenças em relação ao ferromagnetismo. Nos materiais ferromagnéticos os momentos de dipolo magnéticos próximos interagem de maneira significativa [11].

A interação do tipo dipolo-dipolo é fraca, de modo que, a energia térmica em temperatura ambiente pode ser maior do que a energia desta interação. Desta maneira, facilmente os momentos magnéticos dos átomos seriam desalinhados por causa da agitação térmica, tornando impossível o aparecimento de magnetização significativa. Entretanto, alguns materiais tem comportamento ferromagnético, apresentando magnetização espontânea mesmo em temperatura ambiente. O Ferro é um exemplo. A interação dipolo-dipolo clássica sozinha não é suficiente para causar ou explicar o comportamento ferromagnético [5]. O ferromagnetismo deve surgir a partir de uma interação quântica entre os momentos magnéticos, relacionada ao acoplamento dos spins, como a interação de troca quântica [11].

A partir de alguns elementos de transição é possível explicar a teoria quântica do ferromagnetismo. Como exemplos serão citados: ferro, níquel e cobalto pois possuem a subcamada eletrônica  $3d$  parcialmente preenchida. Os elétrons pertencentes a essa subcamada são caracterizados pelos números quânticos  $m_l$  e  $m_s$ , sendo  $m_l$  relacionado ao momento angular orbital e  $m_s$  relacionado ao momento angular de

spin. Obedecendo ao princípio da exclusão de Pauli, dois elétrons não podem estar exatamente no mesmo estado, ou seja, o conjunto de números quânticos não pode ser igual. Para que a energia do sistema magnético seja mínima é preciso que os momentos angulares orbital e de spin mantenham uma organização. Se dois elétrons possuírem  $m_l$  com mesmo valor, obrigatoriamente os valores de  $m_s$  do spin de cada elétron deve ser diferente, logo os spins serão antiparalelos. Caso o valor de  $m_l$  seja diferente nos dois elétrons, os spins podem apresentar o mesmo valor de  $m_s$ , sendo então, paralelos [5] [1].

O fator giro-magnético  $g$  relaciona o momento magnético total e o momento angular total. Para os materiais ferromagnéticos  $g \approx 2$ , o que indica que a magnetização espontânea vem principalmente do acoplamento de spins paralelos e não do momento angular orbital. Usando o ferro como exemplo, os elétrons da subcamada  $3d$  tendem a alinhar seus spins de maneira paralela porque isso minimiza a energia do sistema como um todo. Já foi explicado anteriormente que, para os spins estarem orientados paralelamente entre si é necessário que eles possuam valores de  $m_l$  diferentes, então os elétrons precisam estar mais afastados uns dos outros, consequentemente diminuindo a repulsão eletrostática e tornando o sistema mais estável. Essa é uma tendência dos spins em uma subcamada incompleta de se acoparem de maneira que todos sejam orientados paralelamente maximizando o spin total do sistema e respeitando o princípio da exclusão [5] [11].

Um único átomo de ferro é paramagnético porque possui um momento de dipolo magnético permanente. Esse momento é explicado pela interação entre as coordenadas de spin e espaciais dos elétrons. A configuração eletrônica do átomo

organiza-se de forma que os spins paralelos sejam energeticamente favoráveis, respeitando o princípio de exclusão de Pauli. Essa organização impede que dois elétrons ocupem o mesmo estado quântico, consequentemente minimizando a repulsão Coulombiana entre eles [5][10].

Considerando uma rede cristalina constituída do elemento ferro, a interação de troca alinha os spins dos elétrons de átomos mais próximos, resultando em acoplamento entre spins vizinhos. Se a energia mínima do sistema ocorre quando os spins são paralelos, o sistema será ferromagnético; se for quando os spins estão orientados antiparalelamente, será antiferromagnético. À medida que a distância entre átomos aumenta, a sobreposição das funções de onda da subcamada eletrônica  $3d$  diminui, enfraquecendo a interação de troca, o que pode tornar o material paramagnético, caso os momentos dipolares deixem de interagir entre si. Isso mostra como a geometria da rede e a distância atômica determinam o comportamento magnético do material [5] [63].

O que determina o comportamento magnético de um material ferromagnético é a interação de troca, que por sua vez, resulta do princípio da exclusão de Pauli e das interações eletrostáticas provenientes do alinhamento paralelo dos spins de elétrons vizinhos. Esse alinhamento dos momentos magnéticos minimiza a energia de interação e gera magnetização espontânea [5] [11]. O ordenamento ferromagnético tem como característica a constante de acoplamento de troca  $J > 0$ , que favorece o alinhamento dos spins. A magnitude de  $J$  depende da distância entre os átomos e também das características eletrônicas do material, sendo o valor de  $J$  fundamental para a determinação da temperatura crítica do material  $T_C$ , também conhecida como

temperatura de Curie. A distância entre os átomos vizinhos é muito importante, pois ela controla a sobreposição dos orbitais eletrônicos e consequentemente afeta a força da interação de troca e a orientação dos spins [63] [10].

Materiais ferromagnéticos apresentam momentos de dipolo magnéticos permanentes, o mesmo é válido para os materiais paramagnéticos. Uma das diferenças entre esses dois tipos de materiais é que, nos ferromagnéticos os momentos de dipolo magnéticos estão alinhados dentro de domínios de forma espontânea e ordenada. Dentro dos domínios magnéticos a interação de troca entre os spins é forte, forçando-os a se manterem alinhados. Nos materiais paramagnéticos não existem domínios magnéticos e não ocorre alinhamento espontâneo e ordenado, resultando em uma magnetização espontânea nula [8] [68] [11].

Em um grande cristal, se todos os momentos magnéticos estiverem alinhados na mesma direção, aumenta a energia do sistema. Os domínios magnéticos surgem para minimizar a energia do cristal quando ele está uniformemente magnetizado. A estrutura dos domínios, como tamanho e forma são definidos para minimizar as energias, incluindo a energia do campo magnético. Caso o material fosse constituído de um único domínio, o campo magnético externo e a energia associada seriam altos, então a divisão do material em domínios com diferentes orientações de magnetização reduz o campo e a energia total [5] [68].

Os domínios magnéticos são pequenas regiões dentro do material ferromagnético e cada domínio possui muitos momentos de dipolo alinhados paralelamente, proporcionando um campo magnético local forte. Os materiais ferromagnéticos não estando na presença de um campo magnético externo e não estando magnetizados

previamente, apresentam domínios com orientações aleatórias, logo sua magnetização total é nula. Entretanto, ao submeter este tipo de material a ação de um campo magnético externo, grande parte dos domínios magnéticos tendem a ficar orientados na direção do campo externo, resultando em uma magnetização macroscópica muito forte. [8][69].

Ao retirar a ação de um campo magnético externo sobre um ferromagneto, parte dos domínios magnéticos do material são capazes de manter a orientação que estavam, logo o material permanece magnetizado com um campo magnético macroscópico significativo. Os materiais paramagnéticos quando submetidos a um campo externo tendem a ter maior parte de seus momentos de dipolo magnéticos orientados na direção do campo, gerando uma magnetização fraca e temporária, em comparação a gerada nos materiais ferromagnéticos. Ao retirar campo externo, o material paramagnético volta a não ter magnetização, ou seja, adquirem um alinhamento aleatório dos momentos magnéticos [62][70].

A agitação térmica a partir de um determinado valor de temperatura consegue destruir o ordenamento ferromagnético, para o ferro o valor é aproximadamente 769,85°C, para o cobalto 1126,85°C e para o níquel 357,85°C. A temperatura onde o ordenamento é destruído é chamada de temperatura crítica de Curie ou Temperatura de Curie. Desta maneira, o material ferromagnético exibe comportamento ferromagnético até o limite da temperatura crítica, após esta temperatura o material ferromagnético passa a exibir comportamento paramagnético. Essa mudança de comportamento magnético e de propriedades são chamadas de transições de fase, ocorrendo em temperaturas bem definidas e de maneira abrupta ao atingir as tem-

peraturas críticas[5].

A seguir, são ilustrados os ordenamentos de materiais ferromagnéticos e paramagnéticos

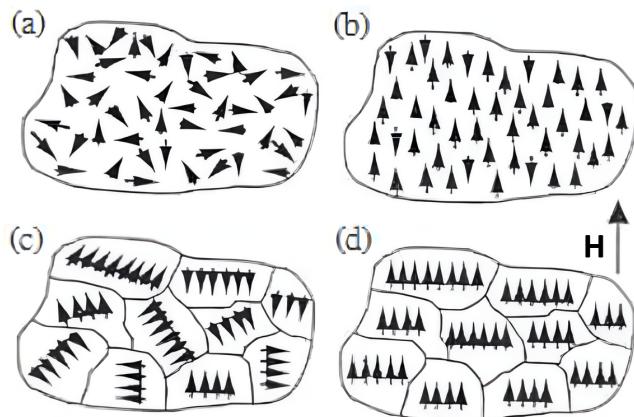


Figura 3.1: Representação dos ordenamentos paramagnético e ferromagnético, adaptado a partir de [7].

Na figura 3.1, o comportamento (a) descreve um material paramagnético na ausência de campo magnético externo. Os momentos magnéticos possuem orientação e distribuição aleatória. No comportamento (b), o mesmo material paramagnético está submetido a um campo magnético externo  $\vec{H}$ , fazendo maioria dos momentos magnéticos se alinharem na direção do campo. O comportamento (c) descreve um material ferromagnético sem campo magnético externo aplicado. É possível observar os domínios, que são as pequenas regiões demarcadas e elas formam o material ferromagnético. Dentro dos domínios estão os momentos de dipolo magnéticos, orientados em uma direção e esta é a direção a qual o domínio magnético aponta. Os domínios magnéticos possuem orientação aleatória em duas situações, quando não magnetizados previamente e quando não estão sob ação de um campo magnético externo. O comportamento (d) descreve o material ferromagnético imerso no campo

magnético  $\vec{H}$  e mostra que todos os domínios foram alinhados paralelamente a ele.

A forma como um material responde quando submetido a um campo magnético externo é um parâmetro para sua classificação, porém a resposta magnética depende da temperatura do material [11]. Alguns materiais sofrem transições de ordem magnética a depender da temperatura. Os ferromagnéticos são um exemplo, pois podem ter mudança na orientação dos seus spins acima da temperatura crítica de Curie  $T_c$ . Acima de  $T_c$  os materiais ferromagnéticos apresentam comportamento paramagnético. Logo, esta faixa de temperatura específica registra a perda da magnetização espontânea [8]. Isto ocorre devido a agitação térmica que começa a vencer a energia de interação de troca que favorece os alinhamentos paralelos dos spins.

A aleatoriedade na orientação dos momentos magnéticos devido a temperatura acima de  $T_c$ , faz sistema ferromagnético ter comportamento paramagnético, porém apresentando uma susceptibilidade superior a dos materiais paramagnéticos comuns [5]. Abaixo de  $T_c$  os ferromagnéticos apresentam os momentos de dipolo magnéticos alinhados paralelamente, pois a energia de interação de troca  $J$  domina o sistema, já que o mesmo possui baixa agitação térmica. São formadas regiões onde os spins estão apontando na mesma direção espontaneamente, essas pequenas regiões são definidas como domínios magnéticos[62] [7].

A susceptibilidade magnética  $\chi_m$  descreve como o material responde à interação com um campo magnético externo [11]. Na fase ferromagnética é possível diferenciar dois tipos de susceptibilidade. A primeira é a susceptibilidade longitudinal, que descreve a resposta da magnetização na direção do campo magnético externo. Nessa direção paralela ao campo a susceptibilidade normalmente apresenta

valores pequenos, uma vez que os momentos magnéticos já estão alinhados em uma direção preferencial. O segundo tipo é a susceptibilidade transversal, essa afere a resposta magnética na direção perpendicular ao alinhamento preferencial dos momentos de dipolo magnéticos, normalmente tem valor mais significativo quando o material ferromagnético está em baixas temperaturas, já que campos externos com pequenas magnitudes podem induzir algumas oscilações nos spins [1, 59].

Abaixo de  $T_c$ , o material ferromagnético possui magnetização espontânea dentro dos domínios magnéticos. Logo, nessa faixa de temperatura, a susceptibilidade magnética  $\chi_m$  tem comportamento não linear e mais complexo, dependendo de fatores como, propriedades do material, intensidade do campo externo e temperatura [71]. Abaixo de  $T_c$ , a  $\chi_m$  mede como a magnetização espontânea se ajusta devido à presença de campos externos, sendo finita e geralmente menor do que em  $T_c$ , pois o material já apresenta magnetização espontânea, limitando a resposta a um campo externo. A susceptibilidade magnética medida na ausência de um campo magnético externo  $\vec{H} = 0$ , alcança seu valor máximo e diverge exatamente em  $T_c$  para materiais ferromagnéticos, indicando que o sistema está com maior capacidade de resposta a perturbações. O motivo é que o alinhamento espontâneo dos momentos magnéticos começa a diminuir na medida que  $T$  se aproxima de  $T_c$ , com isso, a susceptibilidade se intensifica, indicando quando o sistema sofre transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética [1, 11].

Para temperaturas acima de  $T_c$ , o material ferromagnético passa a ter comportamento paramagnético, pois a agitação térmica destrói o ordenamento dos momentos magnéticos. Logo o material só apresenta magnetização quando está sob

ação de um campo externo. Ao retirar o campo a magnetização desaparece. A susceptibilidade magnética nesta faixa de temperatura  $T > T_c$ , para materiais que apresentam transição de fase magnética é dada pela relação de Curie-Weiss, ajustada a partir da Lei de Curie simples [5]:

$$\chi_m = \frac{C}{T - T_c}. \quad (3.10)$$

Sendo  $C$  a constante de Curie, que depende das propriedades do material,  $T$  é a temperatura e  $T_c$  é a temperatura de Curie-Weiss. Essa relação diz que conforme  $T$  se aproxima de  $T_c$ , a susceptibilidade aumenta rapidamente, mostrando a eminência da transição de fase. A relação acima não é válida para temperaturas abaixo de  $T_c$ , pois o material está na fase ferromagnética com magnetização espontânea, sendo válida somente na fase paramagnética com  $T > T_c$ .

A Temperatura de Curie-Weiss  $T_c$  mostra onde o material ferromagnético passa a ter comportamento paramagnético. Veja a figura abaixo, que ilustra o comportamento da magnetização de um ferromagneto em função da temperatura.

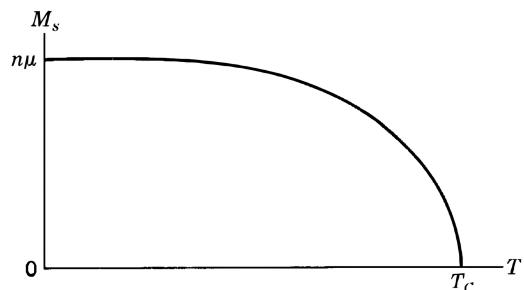


Figura 3.2: Diagrama de fase para o caso ferromagnético, figura retirada de [5].

A partir da figura 3.2, observamos que a magnetização máxima ocorre quando

$T = 0$ , conhecida como magnetização de saturação. Nesta temperatura ocorre baixa agitação térmica e favorece a interação de troca  $J$ , responsável pelo alinhamento dos momentos de dipolo magnéticos. O aumento da temperatura até um pouco antes de  $T_c$  faz a magnetização diminuir, porém mantendo ainda as características do ferromagnetismo, refletindo a influência da agitação térmica dentro do material, especificamente no alinhamento dos momentos de dipolo magnético. A transição de fase ocorre em  $T_c$  e a partir dela, o material ferromagnético tem comportamento paramagnético, pois o ordenamento paralelo dos momentos não é mais favorecido devido a alta agitação molecular. Isso diz que, a energia  $J$  não predomina no sistema, mas sim a energia térmica, desta maneira, acima de  $T_c$  o material ferromagnético não apresenta magnetização espontânea [8, 5].

Nos materiais ferromagnéticos em temperatura ambiente observamos um fenômeno que depende do histórico magnético, além do campo magnético externo aplicado. O fenômeno em questão é conhecido como histerese magnética, ocorrendo devido à evolução dos domínios magnéticos influenciados por campo magnético externo aplicado  $\vec{H}$ . Durante a variação de intensidade e direção de  $\vec{H}$  os domínios magnéticos tendem a se reorganizar em resposta a  $\vec{H}$ , resultando em uma magnetização  $\vec{M}$ . Ao retirar a ação do  $\vec{H}$  o material não retorna a condição inicial, apresentando uma magnetização remanente  $\vec{M}_r$ . Este fenômeno é descrito pela relação entre  $\vec{H}$  e  $\vec{M}$ , sendo representado graficamente pelo ciclo de histerese, mostrado em seguida [8, 1].

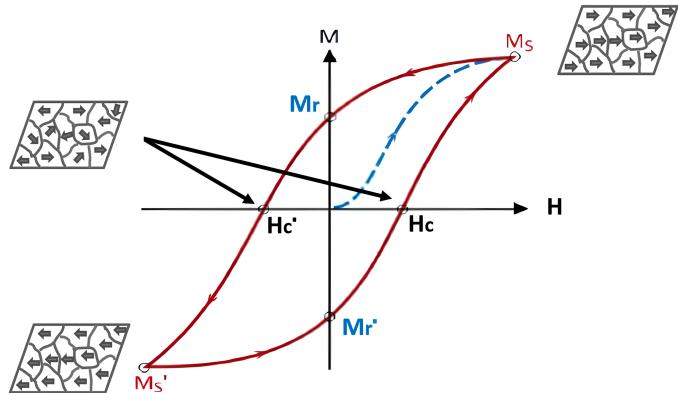


Figura 3.3: Representação do ciclo de histerese para um material ferromagnético, inicialmente com magnetização nula. Figura adaptada a partir de [1], [8] e [9].

A figura 3.3 descreve o ciclo de histerese, tendo pontos importantes para se analisar ao longo das curvas. Inicialmente, o material ferromagnético está desmagnetizado, logo a curva da magnetização parte da origem. Então, é aplicado um campo magnético externo  $\vec{H}$ , à medida que a intensidade do campo externo aumenta, os domínios magnéticos tendem a se orientar paralelamente com o mesmo, por meio da rotação dos momentos magnéticos e do crescimento dos domínios magnéticos já alinhados, chegando a saturação da magnetização  $M_s$  quando todos os domínios da amostra macroscópica estão paralelamente alinhados com o  $\vec{H}$ . A inclinação da curva no processo inicial de magnetização é uma característica de cada tipo de material, estando diretamente associada a sua permeabilidade magnética inicial [10, 11, 8].

Após a magnetização de saturação  $M_s$  alcançada na figura 3.3, é diminuída a intensidade do campo magnético externo até  $\vec{H} = 0$ , porém a curva não apresenta o mesmo comportamento (mesmo caminho da magnetização inicial) devido a existência de uma magnetização residual, conhecida como magnetização remanente  $M_r$ .

A magnetização  $M_r$  surge porque alguns domínios magnéticos permanecem alinhados paralelamente, devido anisotropias magnéticas e acoplamentos dos momentos magnéticos, mesmo sem a presença de  $\vec{H}$ . Como resultado, o material ainda possui uma magnetização líquida, mesmo sem atuação do  $\vec{H}$ . Para eliminar a magnetização residual  $M_r$  é preciso que seja aplicado novamente um campo magnético externo, só que este deve ter sentido oposto a magnetização  $M_r$ , fazendo os domínios magnéticos tentarem se orientar na nova direção de  $\vec{H}$ . Com isso, os domínios não estarão mais orientados paralelamente entre si, assim desmagnetizando a amostrado material. A intensidade do campo magnético aplicado para desfazer a magnetização remanente  $M_r$  é chamada de coercividade ou campo coercivo  $H'_C$ . Ao continuar a aumentar a intensidade do campo externo nesse novo sentido, novamente é alcançada a magnetização de saturação, só que desta vez no sentido inverso, sendo chamada agora de  $M'_s = -M_s$  [10, 11, 8].

Na figura 3.3 é mostrada a etapa final do ciclo, onde os procedimentos feitos anteriormente são repetidos, mas com o sentido do campo externo invertido. O campo externo é reduzido até  $\vec{H} = 0$ , chegando a segunda magnetização remanente  $M'_r$ , indicando que ainda existe magnetização residual, mesmo na ausência do campo externo. Para eliminar  $M'_r$  é então aplicado um novo campo externo no sentido oposto a magnetização residual. O material torna-se desmagnetizado quando a intensidade do campo externo atinge o valor do campo coercivo  $H_c$ . Ao continuar a aumentar a intensidade do campo externo nesse novo sentido, a magnetização volta a crescer, até novamente alcançar a magnetização de saturação inicial  $M_s$ , completando o ciclo de histerese magnética [10, 11].

O formato das curvas de histerese mudam de maneira significativa para cada material e sofrem muitas influências devido variações térmicas, tensões mecânicas e histórico magnético. A área ciclo de histerese é muito importante, pois representa a energia magnética perdida durante os processos de magnetização e desmagnetização. A perda de energia magnética é evidenciada na forma de calor, podendo aumentar a temperatura do material magnético, diminuindo sua eficiência em aplicações tecnológicas [11].

### 3.5 Antiferromagnetismo

O antiferromagnetismo mantém relação com o ferromagnetismo, pois estes materiais possuem interação de troca entre os momentos magnéticos. No caso antiferromagnético, os átomos vizinhos são forçados pela interação de troca ou "troca magnética" a possuírem orientação antiparalela entre seus spins, para minimizar a energia do sistema e trazer estabilidade a este estado [62][11].

O alinhamento antiparalelo dos momentos magnéticos vizinhos é favorável quando a constante de acoplamento de troca é negativa  $J < 0$ , caracterizando assim o antiferromagnetismo. A constante  $J$  influencia diretamente a intensidade da interação de troca e por consequência a temperatura em que o material sofre a transição para o estado paramagnético [1]. O antiferromagnetismo frequentemente acontece quando a organização dos momentos magnéticos possibilita a divisão em duas sub-redes diferentes e interpenetrantes. Cada sub-rede possui momentos magnéticos orientados somente em uma direção, de maneira que esses momentos magnéticos são antiparalelos em relação aos momentos magnéticos da sub-rede vizinha. As sub-

redes são interpenetrantes, logo cada momento magnético de uma sub-rede possui somente vizinhos pertencentes a outra sub-rede. Assume-se que, o campo molecular que cada spin em uma sub-rede sente é diretamente influenciado pela magnetização provocada pelo alinhamento dos momentos magnéticos da sub-rede oposta. Outra consideração é a ausência de campo magnético externo [11].

Um exemplo de material antiferromagnético é o dióxido de manganês  $MnO_2$ , onde o íon de oxigênio ( $O^{2-}$ ) está carregado negativamente e posicionado entre dois íons de manganês ( $Mn^{4+}$ ) carregados positivamente. Isso significa que o manganês de um lado do oxigênio possui uma orientação de dipolo magnético e o outro manganês posicionado no outro lado possui orientação de momento de dipolo magnético contrária. Esta orientação contrária dos dipolos magnéticos do manganês ocorre devido ao mecanismo de supertroca, onde o oxigênio faz o intermédio da interação entre os íons  $Mn^{4+}$ , promovendo um alinhamento antiparalelo dos momentos de dipolo magnéticos do manganês. Essa organização do arranjo minimiza a energia do sistema, pois os momentos magnéticos se cancelam e consequentemente o material apresenta baixo ou nenhum magnetismo em escala macroscópica, resultando em um comportamento antiferromagnético [5].

O ferrimagnetismo é um tipo de ordenamento magnético semelhante ao antiferromagnetismo. O ferrimagnetismo também apresenta duas sub-redes opostas, porém com diferentes magnitudes dos momentos magnéticos em cada uma delas, resultando em uma magnetização líquida diferente de zero. Como foi estudado antes, as duas sub-redes opostas do material antiferromagnético apresentam mesma magnitude dos momentos magnéticos, logo se cancelam e resulta em uma magnetização

líquida nula. Assim, um antiferromagneto pode ser tratado como um ferrimagneto, na condição em que as sub-redes  $A$  e  $B$  possuam magnitudes de magnetizações de saturação iguais e opostas. Desta maneira, podemos escrever que as magnitudes das magnetizações de saturação  $M_A^{sa}$  para a sub-rede  $A$  e  $M_B^{sa}$  para a sub-rede  $B$ , matematicamente  $M_A^{sa} = -M_B^{sa}$ . De acordo com a aproximação de campo médio, a temperatura de Néel  $T_N$  pode ser determinada usando essa relação entre as magnetizações para descrever as interações entre os spins nas suas sub-redes [1] [11].

Abaixo da temperatura de Néel  $T_N$ , o ordenamento dos spins de um antiferromagneto é antiparalelo, resultando num momento magnético líquido igual a zero. Para os materiais antiferromagnéticos, a temperatura crítica  $T_N$  determina o ponto onde o ordenamento característico do antiferromagnetismo desaparece e o material passa a se comportar como paramagnético. O ordenamento abaixo da temperatura crítica é diferente do que estudamos nos materiais ferromagnéticos, onde os spins se alinham paralelamente e resulta em pequenas regiões do material com magnetização [1] [11][63].

Nos antiferromagnéticos o comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura, quando  $T = T_N$ , é uma pequena inflexão e não uma divergência neste ponto. Essa inflexão mostra o ponto de transição para o desordenamento dos spins. Acima de  $T_N$ , o material exibe comportamento paramagnético e consequentemente a susceptibilidade magnética diminui de maneira gradual com o aumento da temperatura [1].

O efeito de um pequeno campo magnético externo num material antiferromagnético, pode ser calculado para temperaturas  $T > T_N$ . A susceptibilidade

magnética  $\chi_m$  é dada por:

$$\chi_m \propto \frac{1}{T + T_N}. \quad (3.11)$$

Essa é a Lei de Curie-Weiss, já vista anteriormente. Foi alterado o termo  $-T_C$  e substituído por  $+T_N$ . A partir desta expressão, podemos interpretar a susceptibilidade magnética na região de comportamento paramagnético.

A susceptibilidade magnética pode ser ajustada usando uma dependência de Curie-Weiss, onde  $\theta$  é a temperatura de Weiss. veja a seguir:

$$\chi_m \propto \frac{1}{T - \theta}. \quad (3.12)$$

A partir da expressão 3.12 acima, observa-se a relação entre o valor de  $\theta$  e o comportamento magnético de um material. Se  $\theta = 0$ , o material é paramagnético. Se  $\theta > 0$  o material é ferromagnético. Neste caso,  $\theta$  corresponde a temperatura de Curie  $T_C$ . Se  $\theta < 0$  o material é antiferromagnético. Agora  $\theta$  corresponde a  $-T_N$  que é a temperatura de Néel. Para temperaturas inferiores a  $T_N$ , o material antiferromagnético possui ordenamento antiparalelo entre seus spins, resultando em um cancelamento mútuo dos momentos magnéticos e tornando nula a magnetização total. Para temperaturas superiores a  $T_N$  o material apresenta comportamento paramagnético [11] [63].

A seguir, apresentamos o gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura, em um sistema antiferromagnético.

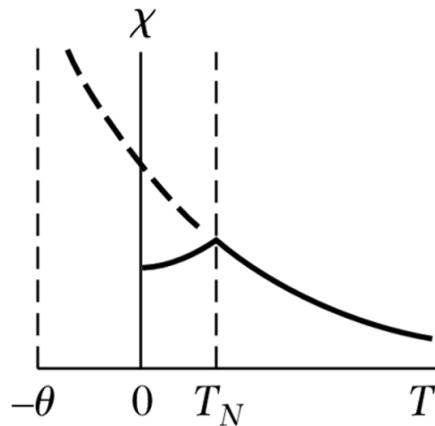


Figura 3.4: Um antiferromagneto abaixo da temperatura de Néel apresenta spins em orientações antiparalelas; a suscetibilidade atinge seu valor máximo em  $T_N$ , onde há uma pequena inflexão bem definida na curva de  $\chi_m$  em função de  $T$ . Figura adaptada a partir de [1].

Para um material antiferromagnético  $\theta = -T_N$ . Considerando a constante de Curie  $C$ , que depende das propriedades magnéticas intrínsecas do material, a temperatura  $T > T_N$  e considerando duas sub-redes, a Lei de Curie-Weiss assume a seguinte forma:

$$\chi_m = \frac{2C}{T + T_N}. \quad (3.13)$$

As medidas das temperaturas de Weiss obtidas experimentalmente em antiferromagnéticos podem ser significativamente diferentes de  $-T_N$ . Na maioria das vezes, essa divergência ocorre devido a consideração de que o campo molecular em uma sub-rede depende apenas da magnetização da outra. Aplicar um campo magnético em um antiferromagneto em temperaturas abaixo de  $T_N$  é mais complexo do que se fizermos isso num ferromagneto abaixo de  $T_C$ . No caso antiferromagnético, a direção na qual o campo magnético é aplicado é fundamental. Pois neste tipo de

ordenamento não existe uma vantagem energética para que os momentos magnéticos se alinhem na direção do campo, pois qualquer economia de energia em uma sub-rede será cancelada pelo custo energético na outra [11].

No próximo capítulo, abordaremos os modelos e métodos utilizados para o desenvolvimento de nosso estudo. Discutiremos brevemente sobre ondas de spin, interação entre dois elétrons, origem da energia de interação de troca, o Hamiltoniano de Heisenberg para primeiros vizinhos isotrópico e anisotrópico, e interação antissimétrica do tipo Dzyaloshinskii–Moriya. Relembaremos as principais ideias envolvidas na abordagem semiclássica para estudar mágmons ferromagnéticos e antiferromagnéticos. Também determinaremos o coeficiente de transmissão correspondente para o espalhamento estacionário por um defeito de ligação.

# Capítulo 4

## Modelo e Método

### 4.1 Energia de interação de troca

Vamos considerar um sistema simples com dois elétrons, o primeiro com coordenada espacial  $r_1$  e o segundo  $r_2$ . Inicialmente, escrevemos o potencial de coulomb para a interação entre um par de elétrons:

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (4.1)$$

A distância entre os dois elétrons é dada por  $r_{12} = |r_1 - r_2|$ .

As funções de onda para o sistema são escritas em termos dos estados dos dois elétrons, de maneira que a mesma seja o produto desses estados individuais. De acordo com o Princípio da Exclusão de Pauli, para um par de elétrons, a função de onda total deve ser antissimétrica. A função de onda total é escrita como o produto da parte espacial com a parte de spin. Então, se a parte de spin for simétrica, a

parte espacial deve ser antissimétrica, e vice-versa [6].

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)] \chi_S, \quad (4.2)$$

Onde 4.2 é a função de onda do estado singlet, sendo os termos entre colchetes a parte espacial e  $\chi_S$  a parte de spin da função de onda. No estado singlet os spins dos dois elétrons estão orientados de maneira antiparalela, resultando em um estado com momento de spins total  $S = 0$ , sendo  $\chi_S$  antissimétrica, e obrigatoriamente a parte espacial da função de onda é simétrica. Escrevemos este estado como  $\chi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$  [6, 11].

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)] \chi_T, \quad (4.3)$$

Onde 4.3 é a função de onda do estado tripleno, sendo os termos entre colchetes a parte espacial e  $\chi_T$  a parte de spin da função de onda. No estado tripleno os spins dos dois elétrons estão orientados de maneira paralela, resultando em um estado com momento de spin total  $S = 1$ , sendo  $\chi_T$  simétrica e obrigatoriamente a parte espacial da função de onda é antissimétrica. Escrevemos estes estados como:  $\chi_{T+1} = |\uparrow\uparrow\rangle$  para  $m_S = +1$ ,  $\chi_{T0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$  para  $m_S = 0$  e  $\chi_{T-1} = |\downarrow\downarrow\rangle$  para  $m_S = -1$  [6, 11].

A interação entre os dois elétrons é coulombiana, logo não é dependente do spin. Desta forma, usaremos apenas a parte espacial das funções de onda.

$$\phi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)], \quad (4.4)$$

$$\phi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)]. \quad (4.5)$$

Podemos combinar as funções de onda dos estados singlet e triplete da seguinte maneira:

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2) \pm \psi(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1)], \quad (4.6)$$

De maneira que o sinal + ou - dependerá do estado de spin ser singlet ou triplete respectivamente. A energia média dependerá do estado do par de spins, apesar da interação entre os dois elétrons não depender.

$$\langle U \rangle = \int \phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) U(\vec{r}) \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dr_1 dr_2, \quad (4.7)$$

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dr_1 dr_2. \quad (4.8)$$

Sendo  $\frac{1}{r_{12}}$  a variável no potencial de interação entre as partículas, onde a distância  $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

Substituindo a função de onda espacial combinada 4.6 na equação da energia média 4.8:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int [\psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2) \pm \psi_a^*(\vec{r}_2)\psi_b^*(\vec{r}_1)] \frac{1}{r_{12}} [\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)] dr_1 dr_2. \quad (4.9)$$

No primeiro colchete estão os produtos cruzados das funções de onda conjugadas, no segundo colchetes estão os produtos cruzados das funções de onda não conjugadas. Agora vamos resolver a multiplicação dos termos nos colchetes:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle = & \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \right. \\ & \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \\ & \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_2)\psi_b^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \\ & \left. + \int \psi_a^*(\vec{r}_2)\psi_b^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Da expansão dos termos dos colchetes obtemos quatro integrais, onde são mostradas as combinações possíveis dos produtos das funções de onda conjugadas e não conjugadas, considerando as posições e os estados das partículas. A segunda e a terceira integral possuem estrutura similares ao termo da integral de interação de troca, para isso, teremos que trocar as funções de onda dos elétrons  $a$  e  $b$  em relação as suas posições  $r_1$  e  $r_2$  em uma das duas integrais. Desta forma, elas ficarão idênticas e poderemos somar e simplificar, passando a ter apenas uma integral para estes termos. Repare que a primeira e a quarta integral também são idênticas após fazermos os mesmos passos que antes, logo podemos soma-las e simplificar em apenas uma integral, veja:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{2e^2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \right. \\ &\quad \left. \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dr_1 dr_2 \right. \\ &\quad \left. \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) dr_1 dr_2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Vemos que  $\langle U \rangle$  é escrita como a soma de dois termos. Estes representam contribuições diferentes. O primeiro é o termo da energia de contribuição direta, onde não ocorre interação de troca. Isso significa que os elétrons permanecem em suas posições originais. O segundo termo é a contribuição da energia de interação de troca, onde as funções de onda dos elétrons mostram que, os elétrons trocam de posição devido a simetria dos estados entre duas partículas idênticas [6]:

$$\langle U \rangle = E \pm J_{troca}, \quad (4.13)$$

sendo:

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dr_1 dr_2, \quad (4.14)$$

e

$$J_{troca} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) dr_1 dr_2. \quad (4.15)$$

A energia média  $\langle U \rangle$  do sistema possui a soma de dois termos, sendo um deles a energia de interação de troca  $J_{troca}$ , decorrente do princípio da exclusão de Pauli. O termo  $J_{troca}$  é dependente do tipo de estado do spin do elétron, sendo singuleto ou tripléto. Logo, o alinhamento dos spins influencia na energia média. Desta maneira, o Hamiltoniano que descreve a energia de troca entre um par de spins deve ser escrito considerando suas componentes  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  [1, 67, 72]. Então:

$$H_{troca} = -2J_{troca} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (4.16)$$

Vamos chamar a constante de acoplamento de troca  $J_{troca}$  de  $J$ . Quando  $J > 0$ , significa que  $E_S > E_T$ , logo o estado tripléto ( $S = 1$ ) é favorecido. Quando  $J < 0$ , nos diz que  $E_S < E_T$ , então o estado singuleto ( $S = 0$ ) é favorecido [11].

## 4.2 Hamiltoniano de Heisenberg

Uma das maneiras de estudar como os materiais sólidos se comportam é através do modelo de Heisenberg. O modelo foi desenvolvido em 1928 por Werner Heisenberg, devido a importância da energia de interação de troca em materiais magnéticos, principalmente para determinar os seus ordenamentos magnéticos [11, 73]. Este modelo considera as interações magnéticas microscópicas entre vizinhos próximos, sendo definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (4.17)$$

No somatório da equação 4.17 o fator 2 é omitido, pois cada par de spins é incluído duas vezes. Isso significa que estamos realizando a soma tanto para  $i < j$  quanto para  $i > j$ . Podemos reescrever a soma somente para  $i > j$ , evitando contagem dupla

$$\hat{H} = -2J \sum_{\{i,j\}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (4.18)$$

Sendo  $J$  a constante de acoplamento de troca, o simbolo  $\sum_{\{i,j\}}$  mostra que a soma é realizada sobre os pares de spins vizinhos e os operadores de spin  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são vetores tridimensionais. É importante diferenciar a dimensionalidade do parâmetro de ordem  $D$  dos operadores de spin, da dimensionalidade  $d$  da rede em que os spins estão distribuídos. No modelo de Heisenberg  $D = 3$ , pois os operadores de spin são vetores tridimensionais, já a dimensionalidade da rede de spins pode ser  $d = [1, 2, 3...]$  dependendo do caso estudado [11].

O Hamiltoniano de Heisenberg mostrado na equação 4.18 representa o modelo  $XXX$ , que é aplicado quando a interação de troca do sistema é isotrópica entre as componentes de spin. Outros modelos do Hamiltoniano de Heisenberg muito importantes são os  $XXZ$  e  $XYZ$ . O  $XXZ$  descreve uma interação de troca havendo uma componente anisotrópica, enquanto o  $XYZ$  descreve as interações de troca onde as componentes do spin apresentam anisotropia em todas as direções. Aqui focaremos no modelo com anisotropia  $XXZ$ , onde as interações ao longo das direções  $x$  e  $y$  possuem a mesma intensidade da constante de acoplamento, enquanto a interação na direção  $z$  é diferente [74]. O Hamiltoniano para este modelo é o seguinte:

$$\hat{H} = -2J \sum_{\{i,j\}} [S_i^z \cdot S_j^z + \Delta (S_i^x \cdot S_j^x + S_i^y \cdot S_j^y)]. \quad (4.19)$$

Como no modelo anterior,  $J$  é a constante de acoplamento de troca e  $\Delta$  é o coeficiente de anisotropia, responsável controlar as interações nas direções que atua. Perceba que, para o valor do coeficiente  $\Delta = 1$  o Hamiltoniano é o mesmo do caso isotrópico  $XXX$ , enquanto para  $\Delta = 0$ , sobrevive apenas a componente  $S^z$  dos spins, resultando no modelo de Ising.

Em certos materiais, a energia de anisotropia age direcionando a magnetização em direções ou eixos específicos, chamados pela literatura de "direções fáceis". Esse fenômeno surge principalmente devido ao acoplamento spin-órbita, pois a magnetização percebe a arquitetura da rede cristalina, devido à ocorrência de sobreposições dos orbitais eletrônicos. Como exemplo de material, temos os cristais ferromagnéticos [1].

### 4.3 Interação de troca Antissimétrica

A interação de super troca ocorre quando um átomo de oxigênio funciona como um agente mediador para a interação entre íons magnéticos próximos, possibilitando tanto o alinhamento, quanto o desalinhamento dos seus spins, mesmo não havendo conexão direta entre estes íons [11].

Algo semelhante acontece quando existe a interação spin-órbita, porém não é necessário haver um agente intermediário, como o átomo de oxigênio. Na interação spin-orbita, um dos íons magnéticos é afetado diretamente, provocando um estado

excitado e consequentemente alterando a orientação de spin desse íon. A mudança no estado de spin do íon afetado possibilita a interação com o estado fundamental de outros íons próximos. Logo, essa interação é especial e possui características específicas que levam a uma interação de troca antissimétrica, conhecida como interação de Dzyaloshinskii–Moriya [11, 75, 76]. Podemos escrever o Hamiltoniano para essa interação, quando ocorre entre dois spins  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$

$$\hat{H}_{DM} = \vec{D} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2). \quad (4.20)$$

Onde a intensidade e a direção da interação Dzyaloshinskii–Moriya são descritas pelo vetor  $\vec{D}$ . Se o ambiente no entorno dos spins possuir simetria de inversão em relação ao ponto médio entre eles, permitindo trocar os spins de posição sem alterar o sistema, o vetor  $\vec{D}$  é nulo. A interação do tipo Dzyaloshinskii–Moriya é dependente de uma antissimetria na rede cristalina ou cadeia de spins, caso não exista, a interação desaparece. A simetria de inversão impossibilita haver uma direção preferencial para que  $\vec{D}$  possa atuar, desta forma o efeito da interação é eliminado [76, 11].

Muitos materiais não apresentam simetria de inversão, logo a interação Dzyaloshinskii–Moriya acontece, podendo induzir os spins a terem uma direção preferencial, a depender da simetria do sistema. O vetor  $\vec{D}$  pode ser paralelo ou perpendicular em relação à "linha" que conecta os dois spins. A interação tenta orientar os spins  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  em ângulos de 90° entre si, sendo que essa orientação entre os spins acontece em um plano que é perpendicular a  $\vec{D}$ , que é favorável para minimizar a energia do sistema. O "canting" é uma pequena rotação dos spins que surge desses

alinhamentos entre os spins e  $\vec{D}$ . O "canting" é mais comum nos antiferromagnéticos, e resulta em um ferromagnetismo fraco perpendicular ao eixo do spin, mesmo o material sendo antiferromagnético [76, 75, 11].

## 4.4 Mágmons em cadeias de spin ferro e antiferromagnéticas

Estudaremos o espalhamento estacionário de excitações de mágmons por um defeito de ligação entre duas cadeias de spins de Heisenberg isotrópicas. Longe do defeito, a energia de acoplamento de um determinado spin adimensional  $\vec{S}_p$  com seus primeiros vizinhos é escrita como

$$E_p = -2J\vec{S}_p \cdot (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}), \quad (4.21)$$

onde  $J$  é o acoplamento isotrópico da energia de troca ao longo das cadeias laterais. Introduzindo o momento magnético  $\vec{\mu}_p = -g\mu_B\vec{S}_p$ , onde  $g$  é o fator giro-magnético e  $\mu_B$  é o magneton de Bohr, essa energia de acoplamento pode ser escrita em termos do campo magnético efetivo sentido por  $\vec{\mu}_p$  vindo do acoplamento com seus vizinhos, como

$$\vec{S}_p = -\frac{\vec{\mu}_p}{g\mu_B}, \quad (4.22)$$

$$E_p = -2J\left(-\frac{\vec{\mu}_p}{g\mu_B}\right) \cdot (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}). \quad (4.23)$$

Sabendo que

$$E_p = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_p, \quad (4.24)$$

é determinado o campo magnético efetivo  $\vec{B}_p = -2J(\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1})/g\mu_B$ . A equação de movimento de Heisenberg para  $\vec{S}_p$  pode, portanto, ser escrita em termos do torque efetivo que atua sobre ela

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = \vec{\mu}_p \times \vec{B}_p. \quad (4.25)$$

A relação de dispersão das excitações dos mágmons pode ser determinada dentro da aproximação semiclássica, onde os spins são tomados como vetores clássicos e apenas pequenos desvios de spin do estado fundamental são considerados. Esta abordagem é particularmente precisa para valores  $S$  grandes. Aqui, relembraremos os principais passos de tal abordagem semiclássica que mais tarde será usada para estudar o problema do espalhamento estacionário.

No caso de uma cadeia ferromagnética ( $J > 0$ ), o estado fundamental é totalmente saturado com todos os spins apontando na mesma direção. Veja a figura 4.1 a seguir:

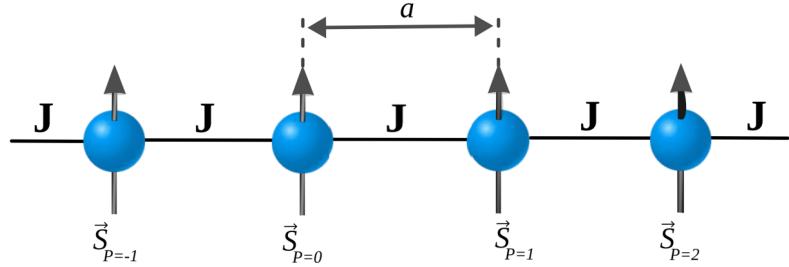


Figura 4.1: Representação esquemática de uma cadeia de spins ferromagnética sem defeito de ligação. A interação de troca ferromagnética que se conecta ao longo da cadeia é  $J$  e  $a$  é o espaçamento da rede. Todos os spins  $\vec{S}_p$  têm a mesma orientação no estado fundamental ferromagnético saturado.(Fonte: Elaborado pelo autor).

Resolvendo os produtos vetoriais da equação 4.25, separando os resultados para cada coordenada e em seguida fazendo a aproximação semi-clássica  $S^z \approx S$  e  $S^x, S^y \ll S$ , podemos considerar as componentes  $z$  de todos os spins  $S^z = S$  no estado fundamental, com a excitação apenas dando origem a pequenas componentes transversais que, de acordo com a equação de movimento de Heisenberg, obedecem

$$\hbar \frac{dS_p^x}{dt} = 4SJ S_p^y - 2SJ(S_{p-1}^y + S_{p+1}^y), \quad (4.26)$$

$$\hbar \frac{dS_p^y}{dt} = -4SJ S_p^x + 2SJ(S_{p-1}^x + S_{p+1}^x). \quad (4.27)$$

Essas equações do movimento acopladas podem ser resolvidas introduzindo as contrapartes clássicas dos operadores de levantamento de spin  $S_p^+ = S_p^x + iS_p^y$ , cuja equação de movimento é

$$\hbar \frac{dS_p^+}{dt} = -4iSJ S_p^+ + 2iSJ(S_{p-1}^+ + S_{p+1}^+). \quad (4.28)$$

Esta última equação de movimento (4.28) suporta soluções harmônicas de mágmons ferromagnéticos  $S_p^+ = ue^{i(pka - \omega t)}$ , onde  $a$  é o espaçamento entre os sítios vizinhos,  $k$  é o vetor de onda da excitação harmônica e  $\omega$  é sua frequência com uma relação de dispersão. Substituindo a solução harmônica na equação 4.28, chegamos na relação de dispersão para o caso ferromagnético

$$\hbar\omega = 4SJ[1 - \cos(ka)], \quad (4.29)$$

Sendo quadrático no regime de  $k$  pequeno, de acordo com a natureza massiva dos mágmons ferromagnéticos. Vale ressaltar que a relação de dispersão de mágmons ferromagnéticos, derivados da abordagem semiclássica, coincide com a relação de dispersão exata quando uma solução completa da mecânica quântica é desenvolvida.

Para o caso de uma cadeia antiferromagnética ( $J < 0$ ), a abordagem semiclássica assume que o estado fundamental é semelhante ao estado de Néel, tendo uma sequência alternada de spins para cima e para baixo. Veja a figura 4.2 a seguir:

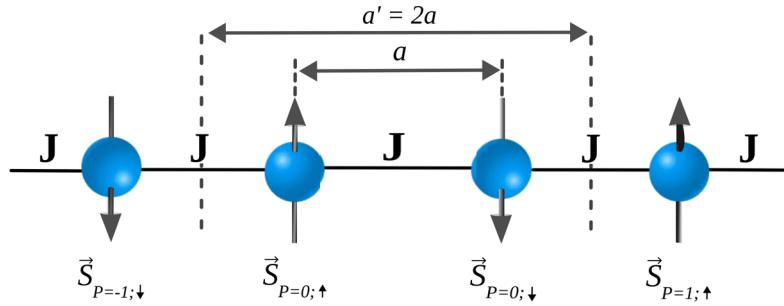


Figura 4.2: Representação esquemática de uma cadeia de spins antiferromagnética sem defeito de ligação. O acoplamento de troca antiferromagnético ao longo das cadeias laterais é  $J$ ,  $a$  é o espaçamento da rede. Os spins têm orientações alternadas no estado fundamental semiclássico de Néel.  $a' = 2a$  representa a célula unitária dessa configuração de spin. (Fonte: Elaborado pelo autor).

Aqui, consideraremos a célula unitária  $p$ -ésima da configuração de spins no estado fundamental, mostrada na figura 4.2, composta por um par de spins apontando em direções opostas  $S_{p,\uparrow}^z = S$  e  $S_{p,\downarrow}^z = -S$ . As componentes transversais desses dois spins obedecem as equações de movimento distintas, dadas por:

$$\hbar \frac{dS_{p\uparrow}^x}{dt} = -4SJS_{p,\uparrow}^y - 2SJ(S_{p\downarrow}^y + S_{p-1,\downarrow}^y), \quad (4.30)$$

$$\hbar \frac{dS_{p\uparrow}^y}{dt} = 4SJS_{p,\uparrow}^x + 2SJ(S_{p\downarrow}^x + S_{p-1,\downarrow}^x), \quad (4.31)$$

$$\hbar \frac{dS_{p\downarrow}^x}{dt} = 4SJS_{p,\downarrow}^y + 2SJ(S_{p+1,\uparrow}^y + S_{p,\uparrow}^y), \quad (4.32)$$

$$\hbar \frac{dS_{p\downarrow}^y}{dt} = -4SJS_{p,\downarrow}^x - 2SJ(S_{p+1,\uparrow}^x + S_{p,\uparrow}^x). \quad (4.33)$$

A introdução das variáveis de levantamento de spin permite-nos reduzir este conjunto de equações de movimento a um par de equações acopladas, na forma

$$\hbar \frac{dS_{p,\uparrow}^+}{dt} = 4iSJ S_{p\uparrow}^+ + 2iSJ(S_{p,\downarrow}^+ + S_{p-1,\downarrow}^+), \quad (4.34)$$

$$\hbar \frac{dS_{p,\downarrow}^+}{dt} = -4iSJ S_{p\downarrow}^+ - 2iSJ(S_{p,\uparrow}^+ + S_{p+1,\uparrow}^+). \quad (4.35)$$

Este conjunto de equações também suporta soluções harmônicas de mágmons antiferromagnéticos, mas com diferentes amplitudes nas sub-redes com spins para cima e para baixo:  $S_{p,\uparrow}^+ = ue^{i(pka' - \omega t)}$  e  $S_{p,\downarrow}^+ = ve^{i(pka' - \omega t)}$ , onde  $a' = 2a$ . Uma álgebra direta fornece a relação de dispersão

$$\hbar\omega = |4SJ \sin(ka'/2)|, \quad (4.36)$$

Sendo linear para  $k$  pequeno devido ao caráter não massivo dos mágmons antiferromagnéticos. A razão entre as amplitudes de onda nas duas sub-redes é obtida a partir de uma das equações de movimento (4.34 ou 4.35), ao substituir as soluções harmônicas de mágmons antiferromagnéticos e a relação de dispersão para a cadeia antiferromagnética, dada na equação 4.36. O resultado é o fator  $f$  a seguir:

$$f = v/u = -\frac{2[1 - |\sin(ka'/2)|]}{1 + e^{-ika'}}. \quad (4.37)$$

## 4.5 Espalhamento de mágons ferromagnéticos por um defeito de ligação

Aqui, consideraremos a solução do espalhamento estacionário de mágons ferromagnéticos por um defeito de ligação com um acoplamento de troca anisotrópica e uma interação antissimétrica de Dzyaloshinskii-Moriya. Considerando que essa ligação defeituosa está entre os sítios  $p = 0$  e  $p = 1$ , como é mostrado na figura abaixo:

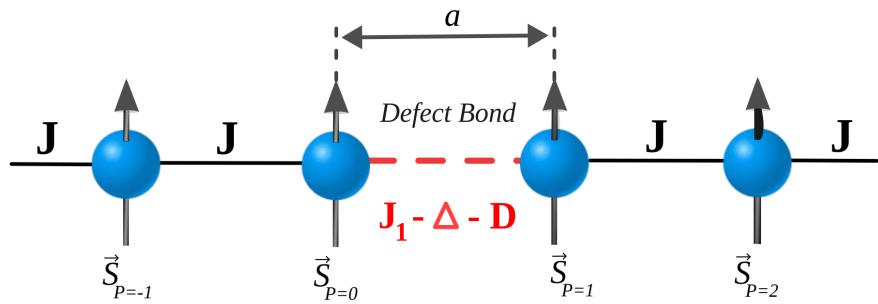


Figura 4.3: Representação esquemática de uma cadeia de spin ferromagnética com um defeito de ligação. O acoplamento de troca ferromagnética ao longo das cadeias laterais é  $J$ . O defeito de ligação tem um acoplamento de troca mais fraco  $J_1$ , com uma anisotropia transversal  $\Delta$  e interação Dzyaloshinskii-Moriya antissimétrica  $D$ .  $a$  é o espaçamento da rede. Todos os spins  $\vec{S}_p$  têm a mesma orientação no estado fundamental ferromagnético saturado.(Fonte: Elaborado pelo autor).

Consideraremos a energia de interação entre os spins primeiros vizinhos. O spin  $\vec{S}_{p=0}$  interage com os spins  $\vec{S}_{p=-1}$  e  $\vec{S}_{p=1}$ . Entre os sítios  $p = 0$  e  $p = 1$  a energia de interação é descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico e antissimétrico, pois existe o defeito entre eles, enquanto a energia de interação entre os sítios  $p = 0$  e  $p = -1$  é descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico e simétrico. Faremos as mesmas considerações para analisar as interações a partir do

spin do sítio  $\vec{S}_{p=1}$ , que interage com os spins vizinhos dos sítios  $\vec{S}_{p=0}$  e  $\vec{S}_{p=2}$ . Sendo que a interação com o vizinho à esquerda do sítio  $p = 1$  passa pelo defeito, enquanto que a interação à direita não passa pelo defeito.

A energia de interação entre os sítios onde o defeito faz a ligação é dada pelo Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico e antissimétrico a seguir:

$$E_{i,j} = -2J_1[S_i^z S_j^z + \Delta(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)] - D(\vec{S}_i \times \vec{S}_j)^z, \quad (4.38)$$

Sendo  $J_1$  o acoplamento de troca do defeito ao longo do eixo  $z$ ,  $\Delta$  é o fator de anisotropia de troca dos acoplamentos transversais e  $D$  é a energia de acoplamento da interação antissimétrica Dzyaloshinskii-Moriya. Consideramos  $\vec{D} = D\hat{z}$ , para simplificar escrevemos  $D\hat{z} = D$ .

Já a energia de interação entre os spins dos sítios distantes do defeito é descrita por:

$$E_{i,j} = -2J[S_i^z S_j^z + S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y], \quad (4.39)$$

onde  $J$  é o acoplamento de troca longe do defeito.

Assim, podemos escrever as energias de acoplamento dos spins  $\vec{S}_{p=0}$  e  $\vec{S}_{p=1}$  com seus primeiros vizinhos

$$E_0 = E_{-1,0} + E_{0,1}, \quad (4.40)$$

$$E_1 = E_{0,1} + E_{1,2}. \quad (4.41)$$

Fazendo a substituição dos devidos Hamiltonianos quando a interação envolve o defeito (equação 4.38) e quando não envolve (equação 4.39) nas equações 4.40 e 4.41, encontramos os campos moleculares efetivos

$$\begin{aligned}
 B_{-1}^z &= -\frac{2JS_{-1}^z}{g\mu_b}, \\
 B_{-1}^x &= -\frac{2JS_{-1}^x}{g\mu_b}, \\
 B_{-1}^y &= -\frac{2JS_{-1}^y}{g\mu_b}, \\
 B_1^z &= -\frac{2J_1S_1^z}{g\mu_b}, \\
 B_1^x &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_1^x + DS_1^y}{g\mu_b}\right], \\
 B_1^y &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_1^y - DS_1^x}{g\mu_b}\right]
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

e

$$\begin{aligned}
 B_0^z &= -\frac{2JS_0^z}{g\mu_b}, \\
 B_0^x &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_0^x - DS_0^y}{g\mu_b}\right], \\
 B_0^y &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_0^y + DS_0^x}{g\mu_b}\right], \\
 B_2^z &= -\frac{2JS_2^z}{g\mu_b}, \\
 B_2^x &= -\frac{2JS_2^x}{g\mu_b}, \\
 B_2^y &= -\frac{2JS_2^y}{g\mu_b}.
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

A partir da energia de acoplamento descrita em (4.40), obtemos os campos moleculares efetivos definidos em (4.42). Da mesma forma, a partir de (4.41) obtemos os campos moleculares efetivos definidos em (4.43). Então, podemos escrever as equações do movimento, como mostrado na equação (4.25)

$$\hbar \frac{d\vec{S}_0}{dt} = \vec{\mu}_0 \times (\vec{B}_{-1} + \vec{B}_{+1}), \quad (4.44)$$

$$\hbar \frac{d\vec{S}_{+1}}{dt} = \vec{\mu}_1 \times (\vec{B}_0 + \vec{B}_2). \quad (4.45)$$

Em seguida, resolvemos os produtos vetoriais e substituímos os campos moleculares efetivos, chegando nas equações do movimento separadas por coordenadas. Então, fazemos a aproximação semi-clássica já discutida na seção de Mágmons em cadeias de spin ferro e antiferromagnéticas. Por fim, obtemos as equações do movimento acopladas em termos das componentes transversais.

Para o sítio com  $\vec{S}_0$ :

$$\hbar \frac{dS_0^x}{dt} = S_0^y (2JS + 2J_1S) - S (2J_1\Delta S_1^y - DS_1^y + 2JS_{-1}^y), \quad (4.46)$$

$$\hbar \frac{dS_0^y}{dt} = S (2J_1\Delta S_1^z + DS_1^y + 2JS_{-1}^x) - S_0^x (2JS + 2J_1S). \quad (4.47)$$

Para o sítio com  $\vec{S}_1$ :

$$\hbar \frac{dS_1^x}{dt} = S_1^y (2J_1S + 2JS) - S (2J_1\Delta S_0^y + DS_0^x + 2JS_2^y), \quad (4.48)$$

$$\hbar \frac{dS_1^y}{dt} = S (2J_1\Delta S_0^x - DS_0^y + 2JS_2^x) - S_1^x (2J_1S + 2JS). \quad (4.49)$$

Essas equações de movimento acopladas podem ser resolvidas introduzindo os operadores de elevação  $S_p^+ = S_p^x + iS_p^y$ , o que nos permite reduzir este conjunto

de equações de movimento a um par de equações:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{dS_0^+}{dt} &= -2iS(J + J_1)S_0^+ + 2iSJS_{-1}^+ + (2iSJ_1\Delta + SD)S_1^+, \\ \hbar \frac{dS_1^+}{dt} &= -2iS(J + J_1)S_1^+ + 2iSJS_2^+ + (2iSJ_1\Delta - SD)S_0^+.\end{aligned}\quad (4.50)$$

Na abordagem de espalhamento estacionário, uma onda harmônica de amplitude  $I$  vinda do lado esquerdo do defeito é parcialmente refletida com amplitude  $R$  e parcialmente transmitida com amplitude  $T$ .

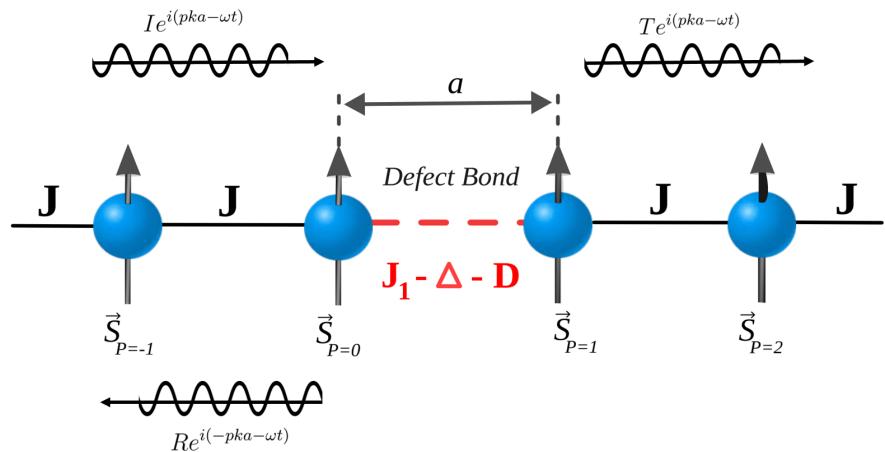


Figura 4.4: Representação esquemática de uma onda de spin incidente em uma cadeia de spins ferromagnético com um defeito de ligação anisotrópico e antissimétrico. A região defeituosa possui propriedades magnéticas distintas em relação ao restante das cadeias laterais, o que origina diferentes relações de dispersão para as ondas de spin. A onda de spin ao atingir o defeito, pode ser parcialmente transmitida e parcialmente refletida a depender dos parâmetros de interações do defeito. Todos os spins estão alinhados paralelamente na mesma direção no estado fundamental ferromagnético saturado.  $a$  é o espaçamento da rede desta configuração de spins. (Fonte: Elaborado pelo autor).

Portanto, as soluções de onda nos lados esquerdo e direito do defeito têm a

forma:

$$\begin{aligned} S_p^+ &= I e^{i(pka - \omega t)} + R e^{i(-pka - \omega t)} \quad (p \leq 0), \\ S_p^+ &= T e^{i(pka - \omega t)} \quad (p \geq 1). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Substituindo as soluções acima (4.51), nas equações de movimento (em termos dos operadores de levantamento de spin 4.50) para os sítios conectados pelo defeito, temos

Na equação do sítio  $\vec{S}_0$ :

$$\begin{aligned} [(2J_1\Delta Si + DS)e^{ika}] T + [2JSie^{ika} - (2JS + 2J_1S)i + \hbar wi] R = & \quad (4.52) \\ [-i\hbar w + (2JS + 2J_1S)i - 2JS e^{-ika}] I. \end{aligned}$$

Na equação do sítio  $\vec{S}_1$ :

$$\begin{aligned} [2JSie^{2ika} - (2JS + 2J_1S)ie^{ika} + i\omega\hbar e^{ika}] T + [(2J_1\Delta Si - DS)] R = & \quad (4.53) \\ - (2J_1\Delta Si - DS) I. \end{aligned}$$

Os resultados acima são usados para determinar as amplitudes de transmissão e reflexão das ondas de spin. Para melhor observação, as equações do movimento para os sítios conectados pelo defeito serão organizadas na equação matricial a seguir:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} I, \quad (4.54)$$

onde:

$$a_{11} = (2iSJ_1\Delta + SD)e^{ika} , \quad (4.55)$$

$$a_{12} = 2iSJ_1e^{ika} - 2iS(J + J_1) + i\hbar\omega , \quad (4.56)$$

$$a_{21} = 2iSJ_1e^{2ika} - 2iS(J + J_1)e^{ika} + i\hbar\omega e^{ika} , \quad (4.57)$$

$$a_{22} = 2iSJ_1\Delta - SD , \quad (4.58)$$

$$b_1 = 2iS(J + J_1) - 2iSJ_1e^{-ika} - \hbar\omega i , \quad (4.59)$$

$$b_2 = -(2iSJ_1\Delta - SD) , \quad (4.60)$$

a partir de 4.54 calculamos os determinantes principal, de transmissão e de reflexão respectivamente

$$\Delta_P = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \Delta_T = \begin{vmatrix} a_{11} & Ib_1 \\ a_{21} & Ib_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_R = \begin{vmatrix} a_{12} & Ib_1 \\ a_{22} & Ib_2 \end{vmatrix}, \quad (4.61)$$

sendo  $T = \frac{\Delta_T}{\Delta_P}$  e  $R = \frac{\Delta_R}{\Delta_P}$ , do qual se obtém os coeficientes de transmissão ( $t_F = |T/I|^2$ ) e reflexão ( $r_F = |R/I|^2$ ) de mágmons ferromagnéticos espalhados pela ligação defeituosa. A linearidade e Hermiticidade do Hamiltoniano implica a regra de conservação  $t_F + r_F = 1$ .

## 4.6 Espalhamento de mágons antiferromagnéticos por um defeito de ligação

A abordagem acima pode ser estendida para estudar o espalhamento de mágons antiferromagnéticos por um defeito de ligação semelhante. Aqui, consideraremos o defeito de ligação entre os dois spins na célula  $p = 0$ , tendo orientações de spin opostas no estado fundamental.

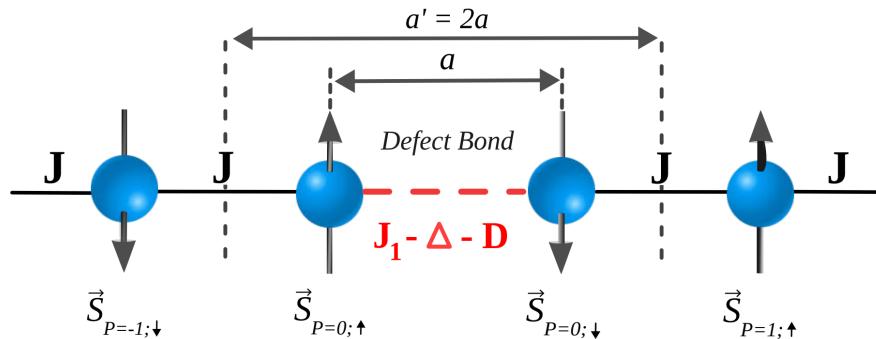


Figura 4.5: Representação esquemática de uma cadeia de spins antiferromagnética com defeito de ligação. O acoplamento de troca antiferromagnética que conecta as cadeias laterais é  $J$ . O defeito de ligação tem um acoplamento de troca mais fraco  $J_1$  com uma anisotropia transversal  $\Delta$  e interação Dzyaloshinskii-Moriya antissimétrica  $D$ .  $a$  é o espaçamento da rede. Os spins apresentam uma configuração alternada, com orientações antiparalelas (opostas) em sítios vizinhos no estado fundamental semiclássico de Néel.  $a' = 2a$  representa a célula unitária desta configuração de spins. (Fonte: Elaborado pelo autor).

De maneira semelhante ao que foi feito anteriormente no caso ferromagnético, consideraremos a energia de interação entre os spins primeiros vizinhos. O spin  $\vec{S}_{0,\uparrow}$  interage com os spins  $\vec{S}_{p=-1,\downarrow}$  e  $\vec{S}_{p=0,\downarrow}$ . Entre os sítios  $p = 0, \uparrow$  e  $p = 0, \downarrow$  a energia de interação é descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico e antissimétrico 4.38, pois existe o defeito entre eles, enquanto a energia de interação entre os sítios

$p = 0, \uparrow$  e  $p = -1, \downarrow$  é descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico e simétrico 4.39. Faremos a mesma consideração para analisar as interações a partir do spin do sítio  $\vec{S}_{p=0,\downarrow}$  que interage com os spins vizinhos dos sítios  $\vec{S}_{p=0,\uparrow}$  e  $\vec{S}_{p=1,\uparrow}$ . Sendo que a interação com o vizinho à esquerda do sítio  $p = 0, \downarrow$  passa pelo defeito, enquanto que a interação à direita não passa pelo defeito.

Devemos escrever duas equações para as energias de acoplamento entre spins vizinhos. A primeira equação para  $\vec{S}_{0,\uparrow}$  e a segunda para  $\vec{S}_{0,\downarrow}$ .

$$E_{0,\uparrow} = E_{(-1,\downarrow),(0,\uparrow)} + E_{(0,\uparrow),(0\downarrow)}, \quad (4.62)$$

$$E_{0,\downarrow} = E_{(0,\uparrow),(0,\downarrow)} + E_{(0,\downarrow),(1,\uparrow)}. \quad (4.63)$$

Substituindo os devidos Hamiltonianos, considerando a interação com o defeito (4.38) ou a não interação com o defeito (4.39), poderemos determinar os campos moleculares efetivos

$$\begin{aligned} B_{-1,\downarrow}^z &= -\frac{2JS_{-1,\downarrow}^z}{g\mu_b}, \\ B_{-1,\downarrow}^x &= -\frac{2JS_{-1,\downarrow}^x}{g\mu_b}, \\ B_{-1,\downarrow}^y &= -\frac{2JS_{-1,\downarrow}^y}{g\mu_b}, \\ B_{0,\downarrow}^z &= -\frac{2J_1S_{0,\downarrow}^z}{g\mu_b}, \\ B_{0,\downarrow}^x &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_{0,\downarrow}^x + DS_{0,\downarrow}^y}{g\mu_b}\right], \\ B_{0,\downarrow}^y &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_{0,\downarrow}^y - DS_{0,\downarrow}^x}{g\mu_b}\right] \end{aligned} \quad (4.64)$$

e

$$\begin{aligned}
B_{0,\uparrow}^z &= -\frac{2JS_{0,\uparrow}^z}{g\mu_b}, \\
B_{0,\uparrow}^x &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_{0,\uparrow}^x - DS_{0,\uparrow}^y}{g\mu_b}\right], \\
B_{0,\uparrow}^y &= -\left[\frac{2J_1\Delta S_{0,\uparrow}^y + DS_{0,\uparrow}^x}{g\mu_b}\right], \\
B_{1,\uparrow}^z &= -\frac{2JS_{1,\uparrow}^z}{g\mu_b}, \\
B_{1,\uparrow}^x &= -\frac{2JS_{1,\uparrow}^x}{g\mu_b}, \\
B_{1,\uparrow}^y &= -\frac{2JS_{1,\uparrow}^y}{g\mu_b}.
\end{aligned} \tag{4.65}$$

A partir da equação para a energia de acoplamento (4.62), obtemos os campos moleculares efetivos definidos em (4.64). Da mesma forma, a partir de (4.63) chegamos nos campos moleculares efetivos da equação (4.65). Então, usando como base a equação (4.25) podemos escrever as equações de movimento para os sítios ligados ao defeito na cadeia antiferromagnética, análogas as da seção anterior (4.44 e 4.45) no espalhamento ferromagnético. As equações de movimento semiclässicas para o espalhamento antiferromagnético, em termos dos operadores de levantamento correspondentes, são escritas da seguinte maneira:

$$\hbar \frac{dS_{0,\uparrow}^+}{dt} = 2iS(J + J_1)S_{0,\uparrow}^+ + 2iSJS_{-1,\downarrow}^+ + (2iSJ_1\Delta + SD)S_{0,\downarrow}^+, \tag{4.66}$$

$$\hbar \frac{dS_{0,\downarrow}^+}{dt} = -2iS(J + J_1)S_{0,\downarrow}^+ - 2iSJS_{1,\uparrow}^+ - (2iSJ_1\Delta - SD)S_{0,\uparrow}^+. \tag{4.67}$$

A solução do espalhamento estacionário em todos os sítios à esquerda da ligação defeituosa inclui ondas incidentes e refletidas com diferentes amplitudes nas sub-redes *Up* e *Down*. No lado direito da ligação defeituosa, há uma onda transmitida com amplitudes distintas nas sub-redes *Up* e *Down*, veja a figura 4.6.

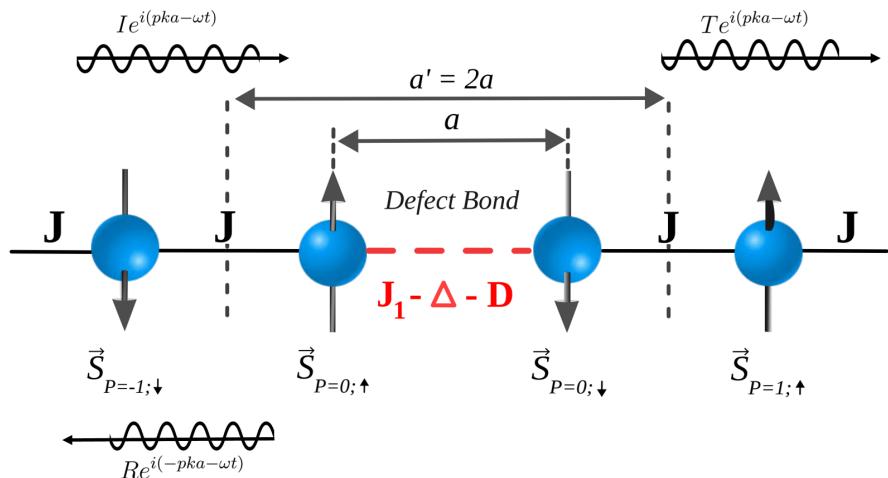


Figura 4.6: Representação esquemática de uma onda de spin incidente em uma cadeia de spins antiferromagnética com um defeito de ligação anisotrópico e antisimétrico. A região defeituosa possui propriedades magnéticas distintas em relação ao restante das cadeias laterais, o que origina diferentes relações de dispersão para as ondas de spin. A onda de spin ao atingir o defeito, pode ser parcialmente transmitida e parcialmente refletida, a depender dos parâmetros de interações do defeito.  $a$  é o espaçamento da rede. Os spins têm orientações alternadas *Up* e *Down* no estado fundamental semiclássico de Néel.  $a' = 2a$  representa a célula unitária desta configuração de spins. (Fonte: Elaborado pelo autor).

Portanto, as soluções de onda nos lados esquerdo e direito do defeito têm a

forma:

$$S_{p=0,\uparrow}^+ = I_{\uparrow} e^{i(pka' - \omega t)} + R_{\uparrow} e^{i(-pka' - \omega t)} , \quad (4.68)$$

$$S_{p=0,\downarrow}^+ = T_{\downarrow} e^{i(pka' - \omega t)} , \quad (4.69)$$

$$S_{p=1,\uparrow}^+ = T_{\uparrow} e^{i(pka' - \omega t)} , \quad (4.70)$$

$$S_{p=-1,\downarrow}^+ = I_{\downarrow} e^{i(pka' - \omega t)} + R_{\downarrow} e^{i(-pka' - \omega t)} , \quad (4.71)$$

$$(4.72)$$

Substituindo as soluções para o espalhamento estacionário nas equações de movimento dos sítios conectados ao defeito (4.66 e 4.67), em seguida simplificando as amplitudes distintas nas sub-redes, (que dependem da orientação dos spins) através do fator  $f$ , descrito em (4.37), depois escrevendo a amplitude de onda de spin *Down* como a amplitude de uma onda de spin *Up* vezes o fator  $f$ , poderemos diminuir pela metade o número de incógnitas das soluções. Com  $I_{\downarrow}/I_{\uparrow} = (R_{\downarrow}/R_{\uparrow})^* = f$  (ver Eq. 4.37) e com a razão  $T_{\downarrow}/T_{\uparrow} = f$ . Chegamos as seguintes relações:

A partir de 4.66,

$$(2J_1\Delta Si + DS)fT\uparrow + \left[ (\omega\hbar i + (2J_1S + 2JS)i + 2JSi f e^{ika}) R\uparrow \right] = \quad (4.73)$$

$$\left[ -i\omega\hbar - (2J_1S + 2JS)i - 2JSi e^{-ika}f \right] I\uparrow ,$$

e a partir de 4.66,

$$[i\omega\hbar f - (2J_1S + 2JS)if - 2JSie^{ika}]T\uparrow - (2J_1\Delta Si - DS)R\uparrow = \quad (4.74)$$

$$[2J_1\Delta Si - DS]I\uparrow.$$

As soluções de espalhamento estacionário também podem ser colocadas em forma de matriz,

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T\uparrow \\ R\uparrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} I\uparrow. \quad (4.75)$$

Onde,

$$c_{11} = (2iSJ_1\Delta + SD)f, \quad (4.76)$$

$$c_{12} = 2iSJ e^{ika'} f^* + 2iS(J + J_1) + i\hbar\omega, \quad (4.77)$$

$$c_{21} = -2iSJ e^{ika'} - 2iS(J + J_1)f + i\hbar\omega f, \quad (4.78)$$

$$c_{22} = -(2iSJ_1\Delta - SD), \quad (4.79)$$

$$d_1 = -2iS(J + J_1) - 2iSJ f e^{-ika} - \hbar\omega i, \quad (4.80)$$

$$d_2 = 2iSJ_1\Delta - SD, \quad (4.81)$$

a partir de 4.75 calculamos os determinantes principal  $\Delta_P$ , de transmissão  $\Delta_T$  e de reflexão  $\Delta_R$ , sendo as amplitudes das ondas de spin transmitidas e refletidas, respectivamente  $T = \frac{\Delta_T}{\Delta_P}$  e  $R = \frac{\Delta_R}{\Delta_P}$ . A partir do qual os coeficientes de transmissão ( $t_A = |T\uparrow/I\uparrow|^2$ ) e reflexão ( $r_A = |R\uparrow/I\uparrow|^2$ ) de mágmons antiferromagnéticos podem

ser extraídos diretamente (também com  $t_A + r_A = 1$ ).

No próximo capítulo, serão apresentadas e discutidas as principais características dos espectros de transmissão a partir das implementações de diferentes parâmetros e valores do acoplamento da interação de troca, anisotropia e antissimetria do defeito. Os resultados do trabalho abordam tanto as cadeias ferromagnéticas quanto as antiferromagnéticas.

# Capítulo 5

## Resultados e Discussões

Neste capítulo, consideraremos as unidades  $|J| = S = 1$  sem perda de generalidade. Começamos considerando o caso de um defeito isotrópico ( $\Delta = 1$ ) e simétrico ( $D = 0$ ). Assim, a ligação com o defeito tem um acoplamento de troca isotrópico que difere do acoplamento nas cadeias laterais. Restringiremos nossa análise a um acoplamento mais fraco na ligação com o defeito. A Figura 5.1 a seguir, mostra as características espectrais do coeficiente de transmissão de mágmons ferromagnéticos para valores distintos do acoplamento do defeito  $J_1$ . Os mágmons antiferromagnéticos apresentam os mesmos espectros de transmissão neste caso, ou seja,  $t_A(ka', |J_1|, \Delta = 1, D = 0) = t_F(ka, J_1, \Delta = 1, D = 0)$ . Modos quase uniformes com  $ka \ll 1$  são fracamente afetados por um defeito simétrico e isotrópico, sendo quase totalmente transmitidos. A transmissão se degrada para modos com comprimentos de onda menores (vetores de onda maiores), desaparecendo por  $ka = \pi$ . Além disso, diminui quando o acoplamento do defeito é enfraquecido, desaparecendo no limite de  $J_1 \rightarrow 0$  para o qual as cadeias laterais se desacoplam.

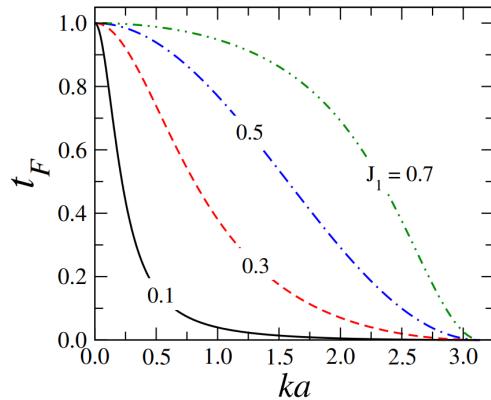


Figura 5.1: Espectros de transmissão de mágmons ferromagnéticos  $t_F$  incidentes em um defeito de ligação isotrópico ( $\Delta = 1$ ) e simétrico ( $D = 0$ ) com valores distintos do acoplamento de troca  $J_1$ . As energias estão em unidades de acoplamento de troca  $J$  ao longo das cadeias laterais. Os modos quase uniformes com  $ka \ll 1$  são fracamente afetados pela ligação do defeito e quase totalmente transmitidos. O coeficiente de transmissão diminui quando o acoplamento do defeito é enfraquecido, desaparecendo nos limites de  $J_1 \rightarrow 0$  e  $ka \rightarrow \pi$ . Para mágmons antiferromagnéticos, tem-se  $t_A(ka') = t_F(ka)$ . (Fonte: Elaborado pelo autor).

Para dividir o papel desempenhado pela anisotropia e antissimetria no processo de espalhamento, também consideramos o caso de  $J_1 = J$ . Os mágmons ferromagnéticos estão fortemente espalhados em ambos os limites de  $ka \rightarrow 0$  e  $ka \rightarrow \pi$ , representando a simetria  $t_F(ka) = t_F(\pi - ka)$ . Um comportamento não monotônico se desenvolve quando a antissimetria é introduzida em um defeito anisotrópico. Inicialmente, melhora a transmissão para pequenos graus de antissimetria, antes de levar a níveis de transmissão menores. A banda plana de transmissão transparente ocorre para  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2}$ , uma condição que pode ser calculada diretamente das equações matriciais para os mágmons ferromagnéticos em 4.60, assumindo  $R = 0$  para todos os vetores de onda. A transmissão de mágmons antiferromagnéticos para  $J_1 = J$  satisfaz  $t_A(ka', J_1 = -1, \Delta, D) = t_F(ka/2, J_1 = 1, \Delta, D)$ . Consequentemente, a transmissão máxima de mágmons antiferromagnéticos ocorre em  $ka' = \pi$ ,

com comportamento não monotônico se desenvolvendo, semelhante a banda plana de transmissão transparente, quando tanto a anisotropia, quanto a antissimetria são consideradas. Veja a seguir na figura 5.2:

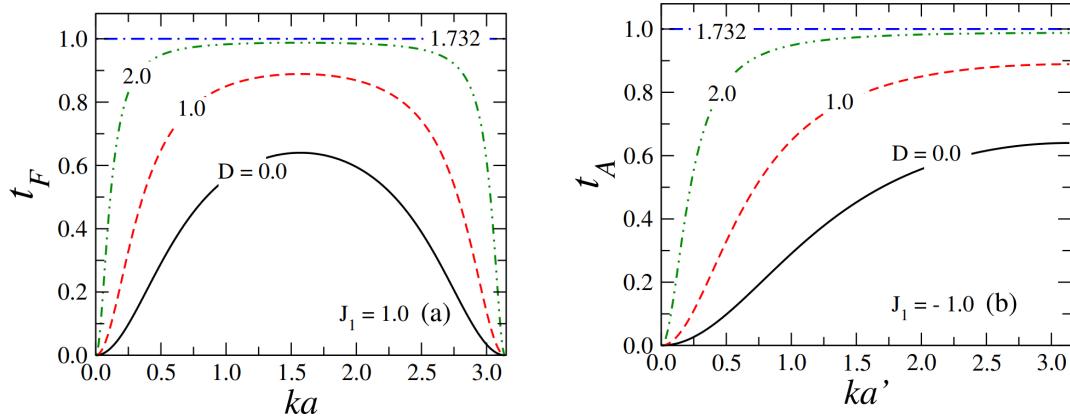


Figura 5.2: (a) Espectros de transmissão de mágmons ferromagnéticos ( $J = 1$ ) por um defeito com  $J_1 = 1$ , com anisotropia  $\Delta = 0.5$  e valores distintos da antissimetria  $D$ . O espectro é simétrico [ $t_F(ka) = t_F(\pi - ka)$ ] com transmissão nula em  $ka = 0$  e  $ka = \pi$ . Um comportamento não monotônico se desenvolve quando a antissimetria é sobreposta a um acoplamento de defeito anisotrópico. A banda plana de transmissão transparente ocorre para  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$ . (b) Espectros de transmissão de mágmons antiferromagnéticos ( $J = -1$ ). Aqui,  $t_A(ka') = t_F(ka/2)$  com transmissão máxima em  $ka' = \pi$ . (Fonte: Elaborado pelo autor).

O caso de um defeito de ligação com um acoplamento anisotrópico e antissimétrico, mas com um acoplamento de troca mais fraco  $J_1$  em comparação com o acoplamento ao longo das cadeias laterais, é ilustrado na Fig.5.3 para o caso particular de  $|J_1|= 0.5$  e  $\Delta = 0.5$ . O espectro de transmissão também tem uma dependência não monotônica do grau de antissimetria. No entanto, surgem novas funcionalidades. Nenhuma banda plana transparente ocorre para qualquer combinação dos parâmetros físicos do defeito. Os mágmons ferromagnéticos apresentam um único modo transparente para  $4J_1^2 < D^2 + 4(J_1\Delta)^2 < 4(2J - J_1)^2$ . Para os parâmetros específicos usados na Fig.5.3, esse modo transparente aparece para graus

de antissimetria no intervalo  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$ , conforme evidenciado na Figura 5.3a. O vetor de onda do modo transparente pode ser determinado a partir do conjunto das equações matriciais para os mágmons ferromagnéticos em 4.60 e é dado por:

$$\cos ka = \frac{4J^2 + 4(J - J_1)^2 - D^2 - 4(J_1\Delta)^2}{8J(J - J_1)}. \quad (5.1)$$

O espectro de transmissão correspondente para os mágmons antiferromagnéticos é mostrado na Figura 5.3b. A solução uniforme com  $ka' = 0$  é totalmente transmitida para  $D^2 + 4(J_1\Delta)^2 = 4J_1^2$  ( $D = \sqrt{3}/2$  para  $J_1 = 0.5$  e  $\Delta = 0.5$ ). Contrastando com o caso dos mágmons ferromagnéticos, não há faixa de grau de antissimetria para o qual um modo transparente de mágmons antiferromagnéticos com um vetor de onda finito seja suportado.

Veja a seguir na figura 5.3, os espectros de transmissão ferromagnético e antiferromagnético para o caso de um defeito de ligação com um acoplamento anisotrópico e antissimétrico, mas com um acoplamento de troca mais fraco  $J_1$  em comparação com o acoplamento ao longo das cadeias laterais:

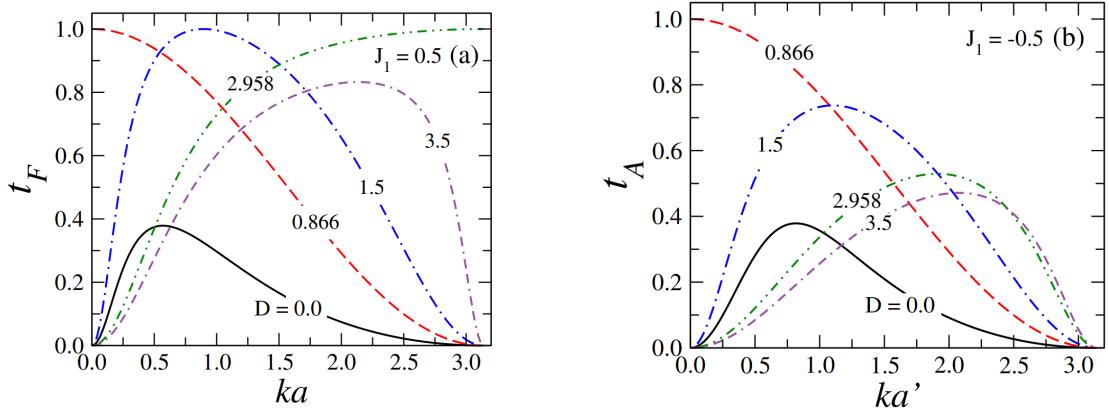


Figura 5.3: (a) Espectros de transmissão de mágmons ferromagnéticos ( $J = 1$ ) para um defeito de ligação com  $J_1 = 0.5$  e  $\Delta = 0.5$  para alguns valores do parâmetro antissimetria  $D$ . Um modo totalmente transmitido (transparente) é suportado no intervalo  $\sqrt{3}/2 = 0,866\dots < D < \sqrt{35}/2 = 2,958\dots$  (ver texto principal). (b) Os espectros de transmissão correspondentes aos mágmons antiferromagnéticos ( $J = -1$ ). Embora ainda não seja uma dependência monotônica do grau de antissimetria, nenhum modo transparente antiferromagnético com um vetor de onda finito é suportado. (Fonte: Elaborado pelo autor).

Os gráficos de densidade a seguir fornecem uma visão detalhada das principais características espectrais do coeficiente de transmissão. Na Fig.5.4, nos concentramos no caso de  $J_1/J = 1$  e um valor específico do parâmetro de anisotropia  $\Delta = 0.5$ . A transparência total em  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$  é sinalizada por uma banda plana de transmissão transparente para ambos os casos de mágmons ferromagnéticos e antiferromagnéticos.

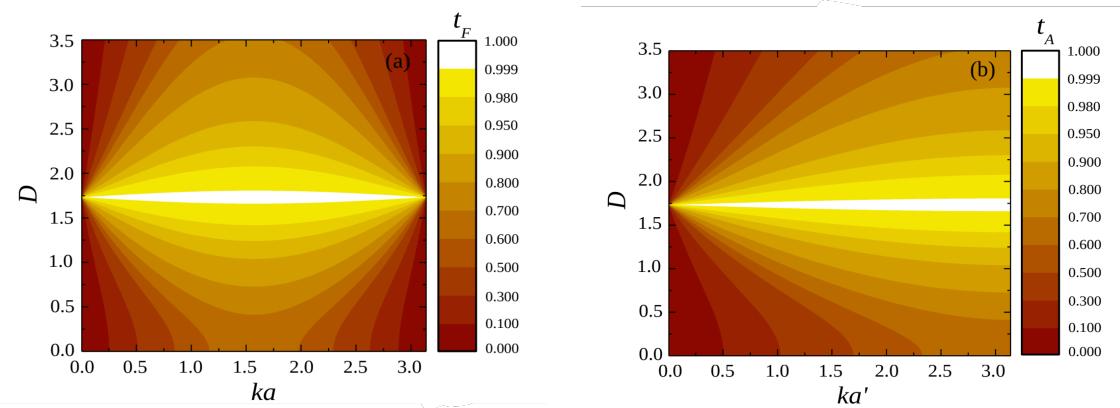


Figura 5.4: Gráfico de densidade da transmissão de mágmons (a) ferromagnéticos ( $J = 1$ ) e (b) antiferromagnéticos ( $J = -1$ ) no espaço de parâmetros  $k \times D$ , para um defeito de ligação com  $\Delta = 0.5$  e  $|J_1| = 1.0$ . Observe a banda plana de transmissão transparente em  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$ . (Fonte: Elaborado pelo autor).

Esse comportamento de banda plana é quebrado quando o acoplamento de troca do defeito  $J_1$  difere daquele nas cadeias laterais, conforme ilustrado na Fig.5.5. Um modo transparente sobrevive com um vetor de onda que muda com o grau de antisimetria no intervalo  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$  nas cadeias ferromagnéticas, conforme discutido acima. Apenas o modo uniforme com  $ka' = 0$  permanece transparente em cadeias antiferromagnéticas com  $D = \sqrt{3}/2$ .

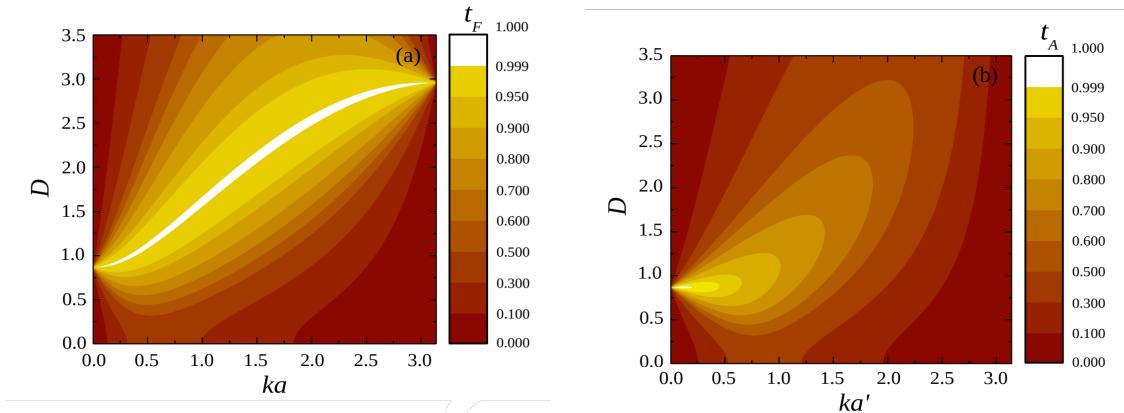


Figura 5.5: Gráfico de densidade da transmissão de mágmons (a) ferromagnéticos ( $J = 1$ ) e (b) antiferromagnéticos ( $J = -1$ ) no espaço de parâmetros  $k \times D$  para um defeito de ligação com  $\Delta = 0.5$  e  $|J_1| = 0.5$ . Em cadeias ferromagnéticas, um modo transparente sobrevive com o vetor de onda mudando com o grau de antissimetria no intervalo  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$  (veja o texto principal para mais detalhes). Apenas o modo uniforme  $ka' = 0$  permanece transparente em cadeias antiferromagnéticas com  $D = \sqrt{3}/2$ . (Fonte: Elaborado pelo autor).

O papel desempenhado pelo grau de antissimetria do acoplamento  $D$  entre as cadeias laterais é evidenciado nos gráficos de densidade a seguir. Na Fig.5.6, relatamos o coeficiente de transmissão em função de  $k \times J_1$  para um acoplamento com defeito simétrico ( $D = 0$ ) e anisotrópico ( $\Delta = 0.5$ ). Não existe modo transparente de mágmons ferromagnéticos ou antiferromagnéticos.

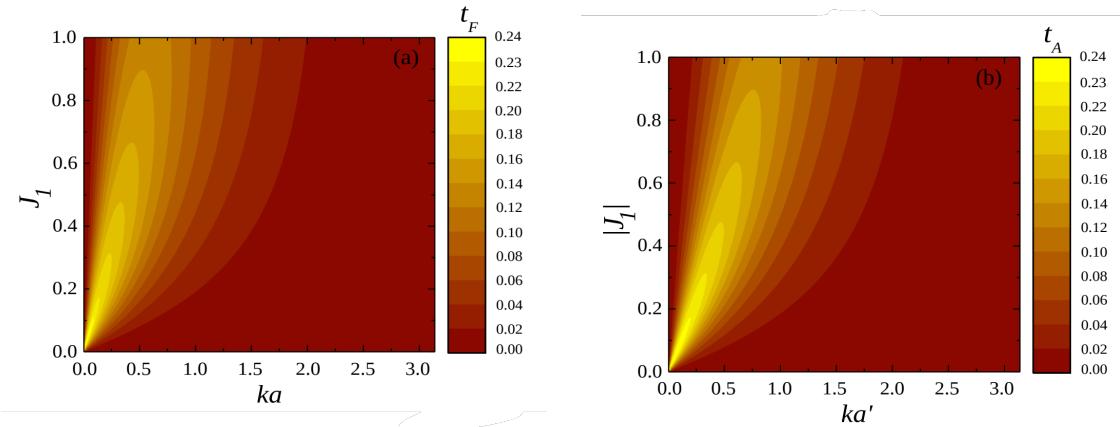


Figura 5.6: Gráfico de densidade da transmissão de mágmons (a) ferromagnéticos ( $J = 1$ ) e (b) antiferromagnéticos ( $J = -1$ ) no espaço de parâmetros  $k \times J_1$  para uma ligação com defeito simétrico  $D = 0$  e anisotrópico com  $\Delta = 0.5$ . Não existe modo transparente nos mágmons ferromagnéticos ou antiferromagnéticos para um defeito simétrico e anisotrópico. (Fonte: Elaborado pelo autor).

O coeficiente de transmissão em função de  $k \times J_1$ , para um acoplamento com defeito anisotrópico  $\Delta = 0.5$  e antissimétrico com  $D = 1$  é mostrado na Fig.5.7. Observe o surgimento de mágmons ferromagnéticos transparentes em uma faixa finita de pequenos vetores de onda ( $\cos ka < (8 - D^2)/8$ ), de acordo com a Eq.5.1). O modo uniforme é transparente para  $J_1 = D/2\sqrt{1 - \Delta^2}$ . Não existe nenhum modo transparente acima desse valor do acoplamento de troca do defeito. Para os mágmons antiferromagnéticos o modo uniforme é o único que permanece transparente.

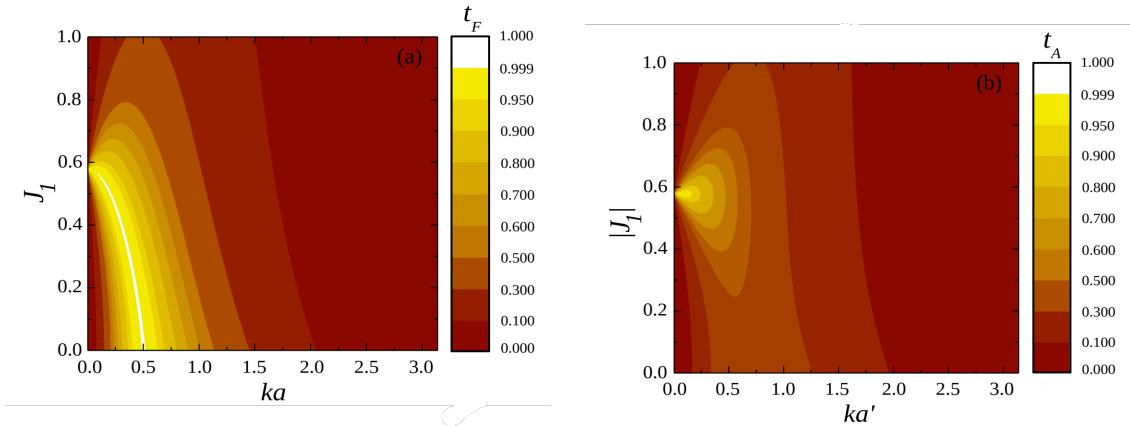


Figura 5.7: Gráfico de densidade da transmissão de mágmons (a) ferromagnéticos ( $J = 1$ ) e (b) antiferromagnéticos ( $J = -1$ ) no espaço de parâmetros  $k \times J_1$  para uma ligação com defeito antissimétrico e anisotrópico com  $\Delta = 0.5$  e  $D = 1.0$ . Existe um modo transparente de mágmons ferromagnéticos para pequenos vetores de onda. O modo uniforme é transparente para  $J_1 = D/2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}/3$ . Para valores menores de  $J_1$ , o modo transparente é deslocado para vetores de onda finitos até  $\cos ka = (8 - D^2)/8 = 7/8$  ( $ka = 0,505\dots$ ). Não há modo transparente com um vetor de onda maior. Apenas o modo uniforme dos mágmons antiferromagnéticos é transparente. (Fonte: Elaborado pelo autor).

Os resultados deste estudo foram recentemente publicados, estando disponíveis no apêndice A [77]. O próximo capítulo apresenta e discute as principais características dos espectros de transmissão mostrados aqui nos resultados. Nossas principais descobertas serão resumidas e terminamos delineando possíveis direções para pesquisas futuras.

# Capítulo 6

## Conclusões e perspectivas

Em resumo, estudamos o espalhamento estacionário de mágmons unidimensionais ferro e antiferromagnéticos por um defeito de ligação, conectando duas cadeias laterais com acoplamento de troca de Heisenberg isotrópico de primeiros vizinhos  $J$ . Considera-se que a ligação do defeito tem um acoplamento de troca anisotrópico  $XXZ$ , caracterizado por um acoplamento de troca de componente  $z$  mais fraco  $J_1$  e grau de anisotropia  $\Delta$ , bem como uma interação Dzyaloshinskii-Moriya antissimétrica  $D$ .

Dentro de uma descrição semiclássica da dinâmica de spin, calculamos analiticamente o espectro de transmissão de mágmons de vetor de onda  $k$  e frequência  $\omega$  para ambos os casos de cadeias laterais ferro e antiferromagnéticas. Para o caso de um defeito isotrópico ( $\Delta = 1$ ) e simétrico ( $D = 0$ ), as transmissões de mágmons ferromagnéticos e antiferromagnéticos são degradadas de forma semelhante à medida que o acoplamento de troca na ligação do defeito diminui, como esperado. O espectro de transmissão tem uma dependência não monotônica do grau de antissimetria

para um defeito de ligação anisotrópico. No caso de  $J_1 = J$ , pode ocorrer transmissão transparente em uma banda plana de mágmons ferro e antiferromagnéticos. A condição para a transparência total da ligação pelo defeito é  $D^2 + 4(J_1\Delta)^2 = 4J_1^2$ . No caso geral de  $J_1/J < 1$ , um único modo de mágmons ferromagnéticos com um vetor de onda finito é totalmente transmitido quando os parâmetros físicos do defeito satisfazem  $4J_1^2 < D^2 + 4(J_1\Delta)^2 < 4(2J - J_1)^2$ , uma característica não apresentada por mágmons antiferromagnéticos.

É possível considerar os espectros de transmissão de sistemas de spin com diferentes cadeias laterais e arquiteturas de acoplamento, expandindo a atual solução de espalhamento estacionário semiclássica. De fato, a abordagem semiclássica pode ser implementada para sistemas com dimensões superiores [78, 79]. Uma extensão natural é estudar o espalhamento de mágmons por um defeito em linha em estruturas magnéticas  $2D$ , buscando condições para alcançar modos sem reflexão unidirecional e banda plana de transmissão [31]. Vale ressaltar que os modos que são totalmente transmitidos por uma única impureza em  $1D$  ou por um defeito em linha em sistemas magnéticos  $2D$  não serão espalhados por distribuições periódicas ou aleatórias de tais impurezas, abrindo caminho para o estudo do espalhamento estacionário de mágmons em cristais magnônicos  $1D$  combinando a presente abordagem com técnicas padrão de matriz de transferência. Outra perspectiva é, por exemplo, estudar a possibilidade de transmissão não recíproca através de defeitos não hermitianos, uma característica desejada de dispositivos semelhantes a diodos baseados em ondas de spin. Configurações com várias cadeias de spin interconectadas podem operar como portas lógicas de onda de spin, com funções específicas sendo controladas pelos parâmetros de acoplamento. A análise do espectro de transmissão de cadeias de spin

interconectadas pode, portanto, fornecer informações importantes sobre a operação e engenharia de vários tipos de dispositivos magnônicos capazes de realizar operações típicas em sistemas de processamento de dados analógicos e digitais.

# Referências Bibliográficas

- 1 KITTEL, C. *Introduction to solid state physics* eighth edition. 2021.
- 2 NIKITOV, S.; TAILHADES, P.; TSAI, C. Spin waves in periodic magnetic structures—magnonic crystals. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 236, n. 3, p. 320–330, 2001.
- 3 KRUGLYAK, V. et al. Spin-wave spectrum of a magnonic crystal with an isolated defect. *Journal of applied physics*, AIP Publishing, v. 99, n. 8, 2006.
- 4 VERBA, R.; TIBERKEVICH, V.; SLAVIN, A. Spin-wave transmission through an internal boundary: Beyond the scalar approximation. *Physical Review B*, APS, v. 101, n. 14, p. 144430, 2020.
- 5 EISBERG, R.; RESNICK, R. Quantum physics of atoms, molecules. solids. *Nuclei and Particles*,, p. 466, 1986.
- 6 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J.; DAHMEN, S. *Mecânica Quântica Moderna*. [S.l.]: Bookman, 2013. ISBN 9788565837095.
- 7 MARTINS, N. *Novos materiais com propriedades magnéticas*. Dissertação (Mestrado), 2008.
- 8 SIMON, S. H. *The Oxford solid state basics*. [S.l.]: OUP Oxford, 2013.
- 9 AMORIM, B. F. Síntese e caracterizações estrutural e magnética das ferritas de cobalto-manganês (co1-xmnxfe2o4 e co1, 2fe1, 8-xmnxo4). Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2015.
- 10 KITTEL, C.; MCEUEN, P. *Introduction to solid state physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2018.
- 11 BLUNDELL, S. *Magnetism in condensed matter*. [S.l.]: OUP Oxford, 2001.
- 12 ANSELMO, D. H. A. d. L. Espectro das ondas de spin lineares e não-lineares em multicamadas magnéticas anisotrópicas. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 1999.
- 13 WHITE, R. M.; WHITE, R. M.; BAYNE, B. *Quantum theory of magnetism*. [S.l.]: Springer, 1983. v. 1.

- 14 XU, Y.; AWSCHALOM, D. D.; NITTA, J. *Handbook of spintronics*. [S.l.]: Springer Publishing Company, Incorporated, 2016.
- 15 CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to magnetic materials*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- 16 LEVITT, M. H. *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- 17 HIROHATA, A. et al. Review on spintronics: Principles and device applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 509, p. 166711, 2020.
- 18 SHANG, C. et al. Atomic wires of transition metal chalcogenides: A family of 1d materials for flexible electronics and spintronics. *JACS Au*, ACS Publications, v. 1, n. 2, p. 147–155, 2020.
- 19 KRUGLYAK, V.; DEMOKRITOY, S.; GRUNDLER, D. Magnonics. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 43, n. 26, p. 264001, 2010.
- 20 CHUMAK, A. V. et al. Magnon spintronics. *Nature physics*, Nature Publishing Group UK London, v. 11, n. 6, p. 453–461, 2015.
- 21 HENNIG, D.; TSIRONIS, G. P. Wave transmission in nonlinear lattices. *Physics Reports*, Elsevier, v. 307, n. 5-6, p. 333–432, 1999.
- 22 VASSEUR, J. O. et al. Photon, electron, magnon, phonon and plasmon mono-mode circuits. *Surface science reports*, Elsevier, v. 54, n. 1-4, p. 1–156, 2004.
- 23 CHUMAK, A. V. et al. Spin-wave propagation in a microstructured magnonic crystal. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 95, n. 26, 2009.
- 24 PARK, G.; YANG, J.; KIM, S.-K. Recursive evolution of spin-wave multiplets in magnonic crystals of antidot-lattice fractals. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 11, n. 1, p. 22604, 2021.
- 25 GHAEMI-DIZICHEH, H.; SCHOMERUS, H. Compatibility of transport effects in non-hermitian nonreciprocal systems. *Physical Review A*, APS, v. 104, n. 2, p. 023515, 2021.
- 26 FREY, P. et al. Reflection-less width-modulated magnonic crystal. *Communications Physics*, Nature Publishing Group UK London, v. 3, n. 1, p. 17, 2020.
- 27 CSABA, G.; PAPP, Á.; POROD, W. Perspectives of using spin waves for computing and signal processing. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 381, n. 17, p. 1471–1476, 2017.
- 28 KOHDA, M. et al. Perspective on spin-based wave-parallel computing. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 123, n. 19, 2023.

- 29 CHESHIRE, D. et al. Increased gilbert damping in yttrium iron garnet by low temperature vacuum annealing. *arXiv preprint arXiv:2407.16005*, 2024.
- 30 LENK, B. et al. The building blocks of magnonics. *Physics Reports*, Elsevier, v. 507, n. 4-5, p. 107–136, 2011.
- 31 FLORES-FARÍAS, J. et al. Omnidirectional flat bands in chiral magnonic crystals. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 12, n. 1, p. 17831, 2022.
- 32 INOUE, M. et al. Investigating the use of magnonic crystals as extremely sensitive magnetic field sensors at room temperature. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 98, n. 13, 2011.
- 33 CHUMAK, A.; SERGA, A.; HILLEBRANDS, B. Magnonic crystals for data processing. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 50, n. 24, p. 244001, 2017.
- 34 SZULC, K. et al. Spin-wave diode and circulator based on unidirectional coupling. *Physical Review Applied*, APS, v. 14, n. 3, p. 034063, 2020.
- 35 LAN, J. et al. Spin-wave diode. *Physical Review X*, APS, v. 5, n. 4, p. 041049, 2015.
- 36 KHITUN, A.; BAO, M.; WANG, K. L. Magnonic logic circuits. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 43, n. 26, p. 264005, 2010.
- 37 KHITUN, A. Multi-frequency magnonic logic circuits for parallel data processing. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 111, n. 5, 2012.
- 38 MOROZOVA, M. et al. Nonlinear signal processing with magnonic superlattice with two periods. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 120, n. 12, 2022.
- 39 SLUKA, V. et al. Emission and propagation of 1d and 2d spin waves with nanoscale wavelengths in anisotropic spin textures. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group UK London, v. 14, n. 4, p. 328–333, 2019.
- 40 WANG, H. et al. Nonreciprocal coherent coupling of nanomagnets by exchange spin waves. *Nano Research*, Springer, p. 1–6, 2021.
- 41 GHAEMI-DIZICHEH, H. Transport effects in non-hermitian nonreciprocal systems: General approach. *Physical Review B*, APS, v. 107, n. 12, p. 125155, 2023.
- 42 KOSTYLEV, M. et al. Resonant and nonresonant scattering of dipole-dominated spin waves from a region of inhomogeneous magnetic field in a ferromagnetic film. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 76, n. 18, p. 184419, 2007.

- 43 DEMOKRITOV, S. et al. Tunneling of dipolar spin waves through a region of inhomogeneous magnetic field. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 4, p. 047201, 2004.
- 44 MANZIN, A. et al. Influence of lattice defects on the ferromagnetic resonance behaviour of 2d magnonic crystals. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 22004, 2016.
- 45 KRAWCZYK, M.; GRUNDLER, D. Review and prospects of magnonic crystals and devices with reprogrammable band structure. *Journal of physics: Condensed matter*, IOP Publishing, v. 26, n. 12, p. 123202, 2014.
- 46 MOHSENI, M. et al. Controlling the propagation of dipole-exchange spin waves using local inhomogeneity of the anisotropy. *Physical Review B*, APS, v. 102, n. 1, p. 014445, 2020.
- 47 BRENIG, W.; KAMPF, A. P. Spin excitations in a quantum antiferromagnet with magnetic impurities and vacancies. *Physical Review B*, APS, v. 43, n. 16, p. 12914, 1991.
- 48 BRENES, M. et al. High-temperature coherent transport in the xxz chain in the presence of an impurity. *Physical Review B*, APS, v. 98, n. 23, p. 235128, 2018.
- 49 BAR'YAKHTAR, V.; URUSHADZE, G. The scattering of spin waves and phonons by impurities in ferromagnetic dielectrics. *Soviet Physics JETP*, v. 12, n. 2, 1961.
- 50 BRENIG, W.; CHERNYSHEV, A. Highly dispersive scattering from defects in noncollinear magnets. *Physical Review Letters*, APS, v. 110, n. 15, p. 157203, 2013.
- 51 SØRENSEN, E. S. et al. Quantum impurity entanglement. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2007, n. 08, p. P08003, 2007.
- 52 AFFLECK, I.; LAFLORENCIE, N.; SØRENSEN, E. S. Entanglement entropy in quantum impurity systems and systems with boundaries. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 42, n. 50, p. 504009, 2009.
- 53 APOLLARO, T. J.; PLASTINA, F. Entanglement localization by a single defect in a spin chain. *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics*, APS, v. 74, n. 6, p. 062316, 2006.
- 54 HUR, K. L.; DOUCET-BEAUPRÉ, P.; HOFSTETTER, W. Entanglement and criticality in quantum impurity systems. *Physical review letters*, APS, v. 99, n. 12, p. 126801, 2007.
- 55 EVANGELOU, S.; WANG, A.; XIONG, S. Reflectionless spin waves in heisenberg chains with spin impurity segments. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 6, n. 26, p. 4937, 1994.

- 56 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to electrodynamics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2023.
- 57 SILVA, W. F. d. Modelo de Heisenberg XXZ para ondas de spin em baixa dimensão. 2021.
- 58 GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to quantum mechanics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2019.
- 59 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D.; RODRIGUEZ, S. Solid state physics. *American Journal of Physics*, AIP Publishing, v. 46, n. 1, p. 116–117, 1978.
- 60 GREINER, W. *Quantum mechanics: an introduction*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011.
- 61 GOMES, G. G.; PIETROCOLA, M. O experimento de stern-gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 33, p. 2604, 2011.
- 62 KITTEL, C. *Introdução À Física Do Estado Sólido* . [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2000.
- 63 WHITE, R. M. *Quantum Theory of Magnetism: Magnetic Properties of Materials*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. v. 32.
- 64 FENG, D.; JIN, G. *Introduction To Condensed Matter Physics, Volume 1*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2005.
- 65 AUERBACH, A. *Interacting electrons and quantum magnetism*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 66 CALLAWAY, J. *Quantum theory of the solid state*. [S.l.]: Academic press, 2013.
- 67 MADELUNG, O. *Introduction to solid-state theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 2.
- 68 HALLIDAY, D. et al. Física 3-4<sup>a</sup> edição-livros técnicos e científicos editora s. A (LTC)-Rio de Janeiro-1996.
- 69 COSTA, M. D. S.; QUASIPERIÓDICO, A. M. D. I. Mestrado em física.
- 70 RIBEIRO, G. A. P. As propriedades magnéticas da matéria: um primeiro contato. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, 2000.
- 71 MARQUES, C. Anisotropia magnética de troca unidirecional no sistema fe/mno<sub>2</sub> obtido por mecanossíntese.
- 72 OLIVEIRA, I. S. *Introdução à física do estado sólido*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.

- 73 HEISENBERG, W. *Zur theorie des ferromagnetismus*. [S.l.]: Springer, 1985.
- 74 GIAMARCHI, T. *Quantum physics in one dimension*. [S.l.]: Clarendon press, 2003. v. 121.
- 75 DZYALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of physics and chemistry of solids*, Elsevier, v. 4, n. 4, p. 241–255, 1958.
- 76 MORIYA, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical review*, APS, v. 120, n. 1, p. 91, 1960.
- 77 FONSECA, R. et al. Stationary scattering of one-dimensional magnons by an anisotropic and antisymmetric bond defect. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 054401, Feb 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.054401>>.
- 78 REZENDE, S. M.; REZENDE, S. M. Spin waves in ferromagnets: semiclassical approach. *Fundamentals of magnonics*, Springer, p. 31–70, 2020.
- 79 CHERN, G.-W. et al. Semiclassical dynamics of spin density waves. *Physical Review B*, APS, v. 97, n. 3, p. 035120, 2018.

## Apêndice A

### Artigo Publicado

## Stationary scattering of one-dimensional magnons by an anisotropic and antisymmetric bond defect

Reinaldo Fonseca,<sup>1</sup> Luan M. Veríssimo<sup>1,2</sup>, Maria S. S. Pereira,<sup>1</sup> and Marcelo L. Lyra<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió-AL, Brazil*

<sup>2</sup>*Donostia International Physics Center, Paseo Manuel de Lardizabal 4, E-20018 San Sebastián, Spain*

(Received 30 August 2024; revised 11 December 2024; accepted 21 January 2025; published 3 February 2025)

We study the scattering of one-dimensional ferro- and antiferromagnetic magnons by a bond defect. The bond defect connects two side chains of spins with isotropic Heisenberg first-neighbor coupling. The bond defect accounts for an anisotropic Heisenberg coupling and an antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Within a semiclassical approach, the stationary scattering theory determines the transmission spectra of magnon excitations as a function of the coupling parameters at the bond defect. We compare the spectral properties of ferro- and antiferromagnetic magnons. Full flat-band transmission occurs for a particular superposition of anisotropic and antisymmetric defect couplings. Further, we unveil a transparent mode of ferromagnetic magnons with a specific wave vector in a region of the defect's coupling parameter space, a feature absent for antiferromagnetic magnons.

DOI: 10.1103/PhysRevB.111.054401

### I. INTRODUCTION

The control of the magnetic properties of advanced materials is at the heart of promising new technologies aimed at supplying the growing demand for more efficient data storage and processing. Indeed, modern magnetism lies in at least two emerging research fields with similar proposals to deal with this quest. Spintronics [1,2] combines the properties of the electron's charge and spin to control the magnetic order using spin-polarized currents. On the other hand, magnonics [3–6] explores the control and propagation of magnons, the quasi-particle of spin waves, with a similar purpose. The second case examines wavelike phenomena [7] in the dispersion of the magnons along the material, such as the efficient transmission in engineered nanostructures [8–10]. The scientific community has witnessed an increasing research interest in the last decades in controlling the scattering process of spin waves along materials given the huge potential for applications in novel devices [8–17], engineered metamaterials [18–24], and spin-wave computing [25–28].

Spin-wave transport is strongly influenced by the presence of impurities, as well as by the interfaces between regions with distinct magnetic characteristics. Several configurations have been employed to investigate device proposals to control spin-wave dispersion effectively [5,6]. Magnonic crystals [3,4], for instance, are artificially structured magnetic materials in which the properties of magnons are controlled by a periodic variation in the magnetic properties, such as saturation magnetization or exchange stiffness [10,17,23,24]. They are analogous to photonic crystals in optics where the periodic structure leads to the formation of band gaps and the control of wave propagation.

The scattering of spin waves at impurities or interfaces is the underlying mechanism governing magnon transport. For instance, introducing defects on otherwise homogeneous

magnetic media breaks the translational symmetry and leads to the emergence of spin-wave localized modes [29]. In structured magnonic crystals such localized modes can appear within the band gap [11–13]. The effects of an inhomogeneous magnetic field in ferromagnetic films modify the amplitude and phase of the transmitted dipole-dominated spin wave. The localized field at an inhomogeneity acts as a barrier. Thus, the spin-wave propagation can be controlled by tuning the magnitude of the magnetic field [30–32]. Recent studies on thin ferromagnetic films explore different ways to induce local defects through anisotropic interactions including voltage-controlled magnetic anisotropy [15]. Indeed, surface defects in the form of roughness induce anisotropic inhomogeneities at the surfaces of the thin magnetic film. These surface defects couple to the spin-wave dynamics and directly affect the transmission and reflection mechanisms of magnons [16].

The effects of impurities in low-dimensional magnetic systems are worth mentioning, once quantum impurities produce fascinating many-body phenomena when incorporated into a host environment [33–38]. Recent works investigated the effect of impurities on the entanglement of quantum many-body systems [39,40], such as the entanglement localization on spin-1/2 XY chain induced by a single defect represented by a pinning field [41] and the quantum criticality in a typical quantum impurity spin-boson model coupled with a bath [42]. The spin-wave transmission along a one-dimensional (1D) ferromagnetic Heisenberg chain with random impurity segments was investigated several years ago [43], highlighting the possibility of reflectionless spin-wave transmission due to the absence of backscattering on finite impurity segments at specific resonant frequencies. More recently, the spin-wave transmission along an isotropic tubular ferromagnetic Heisenberg structure with spin impurities was investigated, showing the interferences between incident spin modes and the localized spin states of the substitution sites [44]. The role played

by an isolated magnetic impurity in quantum Heisenberg antiferromagnetic chains with integer [45–47] and half-integer [48] spins has also been explored with quite distinct features related to the gapped or nongapped nature of the magnetic excitations. Impurities have been shown to affect the heat conductivity of 2D ferromagnetic dielectrics [38]. The influence of impurities on the spin-wave spectrum of 2D antiferromagnetic and noncollinear magnets has also been addressed [33,34]. Most previous studies focused on spin-wave transmission through impurities consider the magnetic coupling on the defect region to be isotropic and symmetric. However, local crystal field anisotropies and spin-orbit coupling can result in anisotropic and antisymmetric interactions mediated by the defect [49,50] which can have a significant impact on the transmission characteristics.

In this paper, we investigate the stationary spin-wave scattering process in a system composed of two semi-infinite isotropic Heisenberg spin chains interconnected by a bond defect with an anisotropic XXZ interaction and an antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya contribution. Both cases of ferro- and antiferromagnetic magnons will be considered. Within a semiclassical approach, we will derive the transmission coefficient of incoming magnons and explore the influence of the defect coupling characteristics, contrasting the main features of the scattering of ferro- and antiferromagnetic magnons. In particular, we will show that the bond defect may become transparent under specific combinations of the physical parameters associated with the defect's anisotropy and antisymmetry character.

In the next section, we recall the main ideas involved in the semiclassical approach to studying ferro- and antiferromagnetic magnons. We also derive the corresponding transmission coefficient resulting from the stationary scattering by a bond defect. Section III presents and discusses the transmission spectra's main features. In Sec. IV, we summarize our key findings and end by outlining potential directions for future research.

## II. MODEL AND METHOD

### A. Magnons in ferro- and antiferromagnetic spin chains

We will study the stationary scattering of magnon excitations by a bond defect in an otherwise isotropic Heisenberg spin chain. Away from the defect, the coupling energy of a given dimensionless spin  $\vec{S}_p$  with their first neighbors is written as

$$E_p = -2J\vec{S}_p \cdot (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}), \quad (1)$$

where  $J$  is the isotropic exchange energy coupling along the side chains. Introducing the magnetic moment  $\vec{\mu}_p = -g\mu_B\vec{S}_p$ , where  $g$  is the gyromagnetic factor and  $\mu_B$  is the Bohr magneton, this coupling energy can be written in terms of the effective magnetic field felt by  $\vec{\mu}_p$  coming from the coupling with their neighbors as

$$E_p = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_p, \quad (2)$$

with  $\vec{B}_p = -2J(\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1})/g\mu_B$ . The Heisenberg equation of motion for  $\vec{S}_p$  can thus be written in terms of the

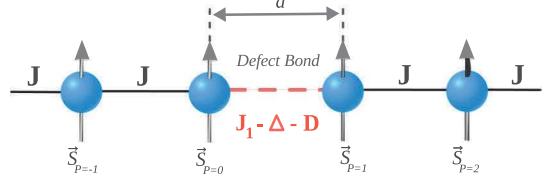


FIG. 1. Schematic representation of a ferromagnetic spin chain with a bond defect. The ferromagnetic exchange coupling along the side chains is  $J$ . The bond defect has a weaker exchange coupling  $J_1$  with a transversal anisotropy  $\Delta$  and antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya interaction  $D$ .  $a$  is the lattice spacing. All spins  $\vec{S}_p$  have the same orientation in the saturated ferromagnetic ground state.

effective torque acting on it,

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = \vec{\mu}_p \times \vec{B}_p. \quad (3)$$

The dispersion relation of magnon excitations can be derived within the semiclassical approximation where the spins are taken as classical vectors and only small spin deviations from the ground state are considered. This approach is particularly accurate for large  $S$  values. Here, we will recall the main steps of such a semiclassical approach that will later be used to study the stationary scattering problem.

In the case of a ferromagnetic chain ( $J > 0$ ), the ground state is fully saturated with all spins pointing in the same direction (see Fig. 1). Within this approach, we may consider the  $z$  components of all spins  $S^z = S$  in the ground state, with the excitation just giving rise to small transverse components that, according to the Heisenberg equation of motion, obey

$$\hbar \frac{dS_p^x}{dt} = 4SJS_p^y - 2SJ(S_{p-1}^y + S_{p+1}^y), \quad (4)$$

$$\hbar \frac{dS_p^y}{dt} = -4SJS_p^x + 2SJ(S_{p-1}^x + S_{p+1}^x). \quad (5)$$

These coupled motion equations can be solved by introducing the classical counterparts of spin-raising operators  $S_p^+ = S_p^x + iS_p^y$  whose motion equation is

$$\hbar \frac{dS_p^+}{dt} = -4iSJS_p^+ + 2iSJ(S_{p-1}^+ + S_{p+1}^+). \quad (6)$$

This last motion equation supports harmonic ferromagnetic magnon solutions  $S_p^+ = ue^{i(pka - \omega t)}$  where  $a$  is the spacing between neighboring sites,  $k$  is the wave vector of the harmonic excitation, and  $\omega$  its frequency with a dispersion relation

$$\hbar\omega = 4SJ[1 - \cos(ka)], \quad (7)$$

which is quadratic in the regime of low  $k$ , in agreement with the massive nature of ferromagnetic magnons. It is worth mentioning that the dispersion relation of ferromagnetic magnons derived from the semiclassical approach coincides with the exact dispersion relation when a full quantum mechanical solution is developed.

For the case of an antiferromagnetic chain ( $J < 0$ ), the semiclassical approach assumes the ground state to be Néel-like, having an alternate sequence of spins up and down (see Fig. 2). Here, we will consider the  $p$ th unit cell of this ground-state spin configuration composed of a pair of spins pointing

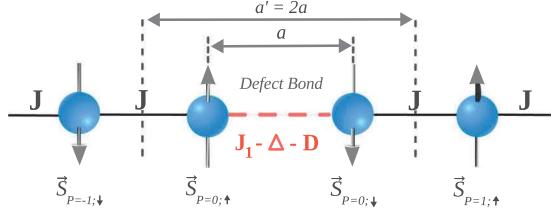


FIG. 2. Schematic representation of an antiferromagnetic spin chain with a bond defect. The ferromagnetic exchange coupling along the side chains is  $J$ . The bond defect has a weaker exchange coupling  $J_1$  with a transversal anisotropy  $\Delta$  and antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya interaction  $D$ .  $a$  is the lattice spacing. The spins have alternate orientations in the semiclassical Néel ground state.  $a' = 2a$  represents the unit cell of such spin configuration.

in opposite directions  $S_{p,\uparrow}^z = S$  and  $S_{p,\downarrow}^z = -S$ . The transverse components of these two spins obey distinct motion equations, given by

$$\hbar \frac{dS_{p,\uparrow}^x}{dt} = -4SJS_{p,\uparrow}^y - 2SJ(S_{p,\downarrow}^y + S_{p-1,\downarrow}^y), \quad (8)$$

$$\hbar \frac{dS_{p,\uparrow}^y}{dt} = 4SJS_{p,\uparrow}^x + 2SJ(S_{p,\downarrow}^x + S_{p-1,\downarrow}^x), \quad (9)$$

$$\hbar \frac{dS_{p,\downarrow}^x}{dt} = 4SJS_{p,\downarrow}^y + 2SJ(S_{p+1,\uparrow}^y + S_{p,\uparrow}^y), \quad (10)$$

$$\hbar \frac{dS_{p,\downarrow}^y}{dt} = -4SJS_{p,\downarrow}^x - 2SJ(S_{p+1,\uparrow}^x + S_{p,\uparrow}^x). \quad (11)$$

The introduction of the spin-raising variables allows us to reduce this set of motion equations to a pair of coupled equations in the form

$$\hbar \frac{dS_{p,\uparrow}^+}{dt} = 4SJS_{p,\uparrow}^+ + 2iSJ(S_{p,\downarrow}^+ + S_{p-1,\downarrow}^+), \quad (12)$$

$$\hbar \frac{dS_{p,\downarrow}^+}{dt} = -4iSJS_{p,\downarrow}^+ - 2iSJ(S_{p,\uparrow}^+ + S_{p+1,\uparrow}^+). \quad (13)$$

This set of equations also supports harmonic antiferromagnetic magnon solutions but with different amplitudes in the sublattices with up and down spins,  $S_{p,\uparrow}^+ = ue^{i(pka'-\omega t)}$  and  $S_{p,\downarrow}^+ = ve^{i(pka'-\omega t)}$ , where  $a' = 2a$ . A straightforward algebra provides the dispersion relation

$$\hbar\omega = |4SJ \sin(ka'/2)|, \quad (14)$$

which is linear for low  $k$  due to the massless character of antiferromagnetic magnons. The ratio between the wave amplitudes in the two sublattices results in

$$f = v/u = -\frac{2[1 - |\sin(ka'/2)|]}{1 + e^{-ika'}}. \quad (15)$$

### B. Scattering of ferromagnetic magnons by a bond defect

Here, we will consider the stationary scattering solution of ferromagnetic magnons by a bond defect with an anisotropic exchange coupling and an antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Considering this defect bond to be between sites  $p = 0$  and  $p = 1$ , their interaction energy is

written as

$$E_{0,1} = -2J_1[S_0^z S_1^z + \Delta(S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y)] - D(\vec{S}_0 \times \vec{S}_1)_z, \quad (16)$$

where  $J_1$  is the defect's exchange coupling along the  $z$  axis,  $\Delta$  is the exchange anisotropy factor of transversal couplings, and  $D$  is the Dzyaloshinskii-Moriya coupling energy. The Heisenberg motion equations of the transversal components of the spins coupled by the defect bond are modified accordingly, and are given by

$$\begin{aligned} \hbar \frac{dS_0^+}{dt} &= -2iS(J + J_1)S_0^+ + 2iSJS_1^+ \\ &\quad + (2iSJ_1\Delta + SD)S_1^+, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \hbar \frac{dS_1^+}{dt} &= -2iS(J + J_1)S_1^+ + 2iSJS_2^+ \\ &\quad + (2iSJ_1\Delta - SD)S_0^+. \end{aligned} \quad (18)$$

In the stationary scattering approach, a harmonic wave of amplitude  $I$  coming from the left side of the defect is partially reflected with amplitude  $R$  and partially transmitted with amplitude  $T$ . Therefore, the wave solutions on the left and right sides of the defect have the form

$$S_p^+ = I e^{i(pka - \omega t)} + R e^{i(-ka - \omega t)} \quad (p \leq 0), \quad (19)$$

$$S_p^+ = T e^{i(pka - \omega t)} \quad (p \geq 1). \quad (20)$$

With the above assumption, the motion equations for the raising spin operators at the sites connected by the defect can be used to obtain the transmission and reflection amplitudes. These can be derived from the matrix equation

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} I, \quad (21)$$

where

$$a_{11} = (2iSJ_1\Delta + SD)e^{ika}, \quad (22)$$

$$a_{12} = 2iSJe^{ika} - 2iS(J + J_1) + i\hbar\omega, \quad (23)$$

$$a_{21} = 2iSJe^{2ika} - 2iS(J + J_1)e^{ika} + i\hbar\omega e^{ika}, \quad (24)$$

$$a_{22} = 2iSJ_1\Delta - SD, \quad (25)$$

$$b_1 = 2iS(J + J_1) - 2iSJe^{-ika} - \hbar\omega i, \quad (26)$$

$$b_2 = -(2iSJ_1\Delta - SD), \quad (27)$$

from which one obtains the transmission ( $t_F = |T/I|^2$ ) and reflection ( $r_F = |R/I|^2$ ) coefficients of ferromagnetic magnons scattered by the defect bond. The linearity and Hermiticity of the Hamiltonian implies the conservation rule  $t_F + r_F = 1$ .

### C. Scattering of antiferromagnetic magnons by a bond defect

The above approach can be extended to study the scattering of antiferromagnetic magnons by a similar bond defect. Here, we will consider the bond defect between the two spins at cell  $p = 0$ , having opposite spin orientations in the ground state.

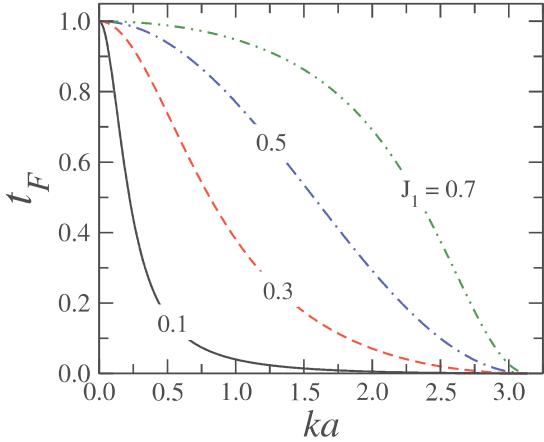


FIG. 3. Transmission spectra of ferromagnetic magnons  $t_F$  incident on an isotropic ( $\Delta = 1$ ) and symmetric ( $D = 0$ ) bond defect with distinct values of the exchange coupling  $J_1$ . Energies are in units of the exchange coupling  $J$  along the side chains. Quasiuniform modes with  $ka \ll 1$  are weakly affected by the defect bond and almost fully transmitted. The transmission coefficient decreases when the defect coupling is weakened, vanishing in the limits of  $J_1 \rightarrow 0$  and  $ka \rightarrow \pi$ . For antiferromagnetic magnons one has  $t_A(ka') = t_F(ka)$ .

The semiclassical motion equation for the corresponding raising operators can be written as

$$\hbar \frac{dS_{0,\uparrow}^+}{dt} = 2iS(J + J_1)S_{0,\uparrow}^+ + 2iSJS_{-1,\downarrow}^+ + (2iSJ_1\Delta + SD)S_{0,\downarrow}^+, \quad (28)$$

$$\hbar \frac{dS_{0,\downarrow}^+}{dt} = -2iS(J + J_1)S_{0,\downarrow}^+ - 2iSJS_{1,\uparrow}^+ - (2iSJ_1\Delta - SD)S_{0,\uparrow}^+. \quad (29)$$

The stationary scattering solution at all sites to the left of the defect bond includes incoming and reflected waves with different amplitudes at the up and down sublattices,

$$S_{p,\uparrow}^+ = I_{\uparrow} e^{i(pka' - \omega t)} + R_{\uparrow} e^{i(-pka' - \omega t)}, \quad (30)$$

$$S_{p,\downarrow}^+ = I_{\downarrow} e^{i(pka' - \omega t)} + R_{\downarrow} e^{i(-pka' - \omega t)}, \quad (31)$$

with  $I_{\downarrow}/I_{\uparrow} = (R_{\downarrow}/R_{\uparrow})^* = f$  [see Eq. (15)]. To the right side of the defect bond, there is a transmitted wave with distinct amplitudes at the up and down sublattices with ratio  $T_{\downarrow}/T_{\uparrow} = f$ . The stationary scattering solution can also be put in matrix form

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{\uparrow} \\ R_{\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} I_{\uparrow}, \quad (32)$$

where

$$c_{11} = (2iSJ_1\Delta + SD)f, \quad (33)$$

$$c_{12} = 2iSJ e^{ika'} f^* + 2iS(J + J_1) + i\hbar\omega, \quad (34)$$

$$c_{21} = -2iSJ e^{ika'} - 2iS(J + J_1)f + i\hbar\omega f, \quad (35)$$

$$c_{22} = -(2iSJ_1\Delta - SD), \quad (36)$$

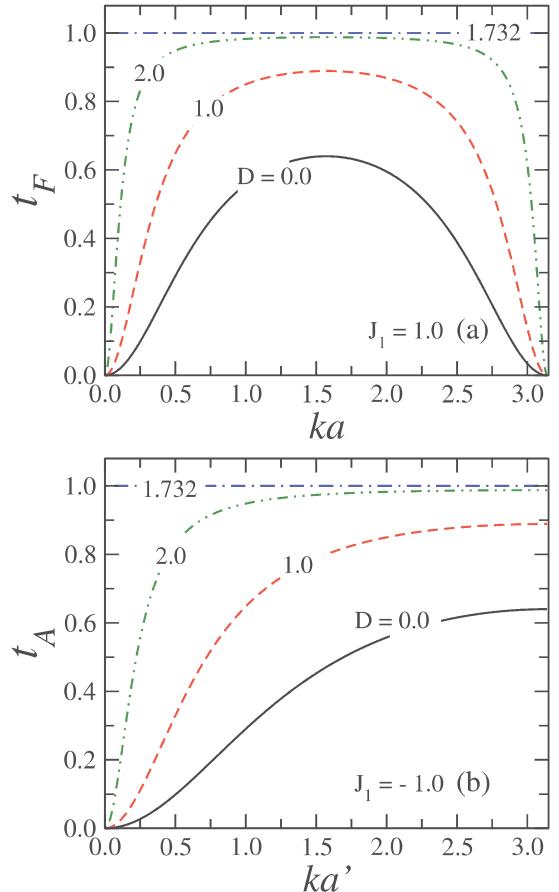


FIG. 4. (a) Transmission spectra of ferromagnetic magnons ( $J = 1$ ) by a defect with  $J_1 = 1$  for anisotropy  $\Delta = 0.5$  and distinct values of the antisymmetry  $D$ . The spectrum is symmetric [ $t_F(ka) = t_F(\pi - ka)$ ] with null transmission at  $ka = 0$  and  $ka = \pi$ . A non-monotonic behavior develops when antisymmetry is superposed to an anisotropic defect coupling. Full flat-band transmission occurs for  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$ . (b) Transmission spectra of antiferromagnetic magnons ( $J = -1$ ). Here,  $t_A(ka') = t_F(ka/2)$  with maximum transmission at  $ka' = \pi$ .

$$d_1 = -2iS(J + J_1) - 2iSJ f e^{-ika} - \hbar\omega i, \quad (37)$$

$$d_2 = 2iSJ_1\Delta - SD, \quad (38)$$

from which the transmission ( $t_A = |T_{\downarrow}/I_{\uparrow}|^2$ ) and reflection ( $r_A = |R_{\downarrow}/I_{\uparrow}|^2$ ) coefficients of antiferromagnetic magnons can be directly extracted (also with  $t_A + r_A = 1$ ).

### III. RESULTS AND DISCUSSION

In this section, we will consider units of  $|J| = S = 1$  without loss of generality. We start by considering the case of an isotropic ( $\Delta = 1$ ) and symmetric defect ( $\Delta = 0$ ). Thus, the defect bond has an isotropic exchange coupling that differs from the coupling on the side chains. We will restrict our analysis to a weaker coupling at the defect bond. Figure 3 shows the spectral characteristics of the transmission coefficient of ferromagnetic magnons for distinct values of the defect coupling  $J_1$ . Antiferromagnetic

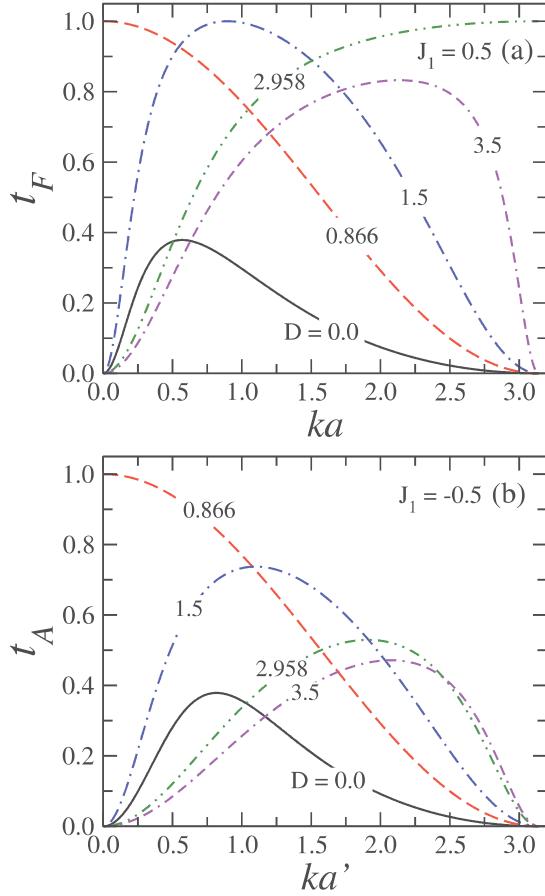


FIG. 5. (a) Transmission spectra of ferromagnetic magnons ( $J = 1$ ) for a bond defect with  $J_1 = 0.5$  and  $\Delta = 0.5$  for some values of the antisymmetry parameter  $D$ . A fully transmitted (transparent) mode is supported in the interval  $\sqrt{3}/2 = 0.866 \dots < D < \sqrt{35}/2 = 2.958 \dots$  (see main text). (b) The corresponding transmission spectra of antiferromagnetic magnons ( $J = -1$ ). Although there is still a nonmonotonic dependence on the antisymmetry degree, no transparent antiferromagnetic mode with a finite wave vector is supported.

magnons depict the same transmission spectra in this case, i.e.,  $t_A(ka', |J_1|, \Delta = 1, D = 0) = t_F(ka, J_1, \Delta = 1, D = 0)$ . Quasiuniform modes with  $ka \ll 1$  are weakly affected by an isotropic symmetric defect and become almost fully transmitted. The transmission degrades for modes with smaller wavelengths (larger wave vectors), vanishing for  $ka = \pi$ . Also, it decreases when the defect coupling is weakened, vanishing in the limit of  $J_1 \rightarrow 0$  for which the side chains become decoupled.

To split out the role played by the anisotropy and antisymmetry in the scattering process, we also considered the case of  $J_1 = J$  (see Fig. 4). Ferromagnetic magnons are strongly scattered in both limits of  $ka \rightarrow 0$  and  $ka \rightarrow \pi$ , depicting the symmetry  $t_F(ka) = t_F(\pi - ka)$ . A nonmonotonic behavior develops when antisymmetry is introduced in an anisotropic defect. It initially improves the transmission for small degrees of antisymmetry, before leading to smaller transmission levels. Full flat-band transmission takes place for  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2}$ , a condition that can be directly derived from Eqs. (21)–(27) assuming  $R = 0$

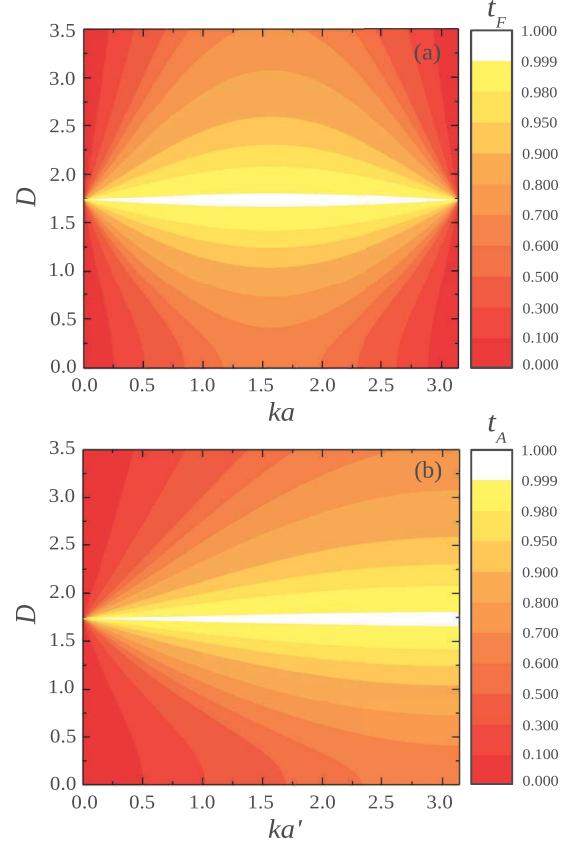


FIG. 6. Density plot of the transmission of (a) ferromagnetic ( $J = 1$ ) and (b) antiferromagnetic ( $J = -1$ ) magnons in the  $k \times D$  parameter space for a bond defect with  $\Delta = 0.5$  and  $|J_1| = 1.0$ . Notice the full flat-band transmission at  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$ .

for all wave vectors. The transmission of antiferromagnetic magnons for  $J_1 = J$  satisfies  $t_A(ka', J_1 = -1, \Delta, D) = t_F(ka/2, J_1 = 1, \Delta, D)$ . Accordingly, the maximum transmission of antiferromagnetic magnons is at  $ka' = \pi$ , with similar nonmonotonic behavior and full flat-band transmission developing when both anisotropy and antisymmetry are considered.

The case of a bond defect having an anisotropic and antisymmetric coupling but with a weaker exchange coupling  $J_1$  as compared with the coupling along the side chains is illustrated in Fig. 5 for the particular case of  $|J_1| = 0.5$  and  $\Delta = 0.5$ . The transmission spectrum also has a nonmonotonic dependence on the degree of antisymmetry. However, new features emerge. No flat-band transparency occurs for any combination of the defect's physical parameters. Ferromagnetic magnons depict a single transparent mode for  $4J_1^2 < D^2 + 4(J_1\Delta)^2 < 4(2J - J_1)^2$ . For the particular parameters used in Fig. 5, this transparent mode appears for antisymmetry degrees in the interval  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$ , as evidenced in Fig. 5(a). The wave vector of the transparent mode can be determined from the set of Eqs. (21)–(27) and it is given by

$$\cos ka = \frac{4J^2 + 4(J - J_1)^2 - D^2 - 4(J_1\Delta)^2}{8J(J - J_1)}. \quad (39)$$

The corresponding transmission spectrum for antiferromagnetic magnons is shown in Fig. 5(b). The uniform solution

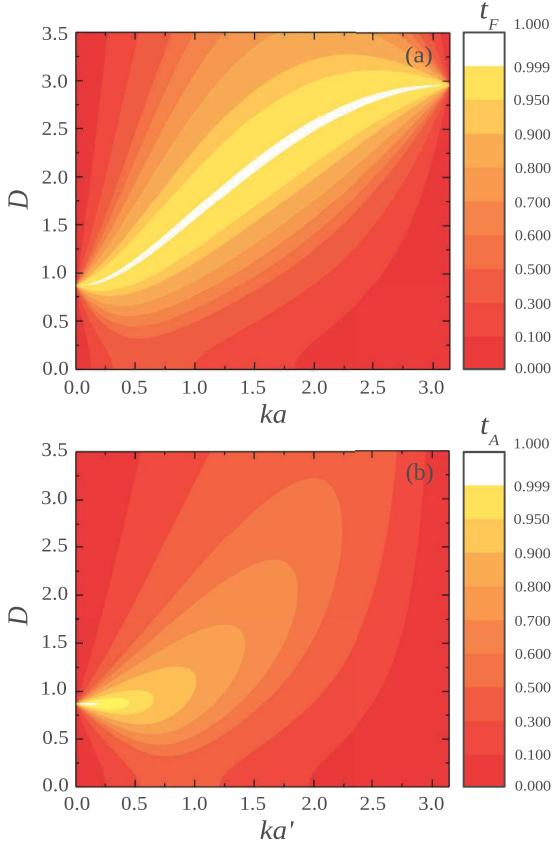


FIG. 7. Density plot of the transmission of (a) ferromagnetic ( $J = 1$ ) and (b) antiferromagnetic ( $J = -1$ ) magnons in the  $k \times D$  parameter space for a bond defect with  $\Delta = 0.5$  and  $|J_1| = 0.5$ . In ferromagnetic chains, a transparent mode survives with the wave vector changing with the degree of antisymmetry in the interval  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$  (see main text for details). Only the uniform mode with  $k = 0$  remains transparent in antiferromagnetic chains for  $D = \sqrt{3}/2$ .

with  $ka' = 0$  is fully transmitted for  $D^2 + 4(J_1\Delta)^2 = 4J_1^2$  ( $D = \sqrt{3}/2$  for  $J_1 = 0.5$  and  $\Delta = 0.5$ ). Contrasting to the case of ferromagnetic magnons, there is no range of antisymmetry degree for which a transparent mode of antiferromagnetic magnons with a finite wave vector is supported.

The following density plots provide a detailed view of the transmission coefficient's main spectral characteristics. In Fig. 6, we focus on the case of  $J_1/J = 1$  and a particular value of the anisotropy parameter  $\Delta = 0.5$ . The full transparency at  $D = 2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}$  is signaled by a full flat-band transmission for both cases of ferromagnetic and antiferromagnetic magnons. Such flat-band behavior is broken when the defect's exchange coupling  $J_1$  differs from that in the side chains, as illustrated in Fig. 7. A transparent mode survives with a wave vector that changes with the degree of antisymmetry in the interval  $\sqrt{3}/2 < D < \sqrt{35}/2$ , as discussed above. Only the uniform mode with  $k = 0$  remains transparent in antiferromagnetic chains for  $D = \sqrt{3}/2$ .

The role played by the degree of antisymmetry  $D$  of the coupling between the side chains is evidenced in the following density plots. In Fig. 8, we report the transmission

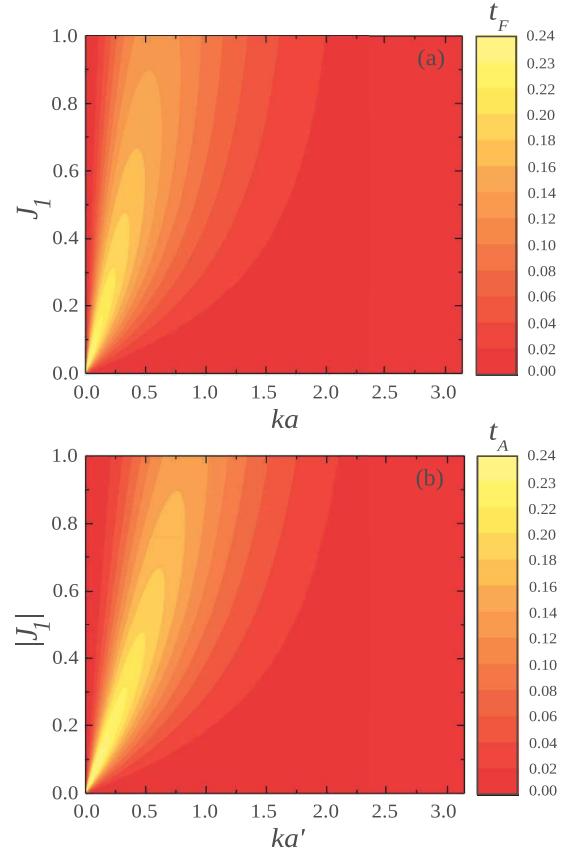


FIG. 8. Density plot of the transmission of (a) ferromagnetic ( $J = 1$ ) and (b) antiferromagnetic ( $J = -1$ ) magnons in the  $k \times J_1$  parameter space for an anisotropic symmetric defect bond with  $\Delta = 0.5$  and  $D = 0.0$ . There is no transparent mode either of ferromagnetic or antiferromagnetic magnons for a symmetric defect ( $D = 0$ ).

coefficient as a function of  $k$  and  $J_1$  for a symmetric ( $D = 0$ ) and anisotropic ( $\Delta = 0.5$ ) defect coupling. There is no transparent mode of either ferromagnetic or antiferromagnetic magnons. The corresponding transmission coefficient for an antisymmetric anisotropic defect coupling with  $D = 1$  and  $\Delta = 0.5$  is shown in Fig. 9. Notice the emergence of transparent ferromagnetic magnons in a finite range of small wave vectors [ $\cos ka < (8 - D^2)/8$ , in agreement with Eq. (39)]. The uniform mode is transparent for  $J_1 = D/2\sqrt{1 - \Delta^2}$ . No transparent mode exists above this value of the defect's exchange coupling. The uniform mode is the only one that remains transparent for antiferromagnetic magnons.

#### IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In summary, we studied the stationary scattering of ferromagnetic and antiferromagnetic one-dimensional magnons by a bond defect connecting two side chains with isotropic first-neighbor Heisenberg exchange coupling  $J$ . The defect bond is considered to have an anisotropic XXZ exchange coupling, characterized by a weaker  $z$ -component exchange coupling  $J_1$  and anisotropy degree  $\Delta$ , as well as an antisymmetric Dzyaloshinskii-Moriya interaction  $D$ .

Within a semiclassical description of the spin dynamics, we analytically computed the transmission spectrum of magnons

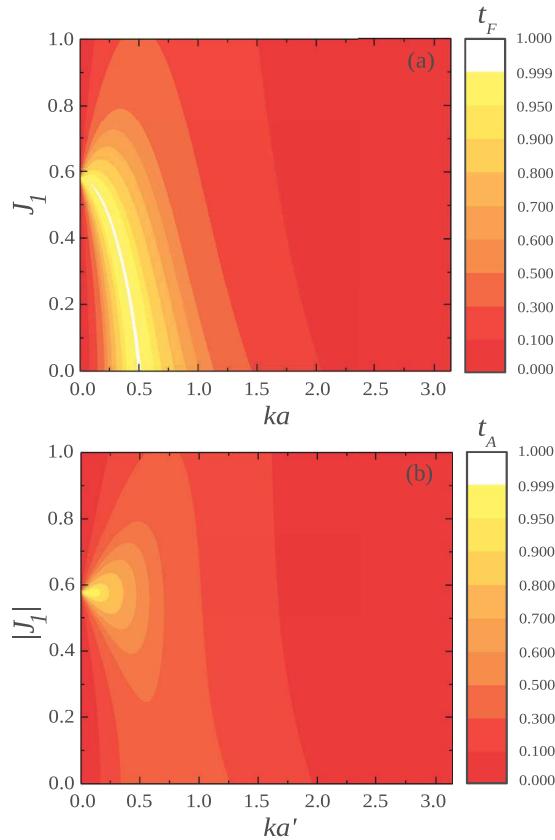


FIG. 9. Density plot of the transmission of (a) ferromagnetic ( $J = 1$ ) and (b) antiferromagnetic ( $J = -1$ ) magnons in the  $k \times J_1$  parameter space for an anisotropic symmetric defect bond with  $\Delta = 0.5$  and  $D = 1.0$ . There is a transparent mode of ferromagnetic magnons of small wave vectors. The uniform mode is transparent for  $J_1 = D/2\sqrt{1 - \Delta^2} = \sqrt{3}/3$ . For smaller values of  $J_1$ , the transparent mode is displaced for finite wave vectors up to  $\cos ka = (8 - D^2)/8 = 7/8$  ( $ka = 0.505 \dots$ ). There is no transparent mode with a larger wave vector. Only the uniform mode of antiferromagnetic magnons is transparent.

of wave vector  $k$  and frequency  $\omega$  for both cases of ferro- and antiferromagnetic side chains. For the case of an isotropic ( $\Delta = 1$ ) and symmetric ( $D = 0$ ) defect, the transmissions of ferromagnetic and antiferromagnetic magnons are similarly degraded as the exchange coupling at the defect bond decreases, as expected. The transmission spectrum has a non-monotonic dependence on the degree of antisymmetry for an

anisotropic bond defect. In the case of  $J_1 = J$ , full flat-band transmission of ferro- and antiferromagnetic magnons can occur. The condition for the full transparency of the defect bond is  $D^2 + 4(J\Delta)^2 = 4J^2$ . In the general case of  $J_1/J < 1$ , a single mode of ferromagnetic magnons with a finite wave vector is fully transmitted when the defect's physical parameters satisfy  $4J_1^2 < D^2 + 4(J_1\Delta)^2 < 4(2J - J_1)^2$ , a feature not presented by antiferromagnetic magnons.

It is possible to consider the transmission spectra of spin systems with different side chains and coupling architectures by expanding the current semiclassical stationary scattering solution. Indeed, the semiclassical approach can be implemented for higher-dimensional lattices [51,52]. A natural extension is to study the scattering of magnons by a line defect on 2D magnetic structures, seeking conditions for reaching omnidirectional reflectionless modes and flat-band transmission [23]. It is worth stressing that modes that are fully transmitted by a single impurity in 1D or by a line defect in 2D magnetic systems will not be scattered by periodic or random distributions of such impurities, opening the way to study the stationary magnon scattering in magnonic 1D crystals combining the present approach with standard transfer matrix techniques. Another perspective is, for example, to study the possibility of nonreciprocal transmission through non-Hermitian defects, a desired characteristic of spin-wave-based diodelike devices. Configurations with multiple interconnected spin chains can operate as spin-wave logic gates, with specific functions being controlled by the coupling parameters. The analysis of the transmission spectrum of interconnected spin chains can thus provide important insights into the operation and engineering of several kinds of magnonic devices capable of performing typical operations in analog and digital data processing systems.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work was financially supported by CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), and FAPEAL (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas, Grants No. E:60030.0000001730/2022 and No. E:60030.0000001635/2022). L.M.V. acknowledges the support of Donostia International Physics Center, the Basque Government, and iKur estrategia. M.L.L. acknowledges the hospitality of the International Center of Physics of Universidade de Brasília - UNB where part of this work was written.

- 
- [1] A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, and B. Hillebrands, Review on spintronics: Principles and device applications, *J. Magn. Magn. Mater.* **509**, 166711 (2020).
- [2] C. Shang, L. Fu, S. Zhou, and J. Zhao, Atomic wires of transition metal chalcogenides: A family of 1D materials for flexible electronics and spintronics, *JACS Au* **1**, 147 (2021).
- [3] V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov, and D. Grundler, Magnonics, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 260301 (2010).
- [4] B. Lenk, H. Ulrichs, F. Garbs, and M. Münzenberg, The building blocks of magnonics, *Phys. Rep.* **507**, 107 (2011).
- [5] B. Flebus, D. Grundler, B. Rana, Y. Otani, I. Barsukov, A. Barman, G. Gubbiotti, P. Landeros, J. Akerman, U. Ebels, P. Pirro, V. E. Demidov, K. Schultheiss, G. Csaba, Q. Wang, F. Ciubotaru, D. E. Nikonov, P. Che, R. Hertel, T. Ono *et al.*, The 2024 magnonics roadmap, *J. Phys.: Condens. Matter* **36**, 363501 (2024).
- [6] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, Magnon spintronics, *Nat. Phys.* **11**, 453 (2015).

- [7] D. Hennig and G. P. Tsironis, Wave transmission in nonlinear lattices, *Phys. Rep.* **307**, 333 (1999).
- [8] J. Vasseur, A. Akjouj, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, and E. E. Boudouti, Photon, electron, magnon, phonon and plasmon mono-mode circuits, *Surf. Sci. Rep.* **54**, 1 (2004).
- [9] S. Neusser and D. Grundler, Magnonics: Spin waves on the nanoscale, *Adv. Mater.* **21**, 2927 (2009).
- [10] A. V. Chumak, P. Pirro, A. A. Serga, M. P. Kostylev, R. L. Stamps, H. Schultheiss, K. Vogt, S. J. Hermsdoerfer, B. Laegel, P. A. Beck, and B. Hillebrands, Spin-wave propagation in a microstructured magnonic crystal, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 262508 (2009).
- [11] S. Nikitov, P. Tailhades, and C. Tsai, Spin waves in periodic magnetic structures—magnonic crystals, *J. Magn. Magn. Mater.* **236**, 320 (2001).
- [12] A. Kuchko, M. Sokolovskii, and V. Kruglyak, Spin wave spectrum of a magnonic crystal with an internally structured defect, *Phys. B: Condens. Matter* **370**, 73 (2005).
- [13] V. V. Kruglyak, M. L. Sokolovskii, V. S. Tkachenko, and A. N. Kuchko, Spin-wave spectrum of a magnonic crystal with an isolated defect, *J. Appl. Phys.* **99**, 08C906 (2006).
- [14] J. Chen, H. Yu, and G. Gubbiotti, Unidirectional spin-wave propagation and devices, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55**, 123001 (2021).
- [15] R. Verba, V. Tiberkevich, and A. Slavin, Spin-wave transmission through an internal boundary: Beyond the scalar approximation, *Phys. Rev. B* **101**, 144430 (2020).
- [16] M. Mohseni, B. Hillebrands, P. Pirro, and M. Kostylev, Controlling the propagation of dipole-exchange spin waves using local inhomogeneity of the anisotropy, *Phys. Rev. B* **102**, 014445 (2020).
- [17] G. Park, J. Yang, and S.-K. Kim, Recursive evolution of spin-wave multiplets in magnonic crystals of antidot-lattice fractals, *Sci. Rep.* **11**, 22604 (2021).
- [18] H. Ghaemi-Dizicheh and H. Schomerus, Compatibility of transport effects in non-Hermitian nonreciprocal system, *Phys. Rev. A* **104**, 023515 (2021).
- [19] H. Wang, J. Chen, T. Yu, C. Liu, C. Guo, S. Liu, K. Shen, H. Jia, T. Liu, J. Zhang, M. A. Cabero, Q. Song, S. Tu, M. Wu, X. Han, K. Xia, D. Yu, G. E. W. Bauer, and H. Yu, Nonreciprocal coherent coupling of nanomagnets by exchange spin waves, *Nano Res.* **14**, 2133 (2021).
- [20] K. Szulc, P. Graczyk, M. Mruczkiewicz, G. Gubbiotti, and M. Krawczyk, Spin-wave diode and circulator based on unidirectional coupling, *Phys. Rev. Appl.* **14**, 034063 (2020).
- [21] J. Lan, W. Yu, R. Wu, and J. Xiao, Spin-wave diode, *Phys. Rev. X* **5**, 041049 (2015).
- [22] K. Nakata and K. Suzuki, Non-Hermitian Casimir effect of magnons, *npj Spintronics* **2**, 11 (2024).
- [23] J. Flores-Farías, R. A. Gallardo, F. Brevis, A. Roldán-Molina, D. Cortés-Ortuño, and P. Landeros, Omnidirectional flat bands in chiral magnonic crystals, *Sci. Rep.* **12**, 17831 (2022).
- [24] P. Frey, A. A. Nikitin, D. A. Bozhko, S. A. Bunyaev, G. N. Kakazei, A. B. Ustinov, B. A. Kalinikos, F. Ciubotaru, A. V. Chumak, Q. Wang, V. S. Tiberkevich, B. Hillebrands, and A. A. Serga, Reflection-less width-modulated magnonic crystal, *Commun. Phys.* **3**, 17 (2020).
- [25] G. Csaba, Á. Papp, and W. Porod, Perspectives of using spin waves for computing and signal processing, *Phys. Lett. A* **381**, 1471 (2017).
- [26] A. Mahmoud, F. Ciubotaru, F. Vanderveken, A. V. Chumak, S. Hamdioui, C. Adelmann, and S. Cotofana, Introduction to spin wave computing, *J. Appl. Phys.* **128**, 161101 (2020).
- [27] A. V. Chumak, P. Kabos, M. Wu, C. Abert, C. Adelmann, A. O. Adeyeye, J. Åkerman, F. G. Aliev, A. Anane, A. Awad, C. H. Back, A. Barman, G. E. W. Bauer, M. Becherer, E. N. Beginin, V. A. S. V. Bittencourt, Y. M. Blanter, P. Bortolotti, I. Boventer, D. A. Bozhko, S. A. Bunyaev *et al.*, Advances in magnetics roadmap on spin-wave computing, *IEEE Trans. Magn.* **58**, 6 (2022).
- [28] M. Kohda, T. Seki, Y. Yuminaka, T. Uemura, K. Kikuchi, and G. Salis, Perspective on spin-based wave-parallel computing, *Appl. Phys. Lett.* **123**, 190502 (2023).
- [29] Y. Tsuchida, Localized spin wave state in a one-dimensional Heisenberg ferromagnet with a boundary and impurity spins, *Prog. Theor. Phys.* **55**, 10 (1976).
- [30] M. P. Kostylev, A. A. Serga, T. Schneider, T. Neumann, B. Leven, B. Hillebrands, and R. L. Stamps, Resonant and nonresonant scattering of dipole-dominated spin waves from a region of inhomogeneous magnetic field in a ferromagnetic film, *Phys. Rev. B* **76**, 184419 (2007).
- [31] T. Neumann, A. A. Serga, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, Frequency-dependent reflection of spin waves from a magnetic inhomogeneity induced by a surface direct current, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 042503 (2009).
- [32] S. O. Demokritov, A. A. Serga, A. André, V. E. Demidov, M. P. Kostylev, B. Hillebrands, and A. N. Slavin, Tunneling of dipolar spin waves through a region of inhomogeneous magnetic field, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 047201 (2004).
- [33] W. Brenig and A. P. Kampf, Spin excitations in a quantum antiferromagnet with magnetic impurities and vacancies, *Phys. Rev. B* **43**, 12914 (1991).
- [34] W. Brenig and A. L. Chernyshev, Highly dispersive scattering from defects in noncollinear magnets, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 157203 (2013).
- [35] S. Rommer and S. Eggert, Spin- and charge-density oscillations in spin chains and quantum wires, *Phys. Rev. B* **62**, 4370 (2000).
- [36] G. Barcza, K. Bauerbach, F. Eickhoff, F. B. Anders, F. Gebhard, and O. Legeza, Symmetric single-impurity Kondo model on a tight-binding chain: Comparison of analytical and numerical ground-state approaches, *Phys. Rev. B* **101**, 075132 (2020).
- [37] M. Brenes, E. Mascarenhas, M. Rigol, and J. Goold, High-temperature coherent transport in the XXZ chain in the presence of an impurity, *Phys. Rev. B* **98**, 235128 (2018).
- [38] V. G. Bar'yakhtar and G. I. Urushadze, The scattering of spin waves and phonons by impurities in ferromagnetic dielectrics, *Sov. Phys. JETP* **12**, 251 (1961).
- [39] E. S. Sørensen, M.-S. Chang, N. Laflorencie, and I. Affleck, Quantum impurity entanglement, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* (2007) P08003.
- [40] I. Affleck, N. Laflorencie, and E. S. Sørensen, Entanglement entropy in quantum impurity systems and systems with boundaries, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504009 (2009).
- [41] T. J. G. Apollaro and F. Plastina, Entanglement localization by a single defect in a spin chain, *Phys. Rev. A* **74**, 062316 (2006).
- [42] K. Le Hur, P. Doucet-Beaupré, and W. Hofstetter, Entanglement and criticality in quantum impurity systems, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 126801 (2007).

- [43] S. N. Evangelou, A. Z. Wang, and S. J. Xiong, Reflectionless spin waves in Heisenberg chains with spin impurity segments, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 4937 (1994).
- [44] B. Bourahla, O. Nafa, and A. Khater, Spin wave transmission by spin impurities in a quasi-1D Heisenberg ferromagnetic tubular structure, *J. Supercond. Novel Magn.* **28**, 1843 (2015).
- [45] T. Kennedy, Exact diagonalization of open spin-1 chains, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 5737 (1990).
- [46] I. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin, and J. P. Rensrd, Observation of  $S = 1/2$  degrees of freedom in an  $S = 1$  linear-chain Heisenberg antiferromagnet, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3181 (1990).
- [47] S. H. Glarum, S. Geschwind, K. M. Lee, M. L. Kaplan, and J. Michel, Observation of fractional spin  $S = 1/2$  on open ends of  $S = 1$  linear antiferromagnetic chains: Nonmagnetic doping, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1614 (1991).
- [48] S. Eggert and I. Affleck, Magnetic impurities in half-integer-spin Heisenberg antiferromagnetic chains, *Phys. Rev. B* **46**, 10866 (1992).
- [49] I. E. Dzyaloshinskii, Thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism in antiferromagnetic substances, *Sov. Phys. JETP* **5**, 1259 (1957).
- [50] T. Moriya, New mechanism of anisotropic superexchange interaction, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 228 (1960).
- [51] S. M. Rezende, Spin waves in ferromagnets: Semiclassical approach, in *Fundamentals of Magnonics*, Lecture Notes in Physics Vol. 969 (Springer, Cham, 2020), pp. 31–70.
- [52] G.-W. Chern, K. Barros, Z. Wang, H. Suwa, and C. D. Batista, Semiclassical dynamics of spin density waves, *Phys. Rev. B* **97**, 035120 (2018).