

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Excitações de 1 e 2 Mágns
em Cadeias Desordenadas:
Aspectos Estáticos e Dinâmicos

ELTON MALTA NASCIMENTO

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Excitações de 1 e 2 Mágns
em Cadeias Desordenadas:
Aspectos Estáticos e Dinâmicos

ELTON MALTA NASCIMENTO

Tese apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal de Alagoas como parte
dos créditos para a obtenção do
título de Mestre em Ciências.

Orientador: Dr. Marcelo Leite Lyra

Co-orientador: Dr. Francisco Anacleto B. Fidelis de Moura

Maceió - Alagoas - Brasil

Julho - 2005

Departamento de Física - UFAL

Dedico este trabalho a todos os
meus ex-professores, peças fundamentais
na minha formação e opção profissional.

AGRADECIMENTOS

Durante a jornada que passei até chegar aqui pude contar com a ajuda, o apoio, o companheirismo e a orientação de muitas pessoas que certamente são parte desse trabalho. Gostaria de aproveitar estas páginas para expressar minha gratidão a todos em geral, mas devido ao espaço limitado, vou me restringir a algumas em especial:

Aos meus pais, Elson A. Nascimento e Maria M. Nascimento, e aos meus irmãos, Luciana M. Nascimento e Marcus M. Nascimento, que inquestionavelmente me apoiaram nessa nova vida, ajudando, e muito, a superar as dificuldades que se enfrenta quando se decide morar em outra cidade.

Ao meu orientador prof. Dr. Marcelo Lyra, principal responsável pela minha vinda a Maceió e obtenção deste título de Mestre. Sou eternamente grato por isso. O convívio com o Prof. Lyra me fez crescer muito como profissional, pois além de um notável físico, sua conduta como orientador e professor é modelo para as futuras gerações.

Ao meu co-orientador Prof. Francisco Fidelis, que além da astronômica ajuda na realização deste trabalho e das intermináveis dúvidas que ele pacientemente ajudou-me a solucionar nos problemas computacionais e teóricos, foi um grande companheiro aqui no DF. Sem dúvidas, devo grande parte da minha satisfação para com o DF ao prof. Fidelis.

Ao prof. Antônio Delson C. de Jesus, do Departamento de Física da Universidade Estadual de Feira de Santana. Tive o privilégio de ter sido seu aluno de iniciação científica, o ponto inicial do que hoje se transformou neste trabalho de mestrado. Juntamente com o prof. Marcelo Lyra, o prof. Delson foi fundamental para minha

vinda a UFAL, sempre apostando em meu potencial mais até mesmo que eu próprio. Não posso deixar de mencinoar todas as grandes amizades que deixei na Bahia e que, apesar da distância, sempre procuraram manter contato, trazendo para Alagoas um pedacinho da Bahia, em especial Moises Silva, Herbert Oliveira, Mauro Oliveira, Sybelle, Flavius Lira, Vinícius Lira, Claudilson, Fabrício Oliveira, Marianna Costa, Igor Luiz, Sintia Queiros, Nubia Silva, Kíria Bezerra, Livia Dias, Claudia e "Lu", Shayana Teixeira, Alice Macedo e Rafael.

Ao casal Ozenilton Oliveira e Beatriz Oliveira e ao meus tios Adalberto Malta e Miriam Malta que sempre foram muito hospitaleiros nas minhas ocasionais viagens a Feira de Santana.

Às novas amizades que fiz aqui no DF. Todos, sem exceção, foram grandes companheiros, tanto nas horas sérias quanto nos diversos momentos de descontração na famosa e "perigosa" sala do cafezinho. Sem dúvidas, a boa convivência foi um fator multiplicativo para a minha satisfação de ter adotado esta instituição.

Ao colega Samuel Albuquerque, que sempre proporcionou, não só a mim como a todos do DF, muitos momentos de descontração com sua incrível capacidade de inventar e contar estórias.

Ao colega Amadeu Bandeira, que também foi companheiro de pensão e sempre conseguia transformar uma simples conversa de corredor em um momento de muita descontração.

Aos companheiros de apartamento, os mineiros Leonardo Lelis, Cesar Moura e André Gonçalves, que, além do companheirismo e dos momentos de descontração, proporcionaram para mim esta experiência que é de dividir o mesmo apartamento.

Aos demais colegas da Pós-Graduação: Arlan, Geraldo, Fred, Agnaldo, Willams, Wellinton, Itamar, Nadja, Italo e Rogério, os quais tive a sorte de dividir a mesma

sala de aula, as mesmas palestras e as mesmas comemorações.

À turma do LFOONL, Lucas, Andre, Rafael, Tiago e Taisa pela amizade e companheirismo.

À todos os professores de DF da UFAL.

Às amigas que fiz fora do DF, Fabrícia Ferreira, Elivânia Vilaça, Flávia Tenório e Clancy Moore, que sempre me ajudaram a superar o tédio dos fins de semana e feriados improdutivos.

À Capes pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação estudamos algumas propriedades estáticas e dinâmicas das excitações coletivas de 1 e 2 mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas. Os resultados obtidos no estudo de sistemas ferromagnéticos com a presença da desordem possuem uma relação íntima com os resultados previstos pelo modelo de Anderson, como a existência de auto-estados localizados. Esta relação se encontra presente em todo este trabalho, como por exemplo, quando estudamos o efeito da correlação de curto alcance tipo dímero na distribuição de desordem. Assim como foi encontrado por Dunlap *et. al.* [28] para o caso eletrônico, analisando o expoente de Lyapunov e a Densidade de Estados. Encontramos estados no centro da banda de energias com natureza estendida. O valor de energia destes estados está diretamente relacionado com o valor dos dímeros adotados na distribuição. Vimos também que a presença dos dímeros não altera o comportamento dinâmico de um pacote de onda inicialmente centrado em apenas um par de sítios no centro da cadeia, ou seja, ele mantém uma dinâmica super-difusiva ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$), confirmando os resultados previstos por Evangelou e Katsomos [38]. Estudamos também o comportamento estático e dinâmico do problema de 2-mágnons para verificar o efeito da interação. Analisamos quantidades relevantes como: a Razão de Participação e a Extensão Espacial, que confirmaram a natureza localizada dos auto-estados; a Correlação, que nos ajudou a compreender o grau de interação ao longo da banda de energia; e a distância média entre os mágnons em ambos os regimes. Foi verificado aqui também uma dinâmica super-difusiva e, estudando a função de onda para um tempo longo, encontramos que a probabilidade de haver um movimento mútuo entre os mágnons é pequena, fazendo surgir uma espécie de "colisão elástica" entre os mágnons que está associada com a lei de potência do pacote de onda assintótico.

Abstract

In this work, we study some stationary and dynamical aspects of 1 and 2-magnon excitations in disordered ferromagnetic chains. The results obtained in the study of ferromagnetic systems with the presence of the disorder have a close relation with the results foresaw by the Anderson model for the electronic case, such as the existence of localized eigen-states. This relation is present all along this work, as for exemple, when we study the effect of short-range dimer-like correlation in the disorder distribution. As it was found by Dunlap *et. al.* [28] for the electronic case, analyzing the Lyapunov Expoent and the Density of Estates, we found states at the center of the energy band with an extended nature. The energy value of this state is directly related to the dimmer value used in the distribution. We also obtained that the presence of dimers does not change the dynamical spread of a wave-packet initially localized in only one pair of sites at the center of the chain, in other words, it remains the super-duffusive dynamics ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$), confirming the results foresaw by Evangelou and Katsomos [38]. We studied the static and dynamic behavior of the 2-magnon problem to verify the interaction effect between magnons. We analyzed relevant quantities such as: the Participation Ratio and the Spatial Extent, that confirmed the localized nature of the eigen-states; the Correlation, that helped us to comprehend the interaction degree through the energy band; and the mean distance between magnons in both regimes. It was also verify a super-diffusive dynamics and, by studying the wave-function for a long time, we found that the probability to have a mutual movement between the magnons is small. It makes to arise a kind of "Elastic Colission" between the magnons and is associated with the power-law nature of the wave-packet asymptotic tails.

Sumário

Folha de rosto	i
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Sistemas Desordenados	3
1.1 Introdução	3
1.2 O Modelo de Anderson	4
1.2.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson.	6
1.2.2 Experimentos	11
1.2.3 Transição de Mott	12
1.3 Supressão da Localização de Anderson : Correlações na Desordem . .	13
2 Excitação de 1 Mágnon em Cadeia Dimerizada	17
2.1 O Ferromagnetismo	17
2.2 Ondas de Spin em uma Cadeia Ordenada	19
2.3 Onda de Spin em Cadeias Desordenadas Tipo "Dímero Aleatório" . .	22
2.3.1 Matriz de Tranferência e Expoente de Lyapunov	23

2.4	Resultados	29
2.4.1	Caso Estático	29
2.4.2	Caso Dinâmico	34
3	Excitação de 2 Mágns em Cadeias Desordenadas	37
3.1	Interação Entre Mágns	37
3.2	Auto-Estados de 2 Mágns em Cadeias Ordenadas: Estados Ligados	38
3.3	Auto-estados de 2-Mágns em Cadeias Desordenadas	43
3.4	Resultados - Caso Estacionário	52
3.4.1	Distância Média	53
3.4.2	Número de Participação	58
3.4.3	Extensão Espacial	60
3.4.4	Correlação	61
3.5	Dinâmica de 2 Mágns	64
3.6	Resultados - Aspectos Dinâmicos	66
4	Conclusão	72
	Referências	76

Capítulo 1

Sistemas Desordenados

1.1 Introdução

Em meados do sec. XX, a ciência dos materiais obteve um grande avanço movido pela descoberta de novas técnicas experimentais e teóricas que possibilitaram o estudo dos chamados sistemas desordenados. Foi possível prever e explicar diversas propriedades da matéria, como a condutividade por exemplo, que até então eram pouco entendidas ou totalmente desconhecidas e que foram de grande utilidade para o avanço científico e tecnológico. Um exemplo é a dopagem de sistemas reais (germânio, silício, etc) na fabricação de semi-condutores, a qual possibilitou a construção de dispositivos eletrônicos que foram fundamentais na tecnologia computacional. Ainda hoje a pesquisa em sistemas desordenados apresenta desafios no campo da Matéria Condensada que motivaram a elaboração deste trabalho.

Fisicamente, a desordem está associada à presença de impurezas, vacâncias, bem como deslocamentos em uma rede cristalina ideal. Uma forma de simular teoricamente um sistema desordenado é considerando átomos ou moléculas diferentes

distribuídas em uma rede regular.

Em geral, o estudo de sólidos é feito baseado em conceitos da Física Quântica e da Mecânica Estatística. Devido à existência de simetria translacional, uma boa aproximação para sólidos perfeitamente cristalinos é descrever partículas, tais como elétrons, ou excitações coletivas do sistema, tais como mágnons ou fônons, por uma função de onda completamente estendidas por toda extensão do material. Essa descrição leva a resultados como o mostrado pelo modelo de Bloch, que prevê ausência de resistência elétrica para um material perfeitamente cristalino. Entretanto, esse tipo de idealização não é muito genérica, pois os sólidos encontrados na natureza sempre apresentam algumas imperfeições, mesmo os criados em laboratório. A presença de tais imperfeições quebra a simetria translacional, fazendo necessário o uso de novas técnicas e modelos teóricos para descrever tais sistemas.

1.2 O Modelo de Anderson

Em 1958, P. W. Anderson [1] utilizou um modelo que permitiu estudar os efeitos da desordem sobre a função de onda eletrônica. Seu modelo considera os elétrons movendo-se sobre a influência de um potencial aleatório. Na representação de Wannier (*tight binding*), o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1.1)$$

O estado $|i\rangle$ representa o orbital atômico centrado no sítio i . O termo ϵ_i é a energia do sítio i e t_{ij} é chamado de integral de transferência entre os sítios i e j , também conhecido como amplitude de *hopping*. A desordem é introduzida nas energias ϵ_i

que são números aleatórios distribuídos no intervalo $[-W, W]$. O parâmetro W , a largura da distribuição de desordem, controla o grau de desordem do sistema. A interação Coulombiana entre os elétrons é desprezada neste Hamiltoniano. Com este modelo, Anderson mostrou a existência da chamada "localização da função de onda eletrônica" pela desordem.

Vamos discutir de forma qualitativa o papel da desordem na localização dos estados eletrônicos. Considere o modelo de Bloch com potencial periódico nulo ($U(r) = 0$), ou seja, um elétron livre. Se introduzirmos uma única barreira de potencial, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida pela barreira. Se, ao invés de uma única barreira, intruzirmos duas barreiras de potencial, a função de onda sofrerá duas reflexões. As duas barreiras geram ondas refletidas e incidentes que podem sofrer interferências destrutivas ou construtivas a depender da diferença de fase existente. Estas interferências podem mudar bastante o padrão da função de onda. Se um potencial aleatório estiver presente, o que pode ser representado por barreiras de potencial em posições aleatórias ou com intensidades aleatórias, a função de onda sofrerá várias reflexões as quais não mantêm coerência de fase. Estas reflexões causam interferências destrutivas que induzem uma localização exponencial da função de onda. A função de onda se concentra em uma pequena região e tem valor desprezível em qualquer outra região do sólido. Neste regime, o sistema está na fase isolante. No caso de ondas estendidas, onde o elétron fica itinerante na cadeia, temos a fase metálica. O modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal-isolante para um valor crítico da força da desordem (W).

Uma função de onda é dita exponencialmente localizada quando suas amplitudes de probabilidade decaem exponencialmente à medida que nos afastamos do

centro do pacote, de acordo com uma lei do tipo $e^{-R/\lambda}$, onde λ é o chamado comprimento de localização, e como o próprio nome sugere, está relacionado com o grau de localização do estado.

No final da década de 1970, Anderson, juntamente com Abrahams, Licciardello e Ramakrishnan [2], construíram uma teoria de escala para a condutância generalizada do modelo de Anderson e obtiveram a dependência da transição Metal-Isolante com a dimensão. Estes resultados tiveram grande repercussão na comunidade científica. O próprio Ramakrishnan, em entrevista para a *APS News*, atribuiu todo este sucesso ao fato de o trabalho apresentar predições experimentalmente testáveis e não usuais, baseados em um novo processo de interferência com muitos-corpos que explorava o processo de localização, um tema que atraía muito a atenção dos cientistas no final da década de 70. Hoje, o artigo publicado por eles em 1979 é um dos 10 mais citados da *Physical Review Letter* e Philip Warren Anderson chegou a ganhar o Prêmio Nobel de Física de 1977 por sua grande contribuição no estudo de sistemas desordenados.

1.2.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson.

Vamos apresentar a teoria de escala que foi originalmente utilizada por Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan [2] para se obter a dependência da transição de Anderson com a dimensão. A hipótese básica desta teoria de escala é que uma única quantidade característica, a condutância generalizada g , controla a transição de estado estendido para localizado em $T = 0$. A teoria de escala foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless [3]. Na abordagem de Thouless as unidades básicas são agora caixas de volume l^d que contêm

muitos sítios. O sólido é formado de várias caixas acopladas uma às outras. As energias características do modelo de Anderson W e t são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis ΔE e no deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno. Um elegante argumento eurístico, baseado no princípio da incerteza, conecta δE com a condutividade σ no limite macroscópico. Através do princípio da incerteza pode-se estabelecer:

$$\delta E = \hbar/t_D, \quad (1.2)$$

onde $t_D = L^2/D$ é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos de uma caixa de lado L , onde D é a constante de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão ($\sigma = e^2 D n(E)$) temos :

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.3)$$

A densidade de estados média pode ser escrita como função do espaçamento médio entre os níveis $n(E) = 1/(L^d \Delta E)$. Logo, a razão $\Delta E/\delta E$ é agora adotada como sendo uma medida da força da desordem no sistema, análoga a razão W/t no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não o são ($\delta E < \Delta E$). Portanto, utilizando estas equações, a condutância generalizada definida por $g(L) \equiv \frac{\delta E}{\Delta E}$ tem o seguinte comportamento de escala:

$$g(L) = (\hbar/e^2) \sigma L^{d-2}. \quad (1.4)$$

A teoria de escala examina a dependência de $g(L)$ com o comprimento de escala

utilizado. Seja $g_0 = g(L_0) = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$ a condutância generalizada para um sistema composto de caixas acopladas de volume L_0^d . A teoria de escala assume que, dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , podemos obter g numa escala maior $L = L_0 b$. Na nova escala $L_0 b$ a condutância g é completamente determinada pelo valor anterior g_0 e pelo fator de escala b . O comportamento de escala da função g pode ser obtido a partir da função $\beta(g)$:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.5)$$

Para β positivo, g cresce com o crescimento de L ; para β negativo, g decresce com o crescimento de L . O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ está representado na figura 1.1 para $d = 1, 2$ e 3 . A curva mostrada na figura 1.1 foi proposta por Abrahams *et al* [2]. O comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ pode ser determinado a partir dos seus limites assintóticos ($g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$). Para g grande podemos usar a Eq. (1.4) e mostrar que

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.6)$$

Logo, $\beta(\infty)$ é $+1$ em $d = 3$, 0 em $d = 2$ e -1 em $d = 1$, como mostrado na figura 1.1. Para g pequeno, ou seja, no limite de fraco acoplamento e forte desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância. Nos contornos de uma caixa de dimensão linear L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado dentro da caixa é da ordem de $e^{-\gamma L}$, onde γ é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização λ). O acoplamento entre as caixas também decaem exponencialmente

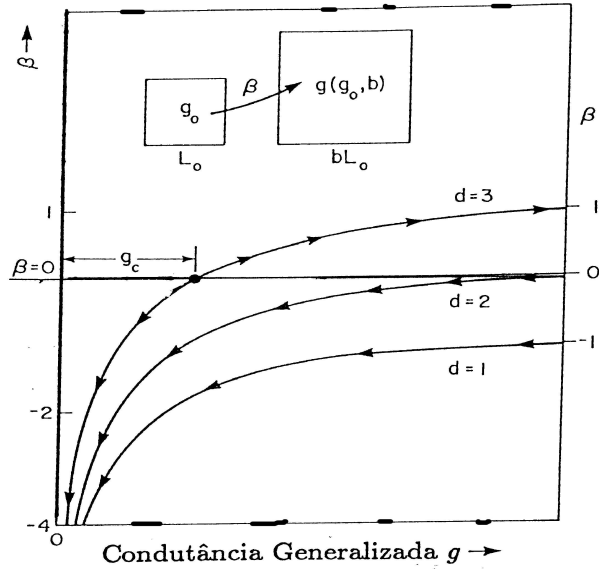


Figura 1.1: O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam.

com L , de forma que $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Usando a Eq. (1.5), temos,

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.7)$$

e portanto, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, independente da dimensão. Assumindo que $\beta(g)$ tenha variação lenta e monotônica entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$, nossa análise reproduz o comportamento qualitativo da figura 1.1. As setas do diagrama de fluxo sobre as curvas representam a direção em que g sofre variações quando L cresce. Para $d = 1$ e $d = 2$ as setas indicam que g sempre diminui quando L cresce. Em $d = 3$ temos dois comportamentos: Abaixo de um certo g_c ($\beta(g) < 0$) as setas do diagrama de fluxo indicam que a condutância generalizada g

diminua quando L cresce; acima de g_c ($\beta(g) > 0$) o comportamento é contrário, g cresce quando L cresce. O ponto no diagrama de fluxo ($g_c, \beta(g_c) = 0$) é chamado ponto fixo instável. Este diagrama mostra claramente a dependência da transição de Anderson com a dimensão: em $1d$ e $2d$ não existe transição metal-isolante, com a condutividade indo sempre a zero quando $l \rightarrow \infty$; em $3d$ existe uma transição metal-isolante. O comportamento crítico perto desta transição em $3d$ também foi obtido a partir da teoria de escala [4]. O comprimento de localização λ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) tem um comportamento tipo lei de potência $\lambda \propto (E - E_c)^{-\nu}$ com expoente $\nu \approx 1.57$ [5, 6, 7, 8].:

As descobertas feitas por Anderson foram de fundamental importância para o entendimento das propriedades de condução da matéria. Para um sólido que se encontre a temperatura nula e desconsiderando ligações com outros graus de liberdade, como fônons, ou interações mútuas, uma partícula que se encontre exponencialmente localizada não apresenta participação no processo de condução, pois só há probabilidade dela ser encontrada em uma região finita do sólido, enquanto que, em um estado estendido, a partícula se torna itinerante, pois apresenta probabilidade finita de ser encontrada em qualquer sítio da rede. Como consequência disso, se só existirem estados localizados próximos à energia de Fermi, o sistema será um isolante, ou seja, no limite de $T=0K$, a condutividade DC (limite de baixa frequência para a condutividade linear) será nula. Por outro lado, caso estes estados se apresentem estendidos, esta condutividade será finita e o sistema se torna um condutor. Para temperaturas acima de $0K$, o fenômeno da condutividade é explicado por excitações térmicas. Apesar das muitas simplificações, o modelo de Anderson é considerado até hoje a estratégia mais eficiente para estudar os efeitos da desordem sobre as propriedades de transporte eletrônico.

Diversos outros fenômenos também foram explicados com base nas teorias de sistemas desordenados, como exemplo, a existência de Efeito Hall quantizado, que está associado à presença de elétrons em estados localizados quando o material é submetido a um campo magnético externo [9]. Além disso, sistemas macroscópicos, como ondas eletromagnéticas ou ondas mecânicas em meio líquido, assim como nos sistemas quânticos, também apresentam diversas propriedades de localização quando submetidos a algum tipo de desordem [10, 11, 12], o que mostra a vasta aplicabilidade deste ramo teórico.

1.2.2 Experimentos

Além de fenômenos naturais observados, diversos estudos de caráter experimental foram realizados com o objetivo de comprovar a eficácia desta teoria. A transição metal-isolante foi investigada em vários sistemas, como em semicondutores dopados, misturas amorfas de material metálico e não metálico [13, 14] e em transições induzidas por campo magnético [15, 16]. Flutuações na condutância como resultado da presença da desordem também foram observadas em sistemas pequenos e a baixas temperaturas [17, 18]. Na maior parte destes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A força ou largura da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes N_P ou através de um campo. Em ambos os casos a distância entre os dopantes muda e isto modifica a largura da desordem W . No caso experimental a energia crítica E_c do sistema é a concentração crítica dos dopantes N_P^c ou o valor do campo H_c para os quais a transição acontece. Recentemente foi observado um expoente $\nu = 1.6$ para silício dopado com Bário ($Si : B$) [19] bem como $\nu = 1$ para o silício dopado com fósforo. Em geral, estas pequenas diferenças no expoente vêm sendo atribuídas à presença de outros efeitos

no experimento como por exemplo a interação Coulombiana entre os elétrons [20]. Em sólidos reais os elétrons correlacionam seus movimentos uns com os outros de forma a evitar configurações muito energéticas. Estas correlações são responsáveis pela transição de Mott (vamos discutir este mecanismo na próxima seção)

1.2.3 Transição de Mott

Outra forma de se obter uma transição entre estados estendidos e localizados foi encontrada por Sir Nevill Mott [21, 22]. Neste modelo, a transição é induzida pela interação entre os elétrons da rede. O modelo de Bloch falha na descrição de elétrons em uma rede cristalina tendendo ao limite atômico ($a = \infty$). Fazendo a constante de rede ir para infinito, pelo fato de ainda permanecer a simetria translacional da rede, o elétron de valência de cada átomo ainda apresenta um comportamento itinerante, como em um condutor, sendo que este sistema deveria apresentar a solução atômica convencional, já que se trata de um conjunto de átomos isolados e não interagentes. Além do mais, o custo energético para deslocar um elétron entre dois átomos isolados é muito alto, desfavorecendo o caráter itinerante previsto pelo modelo de Bloch. Mott analisou a influência da interação Coulombiana (ϵ^2/r_{12}) entre os elétrons pertencentes ao mesmo sítio e verificou que, com a presença de tal interação e diante de certas condições, a configuração energeticamente mais favorável levava a uma localização dos elétrons, corrigindo assim a falha do modelo de Bloch. Matematicamente, a transição de Mott ocorre quando a energia de correlação (U) entre os elétrons é maior que a largura da banda (B) do sólido cristalino ($U > B$). Com este trabalho, Mott ganhou o Prêmio Nobel de Física de 1977, juntamente com Anderson.

1.3 Supressão da Localização de Anderson : Correlações na Desordem

Uma série de resultados relevantes nesta área sucederam-se então, como o trabalho de P. Dean [23], que introduziu correlações de curto alcance na distribuição da desordem, tratando numericamente cadeias diatômicas desordenadas. Ele detectou picos na distribuição de frequências, associados à frequência dos modos de impureza, característica não encontrada em redes ordenadas. Mott e Twose [24], e posteriormente Makinson e Roberts [25], constataram também a existência de estados localizados para elétrons em líquido 1D. O mesmo efeito foi encontrado também para os modos normais de uma cadeia harmônica por Dean e Bacon [26]. Outros trabalhos foram feitos para sistemas maiores, o que confirmou a propriedade fundamental da localização. Entre estes, P. Dean [27] afirmou que esta característica dos modos da rede é uma consequência necessária da desordem. Fenômenos ainda mais curiosos foram encontrados, como o obtido por Dunlap, Wu e Phillips [28] ao investigarem uma cadeia do tipo "liga binária". Neste tipo de sistema, as energias dos sítios assumem apenas os valores ϵ_A ou ϵ_B , aleatoriamente distribuídos, e os sítios com energia ϵ_A sempre aparecem aos pares. Foi verificada a possibilidade de existência de estados ressonantes, onde a função de onda é delocalizada. Tais resultados foram comprovados experimentalmente por Bellani *et. al.* [29] em super-redes de GaAs e AlGaAs.

Foram pesquisados também os efeitos da presença de correlações de longo alcance. Sequências desordenadas com correlações de longo alcance não apresentam comprimento de escala característico [30] e sua densidade espectral é aproximadamente uma lei de potência da forma $S(k) = 1/k^\alpha$, onde α é um parâmetro que

controla o grau de correlação, tal que para $\alpha = 0$ o sistema não possui correlação e as variáveis aleatórias são completamente independentes umas das outras. Em 1994, M. C. Varriale e A. Theumann [31] estudaram um gás de elétrons, em $T = 0$, na presença de potenciais aleatórios com correlações espaciais de longo alcance que decaem com a separação $|x|$ de acordo com uma lei do tipo $|x|^{-d-\sigma}$, onde σ é um parâmetro, e demonstraram a existência de transição de Anderson em altas dimensões ($d > 4$). Em 1998, Moura e Lyra [32] aplicaram a correlação de longo alcance nos elementos da diagonal do Hamiltoniano que descreve o modelo de Anderson. Isto representava fisicamente uma desordem apenas nas potenciais de cada sítio da rede. Utilizando um formalismo de grupo de renormalização, eles mostraram que este sistema pode exibir uma fase de estados estendidos no centro da banda se $\alpha > 2$. Eles obtiveram resultados semelhante para o caso em que a desordem se aplicava aos termos de hopping do Hamiltoniano, sendo que desta vez, a transição acontecia para $\alpha > 1$. Pela primeira vez uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas 1D desordenados foi encontrada.

Devido a esta impressionante característica, outros sistemas foram estudados na presença de correlação de longo alcance, como cadeias de DNA [33, 34] e cadeias harmônicas com massas randômicas correlacionadas [35]. Para todos estes casos, o mesmo fenômeno obtido no caso eletrônico também foi encontrado.

Como sistemas magnéticos podem ser mapeados a partir do modelo de Anderson, espera-se que os resultados obtidos para o caso eletrônico apresentem uma semelhança próxima para o caso magnético. Por isso se fez necessária uma apresentação inicial de resultados relacionados ao caso eletrônico. Tais analogias foram verificadas por Theodorou [36] e Cieplak e Ismail [37] em cadeias lineares ferromagnéticas cujo valor das constantes de troca apresentavam desordem. Neste sis-

tema também foi encontrado o fenômeno da localização para mágnons, onde o comprimento de localização da excitação de 1-mágnon, na região de baixas energias, diverge com $\xi(E) \propto E^{-\phi}$, onde ϕ depende da maneira particular da distribuição da desordem, na vizinhança de $J = 0$ [38]. Neste sistema também foi encontrado o fenômeno da localização para mágnons. Tal propriedade também foi encontrada para o caso "vidro de spin" por Pimentel e Stinchcombe [39]. Ainda para o caso magnético, Lifshitz [40] verificou o aparecimento de estados localizados para energias fora da banda de Onda de Spin de um cristal puro e estados virtuais, com tempo de vida finito, para energias dentro da banda, ao introduzir um átomo de impureza magnética no cristal.

Efeitos de correlação de longo alcance em sistemas magnéticos também foram estudados. Lyra *et al* [41] aplicaram correlação nos acoplamentos entre os spins e, utilizando um procedimento de diagonalização direta do Hamiltoniano e cálculo numérico computacional, foi encontrada a existência de uma fase de ondas de spin não espalhada para sequências de acoplamentos com parâmetro de correlação $\alpha > 1$. Entretanto, não foi possível descrever completamente a transição e encontrar as energias críticas pois este estudo foi restrito a sistemas pequenos $N < 2000$ devido às dificuldades computacionais em diagonalizar matrizes grandes.

Como podemos ver, o estudo de sistemas eletrônicos e/ou magnéticos desordenados de baixa dimensionalidade tem sido objeto de grande interesse pela comunidade científica nas últimas décadas. De uma forma geral, os principais esforços foram aplicados no entedimento dos mecanismos impostos por correlações na desordem sobre a natureza das excitações elementares (elétrons ou mágnons por exemplo). Entretanto nestes trabalhos, a interação entre as excitações é completamente desprezada. A interação Coulombiana entre elétrons é o mecanismo responsável

pela transição de Mott. Nesta dissertação de mestrado será estudado basicamente mágnons interagentes em sistemas ferromagnéticos unidimensionais desordenados. No capítulo 2 faremos um abordagem para o caso de 1-mágnon numa cadeia ferromagnética com desordem correlacionada (*dímero aleatório*). Mostraremos que este tipo de desordem faz surgir energias ressonantes estendidas, como foi encontrado para o caso eletrônico. O comportamento dinâmico da função de onda de 1-mágnon na presença destas correlações de curto alcance será também estudado. Já no capítulo 3 vamos apresentar nosso estudo sobre 2-mágnon na presença de desordem. O formalismo consistirá em diagonalizar exatamente o Hamiltoniano para os 2-mágnons bem como resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para os 2-mágnons. Utilizando estes formalismos vamos estudar, entre outros aspectos, a distância média entre os mágnons, a dispersão da função de onda bem como a correlação dos 2-mágnons. Utilizando estas medidas podemos ter uma noção do caráter localizado e/ou estendido dos 2-mágnons bem como avaliar o papel da interação sobre os auto-estados do Hamiltoniano.

Capítulo 2

Excitação de 1 Mágnon em Cadeia Dimerizada

2.1 O Ferromagnetismo

O fenômeno do ferromagnetismo, presente em substâncias como metais de terra rara, metais de transição, compostos isolantes magnéticos e ligas magnéticas, é caracterizado por apresentar uma magnetização espontânea, mesmo na ausência de um campo magnético externo aplicado. Este fenômeno, presente apenas quando a amostra apresenta temperaturas abaixo da temperatura crítica, T_c , chamada Temperatura Curie, é resultado da forte interação existente entre os momentos magnéticos atômicos que tendem a se alinhar paralelamente, gerando assim um momento magnético macroscópico não nulo. Quando a amostra se encontra acima da temperatura crítica, a energia térmica, $k_B T$, excede a energia de interação que ordena os momentos magnéticos, e a ordem magnética "desaparece" de tal forma que a orientação dos spins se torna praticamente independente uma da outra, ou

seja, a magnetização espontânea diminui com o aumento da temperatura.

Materiais ferromagnéticos podem, no entanto, apresentar uma magnetização quase nula mesmo para temperaturas menores que T_c . Isso ocorre por que tais materiais se comportam como um "mosaico" de pequenas regiões de magnetização espontânea, chamadas Domínios Magnéticos, que apresentam campo magnético em direções diferentes, produzindo assim uma resultante macroscópica quase nula.

No início do século XX, Weiss [42] desenvolveu uma teoria para explicar a dependência da magnetização espontânea com a temperatura. Ele postulou a existência de um campo molecular que seria criado pelos próprios momentos magnéticos do material de forma a manter o alinhamento paralelo coletivo dentro do domínio. Este campo molecular seria então proporcional à magnetização em cada ponto. Esta teoria foi bem sucedida, mas falhava no regime de baixas temperaturas, pois previa uma dependência proporcional a $\exp(-T^{-1})$ [43], enquanto que Bloch [44] mostrou que esta dependência deveria ser proporcional a $T^{\frac{3}{2}}$.

Foi somente com o desenvolvimento da Mecânica Quântica que surgiram teorias que puderam explicar o fenômeno do ferromagnetismo de uma forma mais coerente. Na segunda década do século XX, Heisenberg [45], e independentemente Dirac[46], mostraram que a origem do campo molecular de Weiss estava na interação de intercâmbio, um fenômeno relacionado com o Princípio de Exclusão de Pauli e que não possui correspondente na teoria clássica. O hamiltoniano que descreve esta interação para dois átomos i e j , os quais possuem um elétron cada, é o chamado Hamiltoniano de Heisenberg, dado por:

$$H = -J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.1)$$

e para uma cadeia com mais de dois átomos, temos:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.2)$$

onde \vec{S}_i e \vec{S}_j são operadores de spin que agem nos sítio i e j respectivamente, J_{ij} é chamada Constante de Troca e está diretamente relacionada com a interação de intercâmbio entre os spins dos sítios i e j . Para a ordem ferromagnética, os spins tendem a se alinhar paralelamente e por conta disso o valor das constantes de troca (J_{ij}) devem ser positivas. Os elementos Fe, Ni e Co, por exemplo, possuem valores de constante de troca positivos, explicando assim a natureza ferromagnética desses elementos.

Em sistemas regidos pelo Hamiltoniano (2.2), supõe-se que os elétrons da camada de valência estejam suficientemente localizados, de tal forma que seja possível associar um spin a cada sítio i da cadeia definindo assim os portadores de momento magnético.

Com este modelo, Heisenberg foi capaz de explicar a existência dos campos moleculares de Weiss e explicar muitas propriedades magnéticas dos isolantes.

2.2 Ondas de Spin em uma Cadeia Ordenada

Tomando um material ferromagnético no seu estado fundamental, onde todos os spins estão alinhados na mesma direção, uma excitação que seja provocada em um dos spins irá provocar uma perturbação coletiva em toda a cadeia. Tais perturbações coletivas são chamadas de Ondas de Spins e foram primeiramente previstas por Bloch [43] em 1929. O estudo das ondas de spins conduzem ao entendimento de muitas das

propriedades da matéria no regime de baixas temperaturas, pois nestas condições a contribuição das excitações elementares se tornam mais relevantes diante da energia térmica.

A fim de compreender melhor este fenômeno e apresentar uma abordagem matemática inicial do problema, vamos considerar o caso simples de uma cadeia ferromagnética unidimensional, contendo N íons de spin $\vec{S} = S_x\vec{x} + S_y\vec{y} + S_z\vec{z}$, admitir que o valor das constantes de troca J_{ij} são iguais e existem apenas interações entre sítios vizinhos. O hamiltoniano (2.2) fica:

$$H = -J \sum_{n=1}^N \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}. \quad (2.3)$$

Vamos introduzir os operadores *levantamento* (S_n^+) e *abaixamento* (S_n^-) que irão agir sobre a cadeia modificando a orientação do spin localizado no sítio n para o sentido positivo e para o sentido negativo respectivamente.

$$\begin{aligned} S_n^+ &= S_n^x + iS_n^y, \\ S_n^- &= S_n^x - iS_n^y. \end{aligned}$$

Utilizando as relações de comutação dos operadores de spin, obtemos as seguintes relações para os operadores acima:

$$\begin{aligned} [S_k^+, S_l^+] &= 2S_k^z \delta_{k,l}, & [S_k^z, S_l^+] &= S_k^+ \delta_{k,l}, \\ [S_k^z, S_l^-] &= -S_k^- \delta_{k,l}, & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Inicialmente resolveremos a equação de Schrödinger para o estado ferromagnético fundamental $|\phi_0\rangle$ e veremos que este é um auto-estado do hamiltoniano

(2.2). Utilizando as relações (2.25) o hamiltoniano (2.2) fica:

$$H = -J \sum_{n=1}^N [S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2}(S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+)] \quad (2.5)$$

Admitindo que no estado fundamental os spins estão todos alinhados na direção positiva de z , o operador \vec{S}_n^z aplicado à $|\phi_0\rangle$ assume valor máximo S para qualquer sítio n da cadeia. Da mesma forma, o operador \vec{S}_n^+ assume valor nulo, já que os spins deste estado já se encontram na direção positiva. A equação de Schrödinger fica então:

$$H|\phi_0\rangle = -NJS^2|\phi_0\rangle \quad (2.6)$$

Vemos portanto que $|\phi_0\rangle$ é um auto-estado e sua energia é $E_0 = -NJS^2$.

Agora aplicamos no estado fundamental uma excitação no spin do sítio l a fim de estudar os estados excitados de 1-mágnon. A forma mais sugestiva de expressá-lo matematicamente é aplicando o operador \vec{S}_n^+ no estado fundamental $|\phi_0\rangle$, obtendo assim o vetor $|\phi_l\rangle = \vec{S}_n^+|\phi_0\rangle$. O operador hamiltoniano aplicado neste estado fornece:

$$H|\phi_l\rangle = -J(NS^2 - 2S)|\phi_l\rangle - JS(S_{l+1}^-|\phi_0\rangle + S_{l-1}^-|\phi_0\rangle) \quad (2.7)$$

Vemos portanto que a forma escolhida para $|\phi_l\rangle$ não é um auto-estado de (2.2), sendo necessário portanto uma escolha mais adequada. Considerando a simetria translacional do sistema, podemos escrever este novo estado na forma:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^N e^{ikan}|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^N e^{ikan}\vec{S}_n^+|\phi_0\rangle \quad (2.8)$$

onde uma constante de normalização é ignorada, a é o espaçamento entre os íons

e k é o número de onda associado a este estado. Podemos verificar que $|\phi\rangle$ é um auto-estado de (2.2):

$$H|\phi\rangle = -J(NS^2 - 2S)|\phi\rangle - JS \sum_{n=1}^N (e^{ikan} S_{n+1}^- |\phi_0\rangle + e^{ikan} S_{n-1}^- |\phi_0\rangle) \quad (2.9)$$

Os dois somatórios, apesar do índices dos operadores serem diferentes, são iguais a $|\phi\rangle$, tal que:

$$H|\phi\rangle = J(NS^2 - 2S)|\phi\rangle - JS(e^{-ika} + e^{ika})|\phi\rangle \quad (2.10)$$

A energia deste estado será portanto:

$$E_k = E_0 + 2JS[1 - \cos(ka)] = E_0 + 4JS \text{sen}^2\left(\frac{ka}{2}\right) \quad (2.11)$$

Encontramos assim a relação de dispersão para 1 mágnon em uma cadeia linear ferromagética ordenada.

2.3 Onda de Spin em Cadeias Desordenadas Tipo "Dímero Aleatório"

Nesta sessão iremos introduzir a desordem no problema de 1 mágnon. Tratar-se-á de um modelo de desordem com correlação de curto alcance do tipo dímero aleatório, anteriormente utilizado por Dean, Wu e Phillips [28] em 1990 para o caso eletrônico. Em 1992, Bovier [47] estudou o modelo *tight binding* unidimensional com distribuição de desordem tipo dímero usando teoria de perturbação. Foi analisado o comportamento da densidade de estados e do coeficiente de Lyapunov (inverso

da largura da função de onda) obtendo resultados semelhantes. Wu e Phillips [48] mostraram que este modelo descreve exatamente a distribuição de desordem na polianilina.

Para uma cadeia ferromagnética, este modelo de desordem é obtido quando as constantes de troca (J) assumem apenas dois valores positivos e não nulos permitidos, J_a e J_b , sendo que os sítios que apresentam valor J_b sempre aparecem aos pares. Estes valores são distribuídos randomicamente pela rede, com probabilidades p e $1 - p$.

Para analisar o comportamento dos auto-estados de 1 mágnon, utilizamos o método de Matriz de Transferência para assim obter o expoente de Lyapunov. Ainda para este problema, analisamos o comportamento dinâmico de um pacote de onda, inicialmente localizado no centro da cadeia, através do cálculo da evolução temporal do desvio quadrático médio.

2.3.1 Matriz de Transferência e Expoente de Lyapunov

Como foi visto para o caso puro, o estado onde só existe probabilidade de haver excitação em um único sítio não é um auto-estado do hamiltoniano (2.2). A mesma idéia se aplica para o caso desordenado, portanto vamos sugerir uma função de onda da forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \quad (2.12)$$

onde f_n representa a amplitude de probabilidade de ocorrer um desvio no sítio n .

Resolvendo então a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\sum_{n=1}^N f_n H |\phi_n\rangle = E \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \quad (2.13)$$

Calculando separadamente $H|\phi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} H|\phi_n\rangle &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \vec{S}_{l+1} |\phi_n\rangle \\ &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} [S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)] |\phi_n\rangle \\ &= - \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z}_{Q_1} |\phi_n\rangle - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} (S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)}_{Q_2} |\phi_n\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} (S_l^- S_{l+1}^+)}_{Q_3} |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad (2.14)$$

calculando Q_1 :

$$\begin{aligned} Q_1 &= - \sum_{l=1}^{n-1} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n\rangle \\ &\quad - J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad (2.15)$$

Temos que todos os sítios visitados pelo primeiro e pelo segundo somatório apresentam spins no sentido positivo de z , pois os únicos spins revertidos da cadeia foram retirados do somatório. Desta forma, \vec{S}_n^z terá valor máximo S . Utilizando as relações

(2.4) teremos:

$$Q_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n \rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0 \rangle - S_n^- |\phi_0 \rangle) - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0 \rangle - S_n^- |\phi_0 \rangle) \quad (2.16)$$

lembrando que $S_n^z |\phi_0 \rangle = S |\phi_0 \rangle$. Reagrupando os termos possíveis no somatório,

Q_1 fica:

$$Q_1 = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n \rangle$$

Sabe-se que $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2$ é a energia do estado fundamental. O resultado para o primeiro somatório será portanto:

$$Q_1 = E_0 |\phi_n \rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n \rangle \quad (2.17)$$

Com a ajuda das relações (2.4), podemos escrever Q_2 da forma:

$$Q_2 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} + S_n^- S_l^+) |\phi_0 \rangle - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- S_l^z \delta_{ln} |\phi_0 \rangle \quad (2.18)$$

calculando o termo para $l = n$ temos o resultado para o segundo somatório:

$$Q_2 = -J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z |\phi_0 \rangle = -J_{n,n+1} S S_{n+1}^- |\phi_0 \rangle = -J_{n,n+1} S |\phi_{n+1} \rangle \quad (2.19)$$

O cálculo de Q_3 se dá de forma semelhante:

$$\begin{aligned} Q_3 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- (2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} + S_n^- S_{l+1}^+) |\phi_0 \rangle \\ &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_n^- S_{l+1}^+ |\phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

e novamente para $n = l + 1$:

$$Q_3 = -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z |\phi_0 \rangle = -J_{n-1,n} S S_{n-1}^- |\phi_0 \rangle = -J_{n-1,n} S |\phi_{n-1} \rangle \quad (2.21)$$

A equação (2.14) fica da forma:

$$H|\phi_n \rangle = E_0 |\phi_n \rangle + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n \rangle - J_{n,n+1} S |\phi_{n+1} \rangle - J_{n-1,n} S |\phi_{n-1} \rangle \quad (2.22)$$

Substituindo em (2.13) obtemos:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\phi_n \rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} f_n |\phi_{n+1} \rangle \\ - \sum_{n=1}^N J_{n-1,n} f_n |\phi_{n-1} \rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

Fazendo $n = n + 1$ no segundo somatório e $n = n - 1$ no terceiro somatório obtemos:

$$\sum_{n=1}^N \{[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n,n+1} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1}]\} |\phi_n \rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n \rangle \quad (2.24)$$

Portanto, fazendo $\mathcal{E} = E - E_0$ e $S = 1/2$ temos a equação de Schrödinger em função

das amplitudes de probabilidade f_n :

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n,n+1} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1} = 2\mathcal{E} f_n \quad (2.25)$$

Esta relação de recorrência pode ser tratada por diversos métodos, um deles por exemplo é obtido através da representação matricial da equação Schrödinger na base $(|\phi_1 \rangle, |\phi_2 \rangle, \dots, |\phi_n \rangle)$. Esta representação pode ser muito útil para estudos numéricos baseados em diagonalização direta.

Estamos interessados agora em escrever a relação de recorrência (2.25) na forma de matriz de transferência. Este método consiste em escrever uma matriz que possibilite o cálculo de cada f_n de uma forma recursiva. Trata-se de algo do tipo:

$$\begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

onde T_n é a matriz de transferência procurada. Para obter esta matriz escrevemos a equação (2.25) da forma:

$$f_{n+1} = C_n f_n - A_n f_{n-1} \quad (2.27)$$

onde

$$A_n = J_{n-1,n} / J_{n,n+1} \quad (2.28)$$

$$C_n = 1 + A_n - 2B_n \quad (2.29)$$

$$B_n = \epsilon / J_{n,n+1}. \quad (2.30)$$

Podemos escrever a equação (2.27) na forma:

$$\begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_n & -A_n \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

Temos portanto a nossa matriz de transferência T . Fazendo uma escolha apropriada de f_0 e f_1 , podemos obter o elemento f_2 . Repetindo o procedimento para $n = 2$ obtermos o valor de f_3 , e assim sucessivamente, ou seja, a propagação da excitação ao longo da cadeia é representada pelo produto de matrizes, onde cada uma delas está associada a um sítio.

Escolhendo $f_1 = 1$, o valor de f_0 pode ser calculado substituindo $n = 0$ em (2.27):

$$f_0 = f_1/C_0 \quad (2.32)$$

onde

$$C_0 = 1 - 2B_0 + A_0 \quad (2.33)$$

$$B_0 = \epsilon/J_{0,1} \quad (2.34)$$

$$A_0 = J_{0,-1}/J_{0,1} = 0 \quad (2.35)$$

Desta forma, dada a condição inicial $U_0 = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}$, as amplitudes da função de onda no sítio N serão dadas por:

$$U_N = \prod_l^N T_l \times U_0. \quad (2.36)$$

A partir daqui define-se o expoente de Lyapunov γ , ou inverso do compri-

mento de localização λ , por:

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|U_N|}{|U_0|} \quad (2.37)$$

Se no limite termodinâmico o expoente de Lyapunov é finito, implica dizer que o comprimento de localização do auto-estado também é finito, tratando-se portanto de um estado localizado. À medida que o comprimento de localização aumenta, o expoente de Lyapunov diminui. Desta forma, para um estado estendido, o expoente de Lyapunov deve ir a zero no limite termodinâmico.

2.4 Resultados

2.4.1 Caso Estático

Iremos agora aplicar este formalismo para analisar os auto-estados de 1 mágnon em uma cadeia dimerizada. Antes porém é importante apresentar alguns resultados deste modelo para o caso eletrônico.

Na Tese de Doutorado de F. A. B. F. de Moura foram apresentados resultados para uma cadeia dimezidada onde $\epsilon_A = 0.8$ e $\epsilon_B = 0.0$, ambos com a mesma distribuição de probabilidades, e termos de hopping $t_{i,i+1} = 1.0$, onde $i = 1, \dots, N$. Foi mostrado que a presença da correlação de curto alcance fez surgir estados estendidos para energia $E = 0.8$. Neste ponto o expoente de Lyapunov foi a zero, enquanto que para as demais energias ele apresentava valor não nulo. Este é um resultado surpreendente, pois mostra que é possível a existência de estados estendidos no centro da banda, onde normalmente, para sistemas 1D desordenados, existem apenas estados localizados. Nota-se que o valor da energia ressonante é igual ao valor do

dímero ϵ_A . Este fato é facilmente notado na matriz de transferência para o caso eletrônico é:

$$T_l = \begin{pmatrix} \frac{(E - \epsilon_l)}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l-1,l}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Para $E = 0.8$ o termo $E - \epsilon_l$ será nulo para os sítios do tipo A, de tal forma que, para dois sítios consecutivos deste tipo, o produto das matrizes de transferência será igual a $-I$, mostrando que os dímeros do tipo A não espalham a função de onda com energia $E = \epsilon_A$, apenas alteram sua fase.

Para obter nossos resultados utilizamos cálculo numérico computacional feitos através de softwares criados em linguagem C e FORTRAN.

Um outro mecanismo utilizado para extrair informação foi o cálculo da densidade de estados (DOS). Ziman [50] mostrou que a dependência da densidade de estados e do expoente de Lyapunov com a energia estão diretamente relacionadas com a forma da distribuição da desordem. Utilizando o Método de Dean calculamos numericamente a DOS para uma cadeia com $N = 10^6$ sítios e $J_A = 1.5$ e $J_B = 1.0$.

A figura 2.1 mostra a DOS para (a) o caso dimerizado e (b) para o caso aleatório sem correlação, onde os valores de J assumem apenas dois valores possíveis, no caso $J_A = 1.0$ e $J_B = 1.5$, distribuídos aleatoriamente ao longo dos sítios da cadeia com a mesma distribuição de probabilidade para ambos. Diferentemente do caso dimerizado, a desordem tipo par-aleatório não apresenta o vínculo de que os valores de J_B precisam vir aos pares, descaracterizando assim qualquer tipo de correlação.

Se comparado com o caso não correlacionado, o gráfico da figura 1.2(a) apresenta uma redução na flutuação próximo à região de energia $E = 1.0$. Isto é um indício de que os estados com este valor de energia são de natureza estendida.

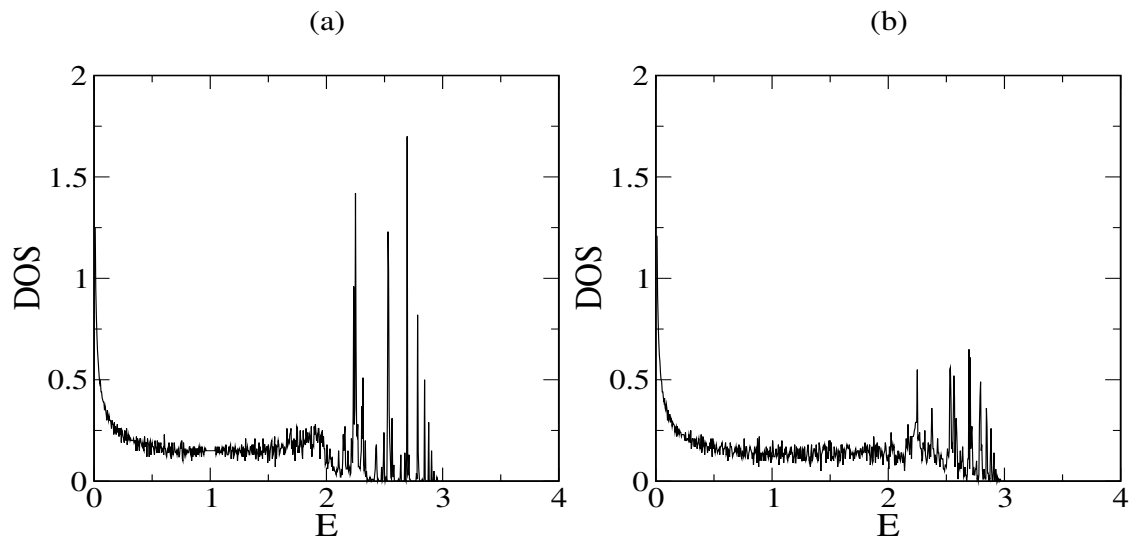


Figura 2.1: Densidade de Estados para (a) uma cadeia com desordem dimerizada, com $J_A = 1.5$ e $J_B = 1.0$ e $N = 10^6$. Se compararmos com a DOS para uma cadeia desordenada sem a correlação (b) vemos uma redução na flutuação na região próxima à energia $E = 1.0$.

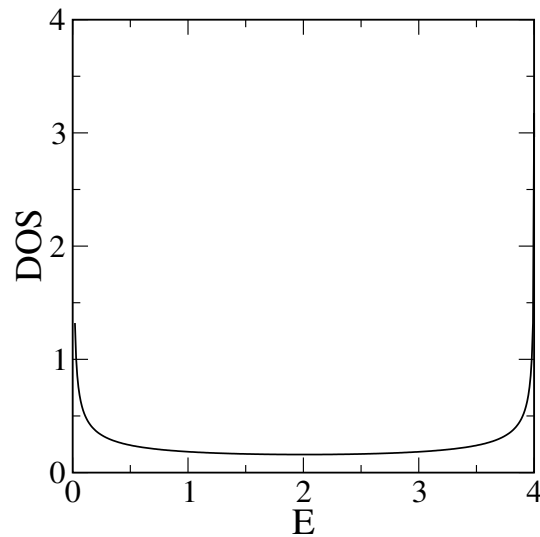


Figura 2.2: Densidade de estados de 1 mágnon em cadeia sem desordem ($J = 1.0$).

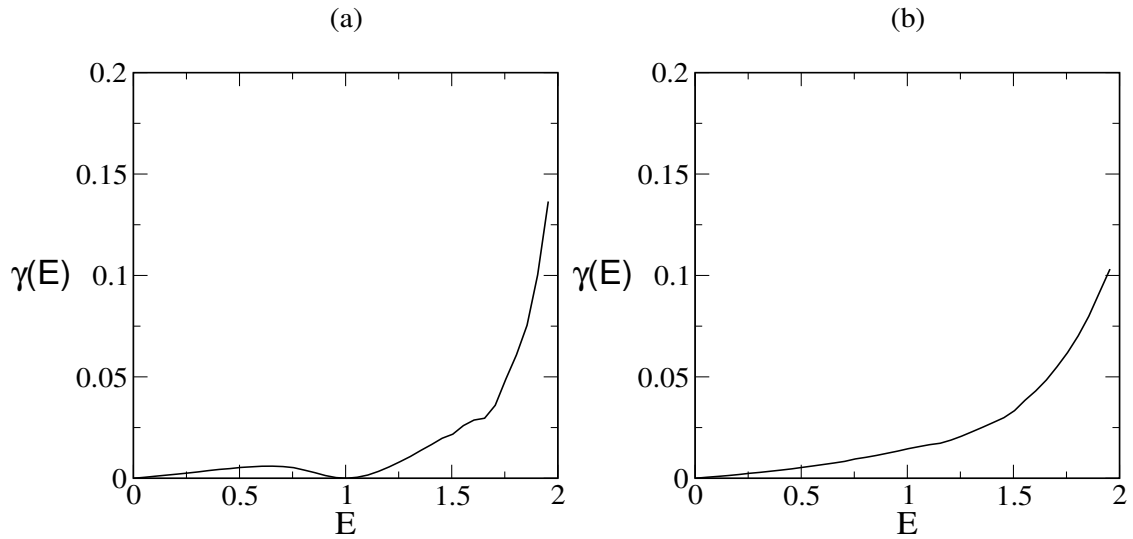


Figura 2.3: Expoente de Lyapunov para cadeia dimerizado (a) e não correlacionada (par-aleatório) (b). Em (a) temos que o expoente de Lyapunov vai a zero próximo de $E = 1.0$, comprovando a existência de estados estendidos no centro da banda.

Podemos chegar a esta conclusão quando comparamos este resultado com o gráfico da DOS para o caso puro (figura 2.2). Vimos que para este caso a DOS não possui flutuação, de forma que a particularidade encontrada na figura 2.1(a) mostra um comportamento típico de uma cadeia ordenada, ou seja, apresenta estados estendidos.

A fim de confirmar nossa hipótese inicial, calculamos então o expoente de Lyapunov para as mesmas cadeias, como é mostrado na figura 2.3.

Novamente a região próxima à energia $E = 1.0$, para o caso dimerizado, apresenta uma diferença de comportamento em comparação com o caso não correlacionado. Neste ponto o expoente de Lyapunov vai a zero, caracterizando a existência de estados estendidos nesta região de energia.

Assim como foi feito para o caso eletrônico, vamos analisar o comportamento

da matriz de transferência relacionada com os sítios dimerizados. Suponha que o spin em $l - 1$ seja conectado ao spin do sítio l pela constante de troca $J_{l-1,l} = J_B$. Devido á imposição da correlação, o mesmo vai ocorrer entre os sítios l e $l + 1$, ou seja, $J_{l,l+1} = J_B$. Assim, a matriz de transferência T_l será:

$$T_l = \begin{pmatrix} C_l & -A_l \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{J_B - 2\epsilon}{J_B} & -\frac{J_B}{J_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

para $\epsilon = J_B$, a matriz T_l fica da forma:

$$T_l = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

Assim como no caso eletrônico, a matriz de transferência T_l irá modificar apenas a fase da função de onda, ou seja, nos sítios dimerizados a função de onda não é espalhada, impossibilitando a existência de estados localizados para essa energia.

É importante ressaltar que em cadeias ferromagnéticas 1D desordenadas existem estados estendidos também para $E = 0$, independente da grau e do tipo de desordem. Isso pode ser facilmente observado na figura 2.3. O expoente de Lyapunov se anula para este valor de energia em ambos os casos. Isso ocorre por que, nessa faixa de energia, o comprimento de onda é muito grande, de forma que a função de onda não chega a perceber a presença da desordem. Os estados estendidos de 1 mágnon gerados pela presença dos dímeros não tem relação com este fato.

2.4.2 Caso Dinâmico

Aqui investigaremos o efeito da correlação tipo dímero no comportamento dinâmico dos estados de 1 mágnon. O estudo da dinâmica de ondas de spins foi realizado por Evangelou e Katsamos [38] em cadeias com desordem não correlacionada que obedecem uma distribuição de probabilidade normalizada tipo lei de potência $P(J) = (1 - \delta)J^{-\delta}$, onde os valores de J pertencem ao intervalo $(0, 1)$. A partir do cálculo do desvio médio quadrático $\sigma^2(t)$, foi possível estimar o alargamento do pacote de onda no tempo e foi constatado que, se a distribuição de probabilidade para os acoplamentos tem primeiro momento $\langle 1/J \rangle$ não divergente, o desvio médio quadrático apresenta, para tempos longos, comportamento temporal super-difusivo, ou seja, $\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$. Para tempos curtos a dinâmica é balística ($\sigma^2(t) \propto t^2$) já que neste intervalo de tempo o pacote ainda não expandiu o suficiente para "sentir" a presença da desordem. Portanto, a difusão balística está associada à ausência de desordem.

O desvio médio quadrático do mágnon é calculado através da integração numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = H |\phi(t)\rangle \quad (2.40)$$

onde H é o hamiltoniano de Heisenberg (2.2) e $\hbar = 1$. Utilizando a expansão (2.12), podemos escrever a equação (2.40) da forma:

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = (J_{n,n+1} + J_{n-1,n})f_n(t) - J_{n-1,n}f_{n-1}(t) - J_{n,n+1}f_{n+1}(t) \quad (2.41)$$

Esta equação diferencial pode ser resolvida numericamente através do algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem com incrementos de tempo iguais a 0,01 cujo

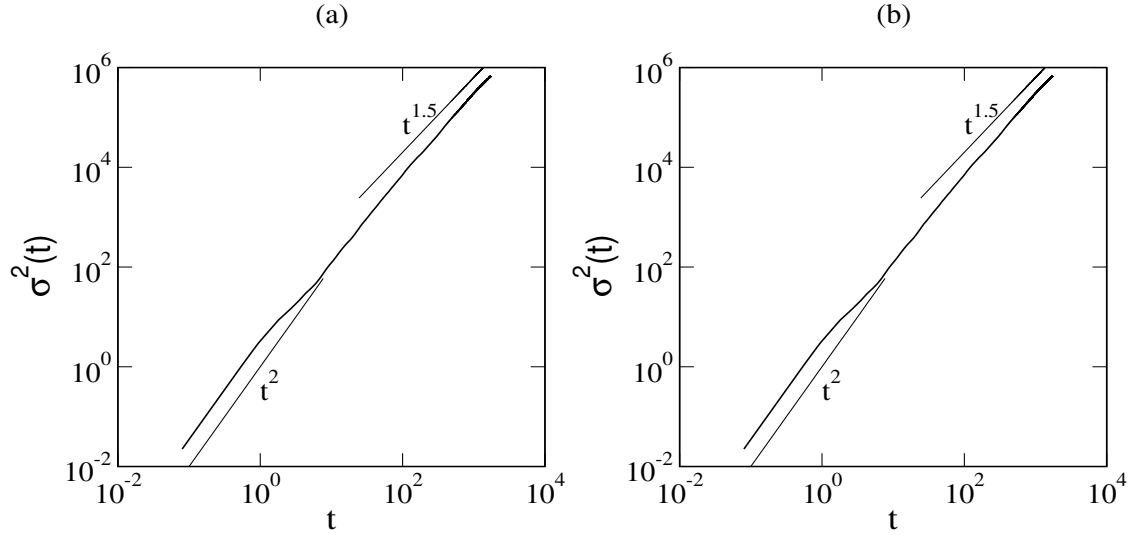


Figura 2.4: Comportamento dinâmico do desvio médio quadrático $\sigma^2(t)$ para (a) desordem dimerizada e (b) desordem não correlacionada. A presença de dímeros não altera do comportamento dinâmico do pacote.

erro estimado é da ordem de 10^{-8} . Este algoritmo é suficientemente rápido e nos permite realizar cálculos para cadeias com até $N = 10^4$. O estado inicial consiste de uma excitação no spin localizado no sítio central ($|\psi(t=0)\rangle = |N/2\rangle$) relativo ao estado fundamental, ou seja, a função de onda é uma delta centrada no sítio $N/2$. De forma iterativa, o algoritmo de Runge-Kutta calcula as amplitudes de probabilidade f_n após cada incremento de tempo. A partir desses resultados, o desvio médio quadrático é obtido através de expressão abaixo:

$$\sigma^2(t) = \sum_n (n - n_0)^2 f_n(t) f_n^*(t) \quad (2.42)$$

onde n_0 é a posição média do mágnon em cada instante de tempo.

Como foi mostrado anteriormente, a presença de dímeros na cadeia faz surgir

auto-estados estendidos na centro da banda. Levando em consideração este fato, o comportamento dinâmico da cadeia estudado aqui poderia apresentar uma pequena diferença em comparação com o caso não correlacionado obtido em [38], já que auto-estados estendidos estão relacionados à falta de desordem, que por sua vez leva a um comportamento balístico. Foi visto no entanto que que esta previsão não se confirmou, os resultados (figura 2.4) mostraram no entanto um comportamento semelhante para ambos os casos.

Apesar da presença de dímeros na cadeia, o comportamento dinâmico não foi alterado, mostrando que o regime de difusão do mágnon depende apenas da não divergência de $\langle 1/J \rangle$. Como nossa cadeia possui apenas dois valores permitidos para as constantes de troca ($J_A = 1.5$ e $J_B = 1.0$), temos um valor aproximado para $\langle 1/J \rangle$ de 0.888, o que está de acordo com os resultados em [38].

Capítulo 3

Excitação de 2 Mágns em Cadeias Desordenadas

3.1 Interação Entre Mágns

O estudo dos estados de 2 mágns leva em consideração um elemento não presente no caso de 1 mágno: A Interação. Como foi elucidado no capítulo de introdução, sabe-se que a interação entre elétrons tem relevante contribuição no comportamento de sistemas eletrônicos, pois pode induzir também uma transição metal-isolante. Para o caso magnético, a interação entre as ondas de spin desempenha um papel importante na determinação das propriedades termodinâmicas dos materiais em baixas temperaturas e o estudo deste elemento pode trazer novos resultados para o campo da matéria condensada.

Estudos pioneiros sobre os efeitos das interações entre ondas de spins em cadeias unidimensionais foram feitos por Bethe [51], mostrando que, além das ondas não-interagentes de Bloch, existem excitações nas quais um bloco de dois ou mais

spins desviados transladam juntos pela cadeia (*estados ligados*). O metodo utilizado por Bethe, no entanto, nao era de facil aplicacao para o modelo tridimensional. Mais tarde, um novo metodo foi utilizado por Holstein e Primakoff [52]. Considerando a acao de um campo magnetico externo, eles adotaram um determinado conjunto de coordenadas para descrever os estados quanticos que transformava o hamiltoniano em duas partes: uma quadratica em amplitude, relacionada com o comportamento nao interagente das ondas de spin, e uma outra de ordem superior, consequencia dos efeitos da interacao.

Utilizando um conjunto de vetores nao ortogonais para representar os estados das ondas de spins, Dyson [53] constatou a existencia de dois tipos de interacao: A Cinematica e a Dinamica. A primeira ocorre por razoes estatsticas, em decorrencia do fato de haver um numero limite ($2S$) de spins desviados associados a cada stio. Devido a este fato, um possivel *crossover* entre as funcoes de onda de desvio unico proporciona a acao desta interacao. Como consequencia da existencia da parte nao diagonal do hamiltoniano (2.2), surge a interacao Dinamica. Dyson mostrou que, no limite de comprimentos de onda longos, os termos nao diagonais sao quase nulos, de forma que os magnons passam a agir em um regime quase nao interagente.

3.2 Auto-Estados de 2 Magnons em Cadeias Ordenadas: Estados Ligados

Desvios gerados em dois spins de uma cadeia ferromagnetica a partir do seu estado fundamental gera o estados de 2-magnons. Um tratamento analtico destes estados e possivel, por exemplo, para uma cadeia pura, onde a constante de troca (J) e a mesma para todos os pares de spin da cadeia. Um estudo deste sistema foi feito por

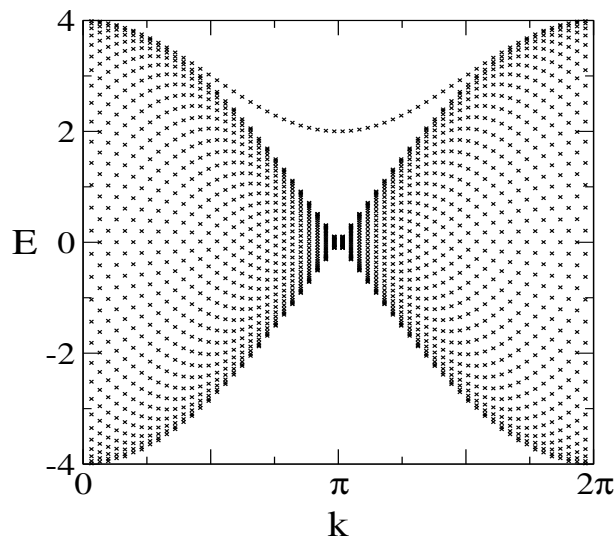


Figura 3.1: Autovalores de H_1 como funcao do momento total (k) para uma cadeia fechada de 61 stios

Se calcularmos os autovalores de H_1 para os demais valores de k obtemos o grfico mostrado na figura 3.1. A escolha da base utilizada aqui possibilita uma identificacao mais clara dos demais estados ligados, que so representados pelos estados de maior autovalor para cada k . Para a regio de baixa energia a distincao entre os estados ligados e os demais no  muito clara. Uma melhor visualizacao pode ser feita atravs da distncia mdia entre os spins desviados nos estados ligados de cada k , como mostrado na figura 3.2. Nota-se que para $k = 0$ o bloco de spins unidos que caracteriza tais estados possui uma distncia mdia de $N/4$. Esta distncia diminui a medida que k se aproxima de π , onde adquire valor unitrio.

A energia dos estados ligados tambm  obtida de forma analtica. Definindo os auto-estados da forma $|\psi\rangle = \sum_{i < j} f_{i,j} S_i^- S_j^- |\psi_0\rangle$ e utilizando uma escolha adequada de coordenadas, a equao que determina os valores dos coeficientes f

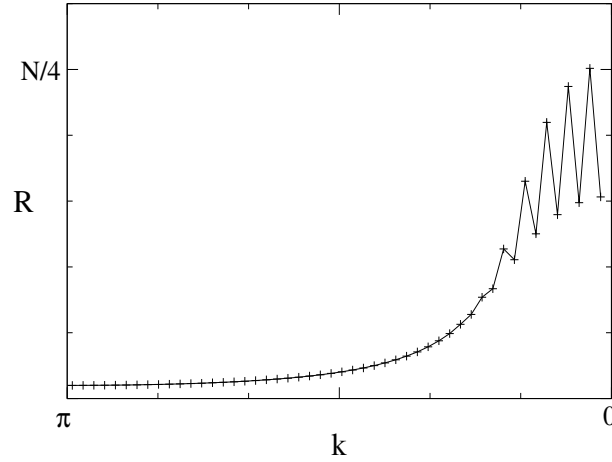


Figura 3.2: Distância média entre os spins desviados dos estados de maior autovalor como função do momento total (k) para $N = 101$.

será:

$$\begin{aligned} & \left[E - E_0 - 2sJ \sum_{\vec{\delta}} \left(1 - \cos \frac{\vec{K} \cdot \vec{\delta}}{2} \cos \vec{q} \cdot \vec{\delta} \right) \right] f(\vec{q}) \\ & = \frac{J}{N} \sum_{\vec{\delta}} \cos \vec{q} \cdot \vec{\delta} \sum_{\vec{k}} \left(\cos \frac{\vec{K} \cdot \vec{\delta}}{2} \cdot \vec{\delta} - \cos \vec{k} \cdot \vec{\delta} \right) f(\vec{k}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde os vetores \vec{K} e \vec{q} , estão relacionados com os números de onda k e k' de cada mágnon da forma:

$$\vec{K} = \vec{k} + \vec{k}' \quad \vec{q} = \frac{\vec{k} - \vec{k}'}{2}$$

e o vetor $\vec{\delta}$ conecta o spin central com seus z' s vizinhos próximos.

Assumindo $\cos(\vec{K} \cdot \vec{\delta}/2) \geq 0$, a energia dos "estados não perturbados" será limitada entre um mínimo em $\vec{q} = 0$ e um máximo em $q_x = \pi/a$, onde x representa

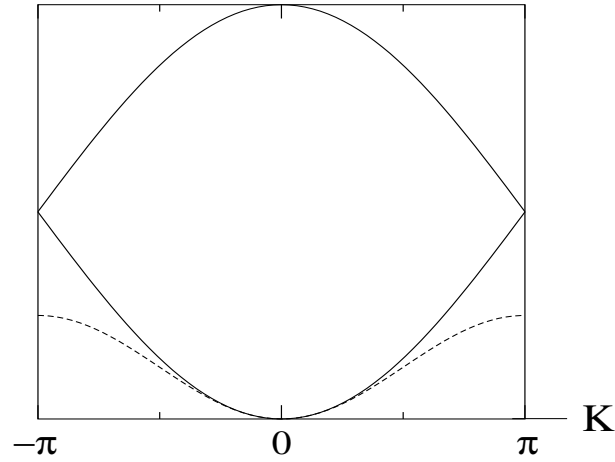


Figura 3.3: Energia dos estados de 2-magnons em cadeia linear. As energias representadas pela linha tracejada estao relacionadas com os estados ligados. A regiao delimitada pelas linhas contınuas contem as energias dos demais estados.

todos os $z/2$ eixos cartesianos. Os estados ligados, caso existam, devem possuir energia fora destes limites, ou seja, menores que:

$$E_0 + 2sJ \sum_{\vec{\delta}} \left(1 - \cos \vec{k} \cdot \vec{\delta} \right)$$

ou maiores que :

$$E_0 + 2sJ \sum_{\vec{\delta}} \left(1 + \cos \vec{k} \cdot \vec{\delta} \right)$$

Partindo desse princıpio, obtem-se uma expressao para a energia dos estados ligados dada por:

$$E = E_0 + J \operatorname{sen}^2 \left(\frac{1}{2} K a \right) \quad (3.3)$$

O grafico da figura 3.3 mostra os valores de energia dos estados de 2-magnons em cadeia linear. Assim como foi visto no exemplo anterior, a distincao entre os

estados ligados é claramente notada.

3.3 Auto-estados de 2-Mágnons em Cadeias Desordenadas

O principal objetivo deste capítulo é estudar o comportamento estático e dinâmico das excitações de 2-mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas. Vamos acrescentar desordem na cadeia e determinar uma relação de recorrência para obter os auto-estados. Com o mesmo formalismo matemático utilizado no estudo de 1 mágnon, vamos sugerir uma função de onda para escrever os auto-estados como uma combinação linear de vetores da forma:

$$|\phi_{n_1, n_2}\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \quad (3.4)$$

onde $S_{n_1}^-$ e $S_{n_2}^-$ são operadores que promovem um desvio nos spins dos sítios n_1 e n_2 , e $|\phi_0\rangle$ representa o estado fundamental da cadeia ferromagnética. Para desvios ocorridos em sítios vizinhos podemos substituir os índices por n e $n + 1$. Vamos portanto escrever os auto-estados da forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{l, k} f_{l, k} |\phi_{l, k}\rangle \quad (3.5)$$

onde $f_{l, k}$ representa a amplitude de probabilidade de ocorrer desvios nos sítios l e k simultaneamente.

A equação de Schrödinger independente do tempo toma a forma

$$\sum_{l,k} f_{l,k} H |\phi_{l,k}\rangle = E \sum_{l,k} f_{l,k} |\phi_{l,k}\rangle \quad (3.6)$$

Fazendo $H |\phi_{l,k}\rangle$ separadamente e tomando de início desvios em sítios vizinhos, ou seja, $l = n$ e $k = n + 1$ resulta em:

$$H |\phi_{n,n+1}\rangle = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} (S_n^- S_{n+1}^-) |\phi_0\rangle \quad (3.7)$$

Utilizando as relações (2.4) temos:

$$\begin{aligned} H |\phi_{n,n+1}\rangle &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} [S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2} (S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)] S_n^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \\ &= - \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z S_n^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle}_{Q_1} - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- S_n^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle}_{Q_2} \\ &\quad - \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ S_n^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle}_{Q_3} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Resolvendo cada somatório separadamente:

$$\begin{aligned} Q_1 &= - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_{n,n+1}\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_{n,n+1}\rangle - J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_{n,n+1}\rangle \\ &\quad - J_{n+1,n+2} S_{n+1}^z S_{n+2}^z |\phi_{n,n+1}\rangle - \sum_{l=n+2}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_{n,n+1}\rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde os operadores que estão nos somatórios irão agir apenas nos spins não desvia-

dos, retornando assim o autovalor S . Das relações (2.4) encontramos:

$$Q_1 = \underbrace{-\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n,n+1}\rangle - \sum_{l=n+2}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n,n+1}\rangle - J_{n-1,n} (S^2 - S) |\phi_{n,n+1}\rangle}_{Q'_1} - J_{n,n+1} (S - 1) S_n^z S_n^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle - J_{n+1,n+2} (S^2 - S) |\phi_{n,n+1}\rangle \quad (3.10)$$

Aplicando novamente as relações (2.4) para o terceiro termo:

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q'_1 - (J_{n,n+1} + J_{n+1,n+2}) (S^2 - S) |\phi_{n,n+1}\rangle \\ &\quad - J_{n,n+1} (S - 1) (S_n^- S_n^z - S_n^-) S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \\ Q_1 &= Q'_1 - (J_{n,n+1} + J_{n+1,n+2}) (S^2 - S) |\phi_{n,n+1}\rangle - J_{n,n+1} (S - 1)^2 |\phi_{n,n+1}\rangle \\ Q_1 &= Q'_1 - (J_{n-1,n} + J_{n,n+1} + J_{n+1,n+2}) S^2 |\phi_{n,n+1}\rangle \\ &\quad + (J_{n-1,n} + 2J_{n,n+1} + J_{n+1,n+2}) S |\phi_{n,n+1}\rangle + J_{n,n+1} |\phi_{n,n+1}\rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

somando os dois primeiros termos obtemos a energia do estado fundamental,

$-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n,n+1}\rangle = E_0 |\phi_{n,n+1}\rangle$. Fazendo $S = 1/2$, obtemos finalmente Q_1 :

$$Q_1 = E_0 |\phi_{n,n+1}\rangle + \frac{1}{2} (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2}) |\phi_{n,n+1}\rangle \quad (3.12)$$

Das relações (2.4), podemos escrever Q_2 da forma:

$$\begin{aligned} Q_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_n^- S_{l+1}^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} (2S_l^z \delta_{ln} + S_n^- S_l^+) S_{l+1}^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde, para $l = n$:

$$Q_2 = -J_{n,n+1}S_n^z - S_n^z - |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_n^- S_l^+ S_{l+1}^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle >$$

$$Q_2 = -J_{n,n+1}S_n^z - S_n^z - |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} 2S_n^- S_l^z \delta_{l,n+1} S_{l+1}^- |\phi_0\rangle >$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_n^- S_{n+1}^- S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_0\rangle > \quad (3.14)$$

Sabendo que $S_{n+1}^- S_{n+1}^- |\phi_0\rangle = 0$ e $S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_0\rangle = 0$, encontramos:

$$Q_2 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} 2S_n^- S_l^z \delta_{l,n+1} S_{l+1}^- |\phi_0\rangle > \quad (3.15)$$

Então, para $l = n + 1$, obtemos para o somatório Q_2 :

$$Q_2 = -J_{n+1,n+2} S_n^- S_{n+1}^z S_{n+2}^- |\phi_0\rangle = -J_{n+1,n+2} S |\phi_{n,n+2}\rangle > \quad (3.16)$$

Da mesma forma que foi feito para Q_2 , vamos reescrever Q_3 utilizando as relações (2.4):

$$Q_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} 2S_l^- S_l^z \delta_{n,l+1} S_{n+1}^- |\phi_0\rangle > -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_n^- S_{l+1}^+ S_{n+1}^+ |\phi_0\rangle > \quad (3.17)$$

Para $l + 1 = n$, e usando novamente as relações (2.4), temos:

$$\begin{aligned} Q_3 &= -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z S_{n+1}^- |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_n^- 2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n+1} |\phi_0\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_n^- S_{n+1}^- S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

Sabendo que $S_n^- S_n^- |\phi_0\rangle = 0$ e $S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle = 0$, o termo para $l + 1 = n + 1$ fica:

$$Q_3 = -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z S_{n+1}^- |\phi_0\rangle = J_{n-1,n} S |\phi_{n-1,n+1}\rangle \quad (3.19)$$

Substituindo (3.12)(3.16)(3.19) em (3.8) e fazendo $S = 1/2$ temos finalmente que:

$$\begin{aligned} H |\phi_{n,n+1}\rangle &= E_0 |\phi_{n,n+1}\rangle + \frac{1}{2} (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2}) |\phi_{n,n+1}\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} J_{n+1,n+2} |\phi_{n,n+2}\rangle - \frac{1}{2} J_{n-1,n} |\phi_{n-1,n+1}\rangle \end{aligned} \quad (3.20)$$

Com este resultado, a equação de Schrödinger fica:

$$\begin{aligned} E_0 \sum_{l,k} f_{l,k} |\phi_{n,n+1}\rangle &+ \frac{1}{2} \sum_{l,k} f_{l,k} (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2}) |\phi_{n,n+1}\rangle \\ &- \frac{1}{2} \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n+1,n+2} |\phi_{n,n+2}\rangle > - \frac{1}{2} \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n-1,n} |\phi_{n-1,n+1}\rangle \\ &= E \sum_{l,k} f_{l,k} |\phi_{n,n+1}\rangle \end{aligned} \quad (3.21)$$

Como o cálculo foi feito apenas para desvios em sítios vizinhos, alguns termos do somatório são nulos. Excluindo estes termos podemos escrever (3.21) na forma de

um sistema de equações do tipo:

$$\begin{aligned}
 E f_{n,n+1} &= E_0 f_{n,n+1} + \frac{1}{2}(J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})f_{n,n+1} - \frac{1}{2}J_{n+1,n+2}f_{n,n+2} \\
 &\quad - \frac{1}{2}J_{n-1,n}f_{n-1,n+1}
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

E finalmente:

$$(J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})f_{n,n+1} - J_{n+1,n+2}f_{n,n+2} - J_{n-1,n}f_{n-1,n+1} = 2\epsilon f_{n,n+1} \tag{3.23}$$

onde $\epsilon = E - E_0$ é a energia de excitação.

Resta obter a equação para o caso onde os desvios ocorrem em sítios não vizinhos, ou seja, $n_2 \neq n_1 + 1$. Assim como foi feito para o caso anterior, calculamos inicialmente $H|\phi_{n_1,n_2}\rangle$ e substituindo em (3.6) obtemos a equação desejada:

$$\begin{aligned}
 H|\phi_{n_1,n_2}\rangle &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1}[S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)]S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \\
 &= -\underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle}_{Q_4} - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle}_{Q_5} \\
 &\quad - \underbrace{\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle}_{Q_6}
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Calculando separadamente cada somatório, obtemos:

$$\begin{aligned}
Q_4 = & - \sum_{l=1}^{n_1-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle - \sum_{l=n_1+1}^{n_2-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& - \sum_{l=n_2+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle - J_{n_1-1, n_1} S_{n_1-1}^z S_{n_1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& - J_{n_1, n_1+1} S_{n_1}^z S_{n_1+1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle - J_{n_2-1, n_2} S_{n_2-1}^z S_{n_2}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& - J_{n_2, n_2+1} S_{n_2}^z S_{n_2+1}^z |\phi_{n_1, n_2} \rangle
\end{aligned} \tag{3.25}$$

na qual, o operador S_l^z , quando age sobre um spin que não sofreu desvio de seu estado fundamental, retorna autovalor S . Assim:

$$\begin{aligned}
Q_4 = & \sum_{l=1}^{n_1-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle - \sum_{l=n_1+1}^{n_2-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle - \sum_{l=n_2+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& - (J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1}) S (S_{n_1}^- S_{n_1}^z - S_{n_1}^-) S_{n_2}^- |\phi_0 \rangle \\
& - (J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1}) S (S_{n_2}^- S_{n_2}^z - S_{n_2}^-) S_{n_1}^- |\phi_0 \rangle
\end{aligned} \tag{3.26}$$

$$\begin{aligned}
Q_4 = & \sum_{l=1}^{n_1-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle - \sum_{l=n_1+1}^{n_2-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle - \sum_{l=n_2+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& - [(J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1}) S^2] |\phi_{n_1, n_2} \rangle \\
& + [(J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1}) S] |\phi_{n_1, n_2} \rangle
\end{aligned} \tag{3.27}$$

O segundo termo completa o somatório, tal que $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_{n_1, n_2} \rangle = E_0 |\phi_{n_1, n_2} \rangle$.

Temos portanto:

$$Q_4 = E_0 |\phi_{n_1, n_2} \rangle + [(J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1}) S] |\phi_{n_1, n_2} \rangle \tag{3.28}$$

Para Q_5 , podemos escrevê-lo da forma:

$$\begin{aligned}
Q_5 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ [S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} (2S_l^z \delta_{l,n_1} + S_{n_1}^- S_l^+) S_{n_2}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \\
&= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z \delta_{l,n_1} S_{n_2}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{n_1}^- S_l^+ S_{n_2}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \quad (3.29)
\end{aligned}$$

Fazendo $l = n_1$:

$$\begin{aligned}
Q_5 &= -J_{n_1,n_1+1} S_{n_1}^z S_{n_2}^- S_{n_1+1}^- | \phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{n_1}^- S_l^+ S_{n_2}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \\
&= -J_{n_1,n_1+1} S_{n_1}^z S_{n_2}^- S_{n_1+1}^- | \phi_0 \rangle - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z \delta_{l,n_2} S_{n_1}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{n_2}^- S_l^+ S_{n_1}^- S_{l+1}^- | \phi_0 \rangle \quad (3.30)
\end{aligned}$$

e, repetindo o procedimento para $l = n_2$:

$$\begin{aligned}
Q_5 &= J_{n_1,n_1+1} S | \phi_{n_1+1,n_2} \rangle - J_{n_2,n_2+1} S | \phi_{n_1,n_2+1} \rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} 2S_l^z \delta_{l,l+1} S_{n_2}^- | \phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{n_2}^- S_{l+1}^- S_l^+ | \phi_0 \rangle \quad (3.31)
\end{aligned}$$

Os dois somatórios são nulos. Temos portanto:

$$Q_5 = -J_{n_1,n_1+1} S | \phi_{n_1+1,n_2} \rangle - J_{n_2,n_2+1} S | \phi_{n_1,n_2+1} \rangle \quad (3.32)$$

O cálculo de Q_6 é semelhante:

$$Q_6 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} (2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n_1} + S_{n_1}^- S_{l+1}^+) S_l^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \quad (3.33)$$

onde, fazendo $n_1 = l + 1$ temos:

$$\begin{aligned} Q_6 &= -J_{n_1-1,n_1} S_{n_1-1}^- S_{n_1}^z S_{n_2}^- |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{n_1}^- S_{l+1}^+ S_l^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n_1-1,n_1} S_{n_1-1}^- S_{n_1}^z S_{n_2}^- |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^z \delta_{l+1,n_2} S_l^- S_{n_1}^- |\phi_0\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.34)$$

Sabe-se $S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle = 0$, dessa forma o último somatório se anula. Fazendo então $n_2 = l + 1$ temos:

$$\begin{aligned} Q_6 &= -J_{n_1,n_1-1} S |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle - J_{n_2-1,n_2} S_{n_2-1}^- S_{n_1}^- S_{n_2}^z |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n_1,n_1-1} S |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle - J_{n_2-1,n_2} S |\phi_{n_1,n_2-1}\rangle \end{aligned} \quad (3.35)$$

A equação de Schrödinger fica:

$$\begin{aligned} E_0 \sum_{l,k} f_{l,k} |\phi_{n_1,n_2}\rangle + \sum_{l,k} f_{l,k} (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1}) S |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\ - \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n_1,n_1+1} S |\phi_{n_1+1,n_2}\rangle - \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2+1}\rangle \\ - \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n_1,n_1-1} S |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle - \sum_{l,k} f_{l,k} J_{n_2-1,n_2} S |\phi_{n_1,n_2-1}\rangle \\ = E \sum_{l,k} f_{l,k} |\phi_{n_1,n_2}\rangle \end{aligned} \quad (3.36)$$

Para $S = 1/2$ e considerando apenas os termos não nulos dos somatórios, podemos escrevê-lo como um sistema de equações da forma:

$$2\epsilon f_{n_1, n_2} = (J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1})f_{n_1, n_2} - J_{n_1, n_1+1}f_{n_2, n_1+1} \\ - J_{n_2, n_2+1}f_{n_1, n_2+1} - J_{n_1, n_1-1}f_{n_2, n_1-1} - J_{n_2-1, n_2}f_{n_1, n_2-1} \quad (3.37)$$

A relação de recorrência para 2 mágnons é portanto dividida em duas partes: a equação (3.23), que se aplica aos desvios ocorridos em sítios vizinhos, e (3.37), quando os desvios ocorrem em sítios não vizinhos. Desta forma podemos obter os estados estacionários dos estados de 2 mágnons em cadeias desordenadas em sua totalidade.

Para as duas situações acima, temos que $n_2 > n_1$, com $n_1 = 1, 2, 3, \dots, N-1$ e $n_2 = 2, 3, 4, \dots, N$ de forma que, para uma cadeia fechada, o número de coeficientes f_{n_1, n_2} é de $N(N-1)/2$.

3.4 Resultados - Caso Estacionário

A partir da equação de recorrência, vários métodos podem ser empregados para se obter as mais diversas quantidades. Em nossos estudos utilizamos o método da Diagonalização Direta, onde o sistema 3.37 é resolvido computacionalmente e as amplitudes de probabilidade são obtidas de forma exata através de um algoritmo de diagonalização de matrizes. Apesar da boa precisão dos resultados, o custo computacional deste algoritmo é alto. Como as matrizes do problema de 2 mágnon possuem dimensão $N(N-1)/2 \times N(N-1)/2$, torna-se inviável realizar simulações de cadeias grandes. Além do mais, estamos tratando de sistemas desordenados, o que se faz necessário adotar um *emsemble* de amostras para se obter um resultado

médio do comportamento. Apesar disso, tal método foi adotado pois possibilita a obtenção dos coeficientes da função de onda dos estados estacionários, necessários para a obtenção de quantidades importantes para a caracterização da natureza dos estados de 2-mágnons.

As cadeias aqui simuladas apresentam desordem do tipo "par aleatório", onde as constantes de troca (J_{n_1, n_2}) assumem apenas dois valores permitidos J_A e J_B , distribuídos aleatoriamente sobre os acoplamentos da cadeia, com probabilidade p e $1 - p$ respectivamente. Em todos os resultados apresentados, foram utilizados valores de $J_A = 1.0$ e $J_B = 2.0$, ambos com a mesma probabilidade $p = 1/2$, em um *ensemble* de 1000 amostras para as cadeias com $N = 21$, 500 amostras para $N = 41$ e 250 amostras par $N = 81$.

3.4.1 Distância Média

Uma das medidas calculadas foi a distância média d entre os spins desviados, a qual para um dado auto-estado é definido por:

$$\begin{aligned} d_m &= \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N |n_1 - n_2| \langle \phi_{n_1, n_2} | \phi_{n_1, n_2} \rangle \\ &= \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N |n_1 - n_2| |f_{n_1, n_2}|^2 \end{aligned} \quad (3.38)$$

A figura 3.4 mostra a distância média $d(E)$ entre os spins desviados, levando-se em consideração todos os auto-estados com energia dentro de um pequeno intervalo centrado em E . Em cadeias com condições de contorno abertas, a distância média aproxima-se de um valor constante de $\langle d \rangle_o = N/3$, enquanto que para cadeias com condições periódicas de contorno, isto reduz para $\langle d \rangle_p = N/4$. A figura 3.4 exhibe

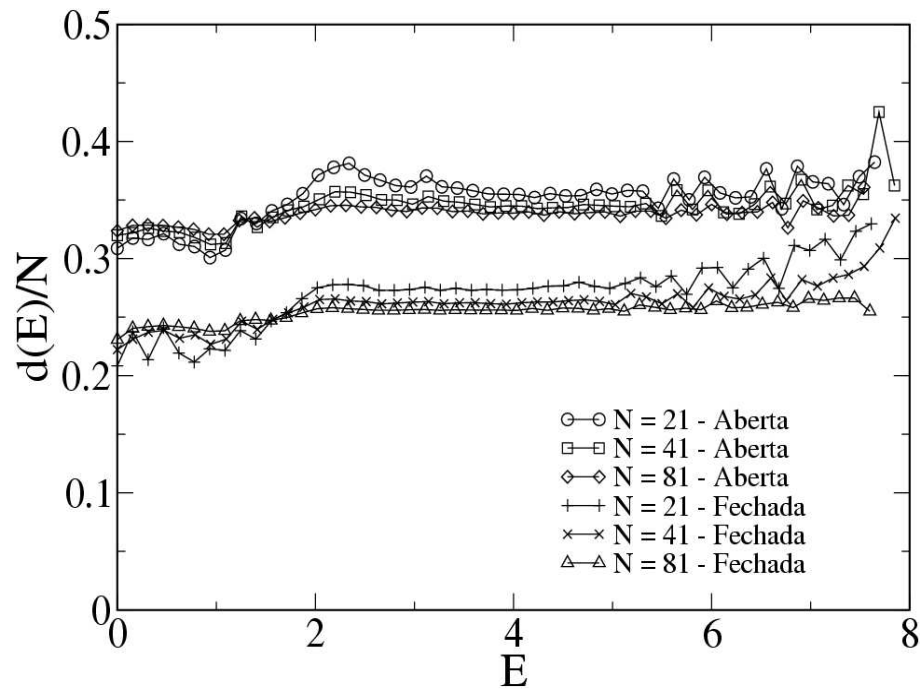


Figura 3.4: Distância média dos mágnons nos auto-estados de 2 mágnon para cadeia aberta e cadeia fechada. A distância média se mantém praticamente constante em toda a banda

esta tendência mas com certas correções de tamanho-finito ocorrendo em direções distintas para auto-estados de altas e baixas energias. A correção de tamanho finito para distâncias maiores, observada em estados de alta energia em cadeias finitas, é devida principalmente ao fato de não ser permitido desvios duplos no mesmo sítio. Por outro lado, a correção para pequenas distâncias, observada em estados de baixa energia, surge de uma contribuição de estados ligados remanescente na região de baixa energia. O cruzamento em torno de $E = 2$ representa o limite da banda de estados ligados.

Podemos estimar os resultados obtidos aqui de forma analítica se consider-

armos uma cadeia muito grande, tal que o somatório possa ser substituído por uma integral. A expressão para a distância média então fica:

$$d_m = \int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 (n_2 - n_1) |f_{n_1, n_2}|^2 \quad (3.39)$$

sendo $n_2 > n_1$ podemos retirar o sinal de módulo se a ordem dos termos da subtração for mantida da forma acima.

Para uma cadeia muito grande, é esperado que a distância média entre os spins desviados possa ser calculada assumindo que estes são localizados em sítios aleatórios. Este aspecto reflete o fato de que estados localizados de 1-mágnon, com uma energia particular, podem estar em distâncias arbitrárias. Como estamos tratando de uma média sobre muitas amostras, esta consideração nos possibilita adotar a hipótese de uma "função de onda média" estendida e uniforme, de forma a termos:

$$|f_{n_1, n_2}|^2 = C = \frac{1}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} \quad (3.40)$$

onde a integral dupla do denominador representa, dentro da aproximação feita, a dimensão do espaço de vetores $|\phi_{n_1, n_2}\rangle$. Substituindo (3.40) em (3.39):

$$d_m = \frac{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} \quad (3.41)$$

Calculando inicialmente para uma cadeia sem condições de periodicidade, a distância

média é dada de uma forma única para qualquer par de índices n_1 e n_2 :

$$\begin{aligned}
 d_m &= \frac{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = \frac{\int_0^N dn_1 \left[\frac{N^2}{2} - n_1 N - \frac{n_1^2}{2} + n_1^2 \right]}{\int_0^N dn_1 [N - n_1]} \\
 &= \frac{N^3/2 - N^3/2 - N^3/6 + N^3/3}{N^2 - N^2/2} = \frac{N^3/6}{N^2/2} = \frac{N}{3}
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Vemos portanto que nossas suposições estão de acordo com o resultado encontrado para cadeia aberta.

Utilizando o mesmo raciocínio, podemos fazer o mesmo cálculo para a cadeia com periodicidade, sendo que aqui teremos que impor na expressão esta condição. Para isso iremos dividir a integral em três partes. A figura 3.5 ajudará a compreender o raciocínio: os termos da integral pertencentes às regiões 1 e 2 apresentam distâncias menores que $N/2$, portanto o cálculo da distância para os pares n_1 e n_2 presentes nesta região será mantido. Já na região 3 a distância dos mágnons é sempre maior que $N/2$. Como a distância pode ser medida em dois sentidos, escolhemos o menor entre os dois valores, desta forma, se mantivermos a mesma expressão para essa região, não estaremos utilizando o valor adotado. Portanto, a integral na região 3 deve ser separada das demais e a expressão da distância passa a ser $N - (n_2 - n_1)$, temos então:

$$\begin{aligned}
 d_m &= \frac{\int_0^{N/2} dn_1 \int_{n_1}^{N/2+n_1} dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} + \frac{\int_{N/2}^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} \\
 &\quad + \frac{\int_0^{N/2} dn_1 \int_{n_1+N/2}^N dn_2 [N - (n_2 - n_1)]}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = R_1 + R_2
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

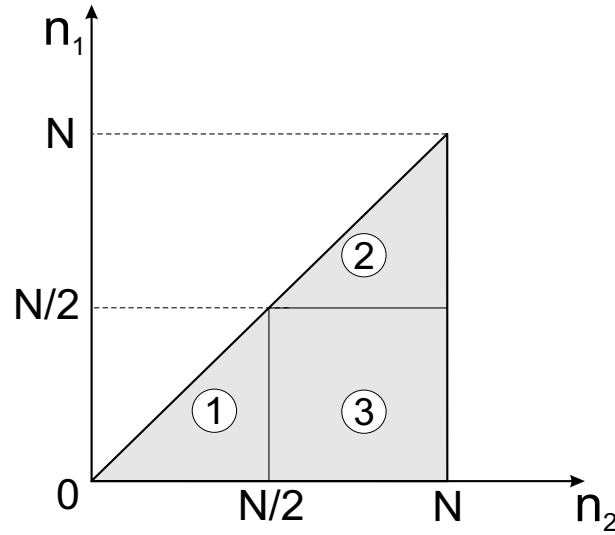


Figura 3.5: Diagrama que ilustra as imposições nos limites de integração devido á presença de condições periódicas de contorno

onde R_1 contém os dois primeiros termos, que pertencem às regiões 1 e 2, e R_2 o terceiro, pertencente à região 3. Calculando cada termo separadamente:

$$R_1 = \frac{\int_0^{N/2} dn_1 \int_{n_1}^{N/2+n_1} dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} + \frac{\int_{N/2}^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 (n_2 - n_1)}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{\int_0^{N/2} dn_1 N^2/8}{\int_0^N dn_1 [N - n_1]} + \frac{\int_{N/2}^N dn_1 [n_1^2 - Nn_1 + N^2/2]}{\int_0^N dn_1 [N - n_1]} \\ &= \frac{N^3/16}{N^2 - N^2/2} + \frac{N^3/48}{N^2 - N^2/2} = \frac{N}{8} + \frac{N}{24} = \frac{N}{6} \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned}
R_2 &= \frac{\int_0^{N/2} dn_1 \int_{n_1+N/2}^N dn_2 [N - (n_2 - n_1)]}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = \frac{\int_0^{N/2} dn_1 [N^2/8 - n_1^2/2]}{\int_0^N dn_1 [N - n_1]} \\
&= \frac{N^3/24}{N^2 - N^2/2} = \frac{N}{12}
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Temos portanto que:

$$d_m = \frac{N}{6} + \frac{N}{12} = \frac{N}{4} \tag{3.47}$$

Para ambos os casos nossas suposições foram satisfatórias, de forma que, se fosse possível diagonalizar matrizes ainda maiores, esta estimativa estaria ainda mais próxima dos resultados simulados.

3.4.2 Número de Participação

A fim de se estudar a distribuição espacial dos estados de 2-mágnons, calculamos a participação de cada auto-estado, definida como:

$$P = \frac{1}{\sum_{n_1, n_2}^N |f_{n_1, n_2}|^4}. \tag{3.48}$$

Para ilustrar a relação existente entre a participação e o grau de localização, vamos analisar o caso de uma cadeia pura, onde todos os estados são estendidos e possuem amplitudes de probabilidade iguais a $f_{n_1, n_2} = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)/2}}$. Se calcularmos a Participação para este caso teremos:

$$P = \frac{1}{\sum_{n_1, n_2}^N |f_{n_1, n_2}|^4} = \frac{1}{\sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N \frac{1}{[N(N-1)/2]^2}} = \frac{N(N-1)}{2} \tag{3.49}$$

Vemos portanto que P está relacionada com o número dos pares de sítios

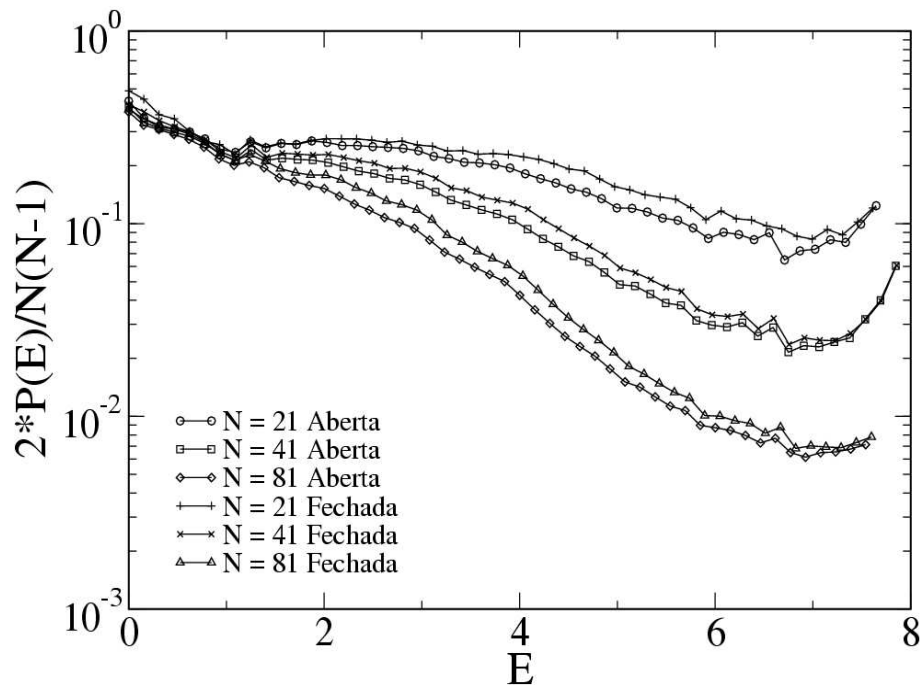


Figura 3.6: Razão de Participação para os auto-estados de 2 mágnons. Em $E = 0$ os estados são estendidos. Para valores maiores de energia, $P(E)$ diminui, evidenciando a existência de estados localizados.

onde há probabilidade não nula de haver desvios. Como a função de onda em estados estendidos encontra-se espalhada por todos os possíveis pares de sítios da cadeia, a Participação é da ordem da dimensão do espaço de Hilbert. À medida que os estados são localizados, uma quantidade menor de pares de sítios apresenta probabilidade não nula de sofrer um desvio no spin, conseqüentemente a Participação para estes estados é menor.

Na figura 3.6 temos a participação média $P(E)$ normalizada, levando-se em consideração todos os estados dentro de uma pequena janela centrada em E . Para estados estendidos a participação deve escalar com N^2 . Os estados com compri-

mento de localização menores que o tamanho da cadeia possuem participação que independe do tamanho da cadeia. Nossos resultados mostram que os estados de altas energias são bem localizados, apresentando um comprimento de localização curto, sendo maior para estados de baixa energia. O colapso de dados de cadeias de tamanhos distintos para pequenas energias de excitação indica que o comprimento de localização em uma cadeia infinita é maior que o tamanho das cadeias consideradas.

3.4.3 Extensão Espacial

Para melhor caracterizar esta distribuição espacial dos estados de 2-mágnon na cadeia ferromagnética desordenada, calculamos a função extensão espacial definida por:

$$\xi(E) = \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N |f_{n_1, n_2}|^2 \sqrt{(n_1 - \langle n_1^{(E)} \rangle)^2 - (n_2 - \langle n_2^{(E)} \rangle)^2} \quad (3.50)$$

onde

$$\langle n_{12}^{(E)} \rangle = \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N n_{12} |f_{n_1, n_2}|^2 \quad (3.51)$$

o qual fornece a medida do alargamento da função de onda no plano $n_1 \times n_2$. A extensão espacial média $\xi(E)$ de todos os estados de 2-mágnon em uma pequena janela centrada em E é mostrada na figura 3.7. Estes resultados mostram claramente que os estados de 2-mágnons de altas energias possuem uma extensão espacial relativamente pequena e que condições periódicas de contorno implicam em estados menos localizados. Esta tendência foi também evidenciada nos resultados da participação.

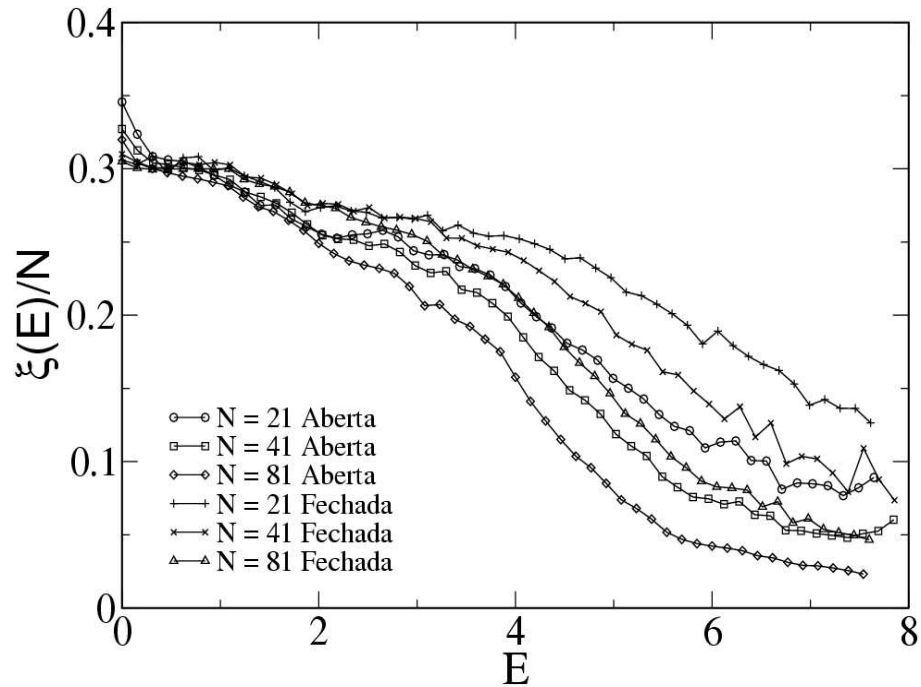


Figura 3.7: A Extensão Espacial apresenta um comportamento semelhante ao da Participação, pois tais quantidades são similares. Aqui comprovamos um aumento do grau de localização com o aumento da energia.

O colapso de dados em baixas energias reforça a larga extensão espacial dos estados menos energéticos, com $\xi(E \rightarrow 0)/N \simeq 0.3$.

3.4.4 Correlação

A interação efetiva entre os spins desviados nos estados de 2-mágnons pode ser numericamente estimada pelo cálculo da função de correlação de 2-pontos para cada auto-estado, escrita como:

$$\zeta(E) = \langle n_1 n_2 \rangle - \langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle \quad (3.52)$$

onde $\langle n_1 \rangle$ e $\langle n_2 \rangle$ são os valores médios de n_1 e n_2 respectivamente, dados pela expressão (3.51), e $\langle n_1 n_2 \rangle$ é dado por:

$$\langle n_1 n_2 \rangle = \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N n_1 \cdot n_2 |f_{n_1, n_2}|^2 \quad (3.53)$$

Fazendo uma estimativa analítica, da mesma forma que foi feito para a distância média, podemos ter uma noção de grandeza desta quantidade, que vai nos ajudar na análise dos resultados. Para isso vamos levantar as mesmas considerações utilizadas anteriormente.

Calculando primeiramente para um estado estendido, onde as amplitudes de probabilidade são iguais para todos os pares de sítios em uma cadeia suficientemente grande, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle n_1 \rangle &= \frac{\int_0^N dn_1 n_1 \int_{n_1}^N dn_2}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = \frac{\int_0^N dn_1 n_1 (N - n_1)}{\int_0^N dn_1 (N - n_1)} \\ &= \frac{N^3/2 - N^3/3}{N^2/2} = \frac{N}{3} \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \langle n_2 \rangle &= \frac{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2 n_2}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = \frac{\int_0^N dn_1 (N^2/2 - n_1^2/2)}{\int_0^N dn_1 (N - n_1)} \\ &= \frac{N^3/2 - N^3/6}{N^2/2} = \frac{2N}{3} \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned}
\langle n_1 n_2 \rangle &= \frac{\int_0^N dn_1 n_1 \int_{n_1}^N dn_2 n_2}{\int_0^N dn_1 \int_{n_1}^N dn_2} = \frac{\int_0^N dn_1 n_1 (N^2/2 - n_1^2/2)}{\int_0^N dn_1 (N - n_1)} \\
&= \frac{N^4/4 - N^4/8}{N^2/2} = \frac{N^2}{4}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

A função de correlação então fica:

$$\zeta(E) = \langle n_1 n_2 \rangle - \langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle = \frac{N^2}{4} - \frac{N}{3} \frac{2N}{3} = \frac{N^2}{36} \tag{3.57}$$

temos portanto que, para estados estendidos, a correlação apresenta um valor grande. Isso está perfeitamente de acordo, pois o vínculo de $n_2 > n_1$ promove forte correlação entre os spins desviados sempre que a extensão espacial da função de onda é grande.

Calculando agora para um estado totalmente localizado no par de sítios n_a e n_b , podemos escrever a função de onda como uma delta δ_{n_a, n_b} . Os cálculos seguintes são triviais:

$$\begin{aligned}
\langle n_1 \rangle &= n_a & \langle n_2 \rangle &= n_b & \langle n_1 n_2 \rangle &= n_a n_b \\
\zeta &= n_a n_b - n_a n_b = 0
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Aqui, como temos uma clara separação espacial dos mágnons, é razoável termos uma ausência de correlação, já que os mágnons não interagem entre si.

Na figura 3.8 mostramos a função de correlação relativa, obtida de cadeias finitas que corroboram as estimativas acima. A correlação $\zeta(E)$ foi calculada como a média sobre todos os estados com energias próximas de E . Como esperado, os

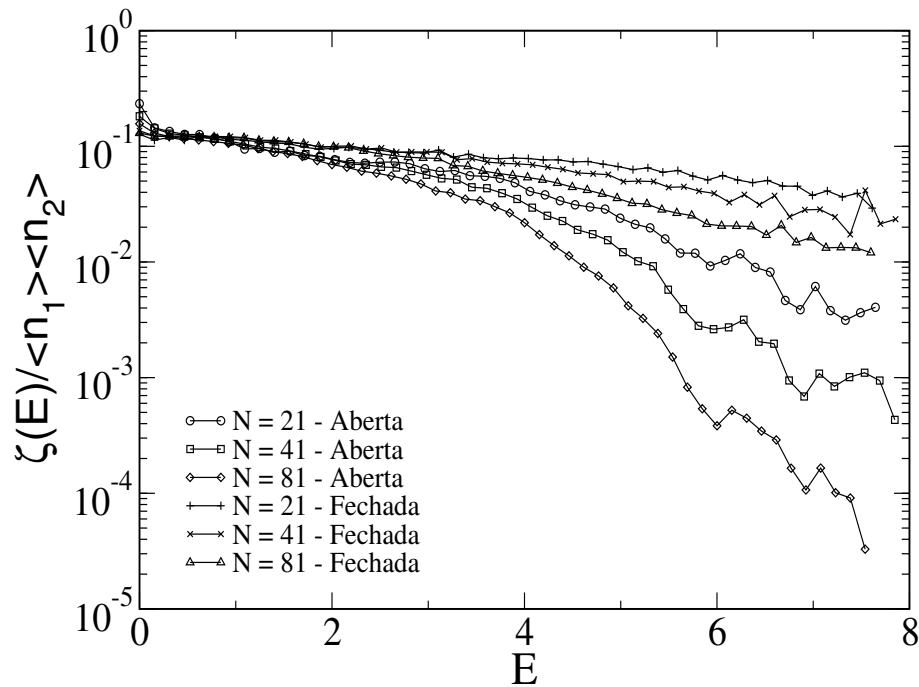


Figura 3.8: Correlação em função das auto-energias. Os mágns mais energéticos são mais correlacionados nas cadeias fechadas que nas abertas, embora, de maneira geral, o aumento de energia leve à redução na correlação.

estados de alta energia são fracamente correlacionados devido à localização exponencial. O decaimento da correlação com a energia é mais lento em cadeias fechadas que em cadeias abertas.

3.5 Dinâmica de 2 Mágns

Na seção 2.4.2 vimos que para uma distribuição de desordem com $\langle 1/J \rangle$ não divergente, o pacote de onda de 1 mágns apresentava comportamento dinâmico super-difusivo para tempos longos [38]. Como estamos tratando agora de um caso

com interação, este novo elemento pode gerar resultados novos para o modelo.

Por se tratar de um sistema desordenado, recorreremos novamente ao emprego de técnicas numéricas para obter nossos resultados. Através do algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo para 2 mágns.

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (3.59)$$

onde H é o hamiltoniano (2.2) e $|\psi(t)\rangle$ é o vetor de estado da forma (3.5). Temos que $H|\psi\rangle$ resulta no sistema de equações (3.23) e (3.37). Utilizando $\hbar = 1$, a equação de Schrödinger então fica:

$$i \frac{df_{n,n+1}(t)}{dt} = (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})f_{n,n+1} - J_{n+1,n+2}f_{n,n+2} - J_{n-1,n}f_{n-1,n+1} \quad (3.60)$$

para desvios em sítios vizinhos e

$$i \frac{df_{n_1,n_2}(t)}{dt} = (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1})f_{n_1,n_2} - J_{n_1,n_1+1}f_{n_1+1,n_2} \\ - J_{n_2,n_2+1}f_{n_1,n_2+1} - J_{n_1-1,n_1}f_{n_1-1,n_2} - J_{n_2-1,n_2}f_{n_1,n_2-1} \quad (3.61)$$

para desvios em sítios não vizinhos.

O algoritmo de Runge-Kutta nos possibilita o cálculo das amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado. Com estas informações foi possível o cálculo das diversas quantidades adotadas em nosso estudo.

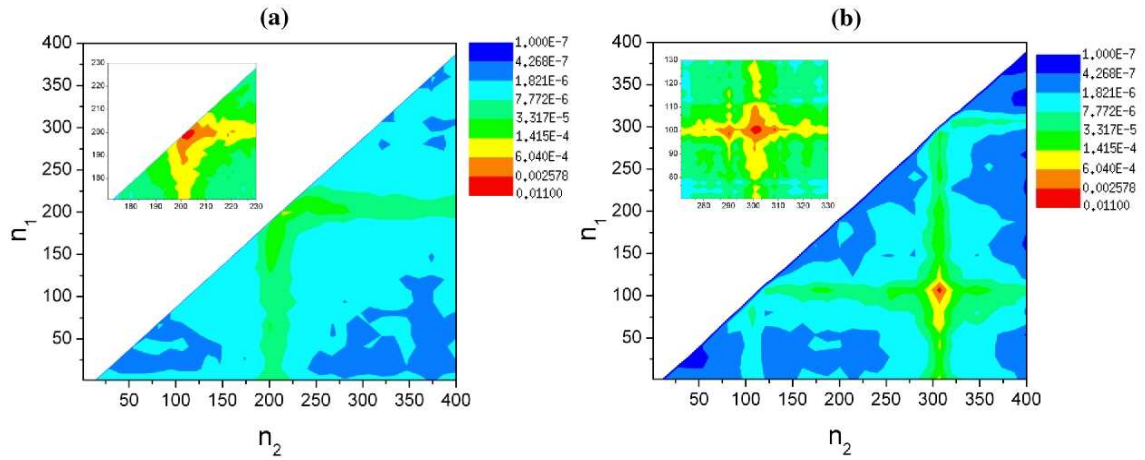


Figura 3.9: Representação do pacote de onda assintótico em escala logarítmica. As condições iniciais adotadas para a distância entre os spins desviados foram (a) $d = 2$ e (b) $d = 200$, localizados simetricamente ao centro de uma cadeia com $N = 400$ sítions. A paleta de cores aponta para um decaimento do pacote de ondas tipo lei de potência (ver texto). Em (b) nota-se efeito de colisão como resultado da regra de exclusão.

3.6 Resultados - Aspectos Dinâmicos

Como o problema de 2 mágnons foi desenvolvido aqui em um espaço cujas dimensões aumentam com o N^2 , as limitações computacionais restringiram o tamanho das cadeias utilizadas para um valor máximo de $N = 800$. Como no caso estacionário, as cadeias utilizadas apresentam desordem do tipo *par aleatório*, onde as constantes de troca J assumem apenas dois possíveis valores J_A ou J_B , distribuídos aleatoriamente com probabilidade p e $1 - p$ respectivamente. Em nossas simulações utilizamos $J_A = 1.0$ e $J_B = 2.0$ (desordem fraca), como também $J_A = 1.0$ e $J_B = 5.0$ (desordem forte), ambos com a mesma distribuição de probabilidades. Por se tratar de um problema com desordem, todos os resultados são valores médios calculados sobre uma quantidade amostras.

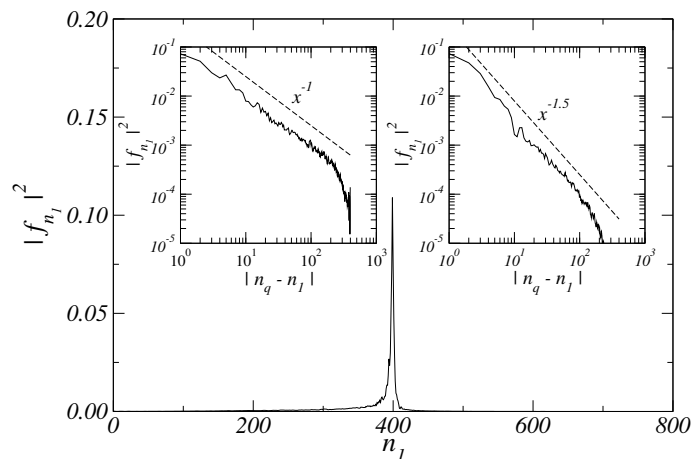


Figura 3.10: Distribuição assintótica do pacote de onda de desvio único em uma cadeia com $N=800$ spins. O estado inicial tem spins desviados nos sítios $n_1 = 399$ e $n_2 = 401$. O pacote de onda apresenta caudas assimétricas. Os *insets* caracterizam a lei de potência do decaimento de cada cauda. O expoente de decaimento maior do lado direito do pacote reflete os efeitos da repulsão efetiva entre spins desviados.

O vetor de estado inicial ($|\psi(t=0)\rangle$) é um pacote de onda totalmente localizado em um único par de sítios n_p e n_q . Nas simulações adotamos $n_p = (N/2) - d_0/2$ e $n_q = (N/2) + d_0/2$, ou seja, os desvios ocorrem simetricamente ao centro da cadeia e a uma distância de d_0 sítios.

A forma assintótica do pacote de onda para $N = 800$ é mostrada na figura 3.9. As condições iniciais adotadas foram $d_0 = 2$ (figura 3.9a) e $d_0 = N/2$ (figura 3.9b). Uma escala de cores logarítmica foi usada para permitir uma melhor análise.

Na figura 3.9a os spins desviados iniciam próximo do centro da cadeia. Nota-se que a componente da função de onda para o deslocamento de um desvio único sobre uma distância d da posição inicial é maior que a componente para deslocamento de ambos desvios sobre uma distância $d/2$. Esta característica é incompatível com um pacote de onda decomposto como o produto de funções que decaem expo-

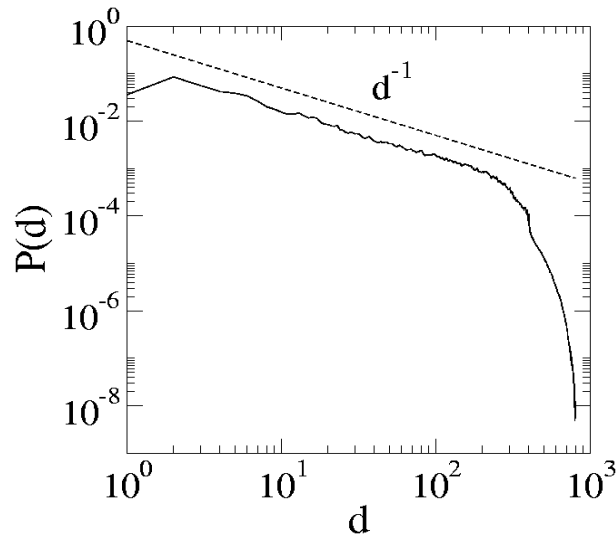


Figura 3.11: Distribuição assintótica das distâncias entre spins desviados em uma cadeia com $N=800$ spins. O regime para $d < N/2$ reflete uma lei de potência para o decaimento do pacote de onda. O decaimento rápido para $d > N/2$ está relacionado com a pequena probabilidade de haver deslocamento mútuo entre os spins desviados

nencialmente, aproximando-se mais de um produto de funções que seguem uma lei de potência. Na figura 3.9b os spins desviados encontram-se afastados inicialmente (metade do tamanho da cadeia). A mesma característica mencionada acima é observada aqui, com um efeito adicional de colisão, uma vez que desvios duplos no mesmo sítio não são permitidos.

Para quantificar a forma assintótica do pacote de onda, medimos a função distribuição de probabilidade associada com um desvio único, definida por:

$$|\phi_{n_1}|^2 = \sum_{n_2 > n_1} |\phi_{n_1, n_2}|^2 \quad (3.62)$$

que fornece a função de distribuição espacial do spin desviado da esquerda. A

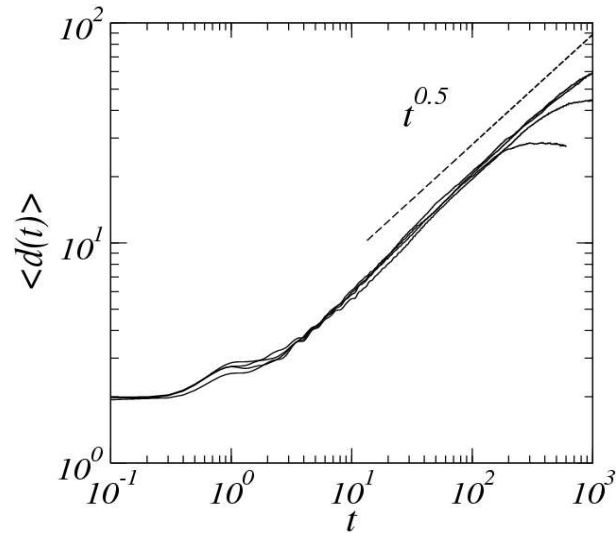


Figura 3.12: Evolução temporal da distância média entre os spins desviados em cadeias variando de $N = 200$ até 800 spins. O regime intermediário aponta para uma separação difusiva dos spins com $\langle d(t) \rangle \propto t^{1/2}$.

figura 3.10 mostra esta distribuição para um tempo longo com desvios iniciais a uma distância $d = 2$. Nota-se que o pacote de onda para desvio único desenvolve caudas com lei de potência de expoentes característicos distintos para cada lado. O expoente de decaimento maior no lado direito é uma consequência da repulsão efetiva entre os spins, dificultando o alargamento livre do pacote de onda de desvio único ao longo da região predominantemente ocupada pelo segundo spin excitado.

Foi calculado também a função distribuição da distância entre os spins desviados, definido por:

$$P(d) = \sum_{n_1=1}^{N-d} |\phi_{n_1, n_2=n_1+d}(t)|^2 \quad (3.63)$$

onde a amplitude de probabilidade foi tomada para um tempo além da saturação. A média configuracional da distribuição acima é mostrada na figura 3.11, para um

caso particular de $d_0 = 2$, onde observa-se dois regimes bem definidos. Para $d < N/2$, a curva decai como uma lei de potência, com o expoente da distribuição dado por $P(d) \propto d^{-1}$. Para $d > N/2$, o gráfico exibe um decaimento mais pronunciado, uma vez que duplo deslocamento de spins desviados são necessários para atingir tais distâncias.

O surgimento de expoentes de lei de potência distintos para o pacote de onda de desvio único possibilita o surgimento de comprimentos de escala distintos, relacionados com a distância entre os spins desviados e o alargamento lateral do pacote de onda, podendo ser governados por expoentes dinâmicos distintos. A fim de explorar este ponto, seguimos a evolução temporal da distância média entre os spins desviados, definida como:

$$d_m(t) = \sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N |n_1 - n_2| |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (3.64)$$

Na figura 3.12 mostramos a evolução temporal da distância média, iniciada com spins desviados com $d_0 = 2$. Foram utilizadas 25 amostras a fim de se obter uma média configuracional sobre distintas distribuições de desordem. Os resultados encontrados são para a evolução temporal em cadeias com tamanho variando de $N = 200$ a 800 sítios. Nota-se que, após um certo tempo inicial, a distância média cresce difusamente antes da saturação, devido a reflexões sofridas pelo pacote de onda nos limites da cadeia. O intervalo intermediário se ajusta bem à uma lei de potência com $\langle d(t) \rangle \propto t^{1/2}$. Medimos ainda a dispersão da distância $\sigma(t) = \sqrt{\langle d^2(t) \rangle - \langle d(t) \rangle^2}$, onde

$$\langle d^2(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2}^N (n_1 - n_2)^2 |\phi_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (3.65)$$

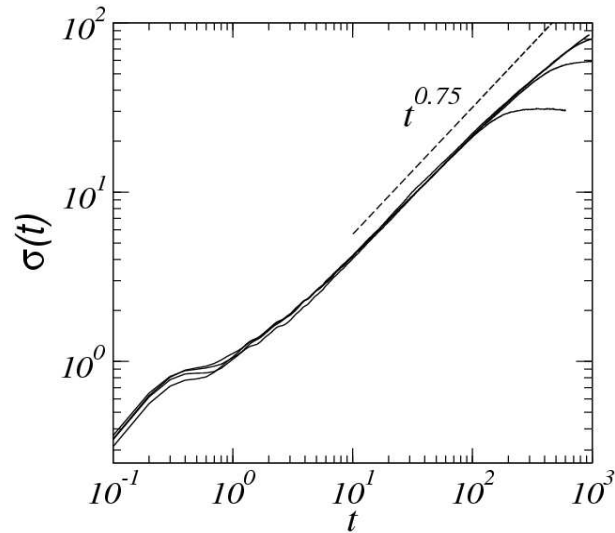


Figura 3.13: Evolução temporal da dispersão média da distância entre os spins desviados. O regime de escala intermediário se ajusta bem à lei super difusiva na forma $\sigma \propto t^{3/4}$. Desta forma, o alargamento do pacote de onda evolui mais rapidamente que a distância média entre spins.

A dispersão da distância pode também ser usado como um comprimento de escala característico do alargamento do pacote de onda, que começa de $\sigma(0) = 0$. Por esta razão, a dispersão é menos influenciada pelo transiente inicial. A figura 3.13 mostra a dispersão para as mesmas cadeias usadas no cálculo da distância média. Destes resultados estima-se que a escala dinâmica para o alargamento super difusivo é dado por $\sigma(t) \propto t^{3/4}$. Este expoente é consistente com o alargamento super difusivo das excitações de desvio único.

Capítulo 4

Conclusão

Nesta dissertação estudamos basicamente excitações de 1-mágnon e 2-mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas. Vamos descrever de forma sucinta nossos resultados:

A equação de movimento para 1-mágnon no modelo ferromagnético, descrito pelo Hamiltoniano de Heisenberg, pode ser exatamente mapeado pelo modelo de Anderson. Estudamos os auto-estados de 1-mágnon numa cadeia cuja desordem apresenta correlações tipo dímeros. Foi encontrado a existência de estados ressonantes com energia não nula $E_c > 0$. Mostramos que o valor da ressonância E_c está diretamente relacionado com o valor do dímero. Em nossos cálculos utilizamos os valores $J_A = 1.5$ e $J_B = 1.0$, como o dímero é formado pelo acoplamento J_B , encontramos estados estendidos com valor de energia $E = 1.0$. Este resultado é análogo ao que foi encontrado por Dunlap *et. al.* [28] para o modelo eletrônico.

Ainda dentro deste capítulo, foi estudado a dinâmica dos estados de 1-mágnon e verificou-se que a presença dos dímeros não altera sua dinâmica, que permanece seguindo o que foi previsto por Evangelou e Katsamos [38] quando a distribuição

de desordem apresenta $\langle 1/J \rangle$ não divergente. Nestas condições, o pacote possui uma dinâmica super-difusiva ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$). Estes resultados foram apresentados no capítulo 2.

Os resultados para 2-mágnons foram apresentados e analisados no capítulo 3. Foi constatado, dentre outras coisas, que os auto-estados de 2 mágnons quando submetidos à uma cadeia com desordem não correlacionada preservam sua natureza localizada, com exceção dos estados imediatamente próximos de $E = 0$. Isto foi observado nos gráficos da Razão de Participação e da Extensão Espacial do pacote de onda. Ambas as quantidades estão relacionadas com o grau de localização da função de onda, de forma que quando menores forem seus valores, mais localizado será o estado, conforme foi mostrado nos gráficos. Calculamos a Correlação entre os mágnons a fim de verificar o grau de interação entre eles. Foi visto que, para todos os tamanhos e tipos de cadeia, a interação é maior na região de baixas energias que no final da banda. Isso está relacionado com o fato de que em baixas energias o auto-estado se encontra estendido, de forma que os mágnons "se misturam" completamente, possibilitando uma maior interação que no caso localizado, onde os mágnons são mais separados espacialmente. Além desta observação, vimos que, devido à presença da condição de contorno periódica, todos os tamanhos de cadeia fechada apresentam correlação maior, se comparado com a cadeia aberta de mesmo tamanho.

Outra característica analisada neste capítulo foi a distância média entre os mágnons, calculada tanto para os auto-estados quanto em um pacote de onda que evolui no tempo. Para o caso estacionário, foi visto que esta distância se mantém praticamente constante para toda a banda de energia, com $d \propto N/4$ para cadeia fechada e $d \propto N/3$ para cadeia aberta. Estes resultados foram previstos analiticamente no limite termodinâmico.

Para o caso dinâmico foi analisado a evolução temporal da distância média entre os mágnons e o desvio médio quadrático da função de onda. Através de estimativas analíticas e resultados numéricos concluímos que, para uma cadeia suficientemente grande, as duas quantidades apresentam dinâmicas distintas. Encontramos que a distância média entre os mágnons apresenta um comportamento super-difusivo associado com o perfil assimétrico da função de onda de cada mágnon separadamente devido a interação entre os mágnons. O desvio médio quadrático da função de onda dos 2-mágnons apresenta um comportamento difusivo para tempo longo. Este comportamento pode ser obtido fazendo analogia com dois passeios aleatórios independentes onde o tamanho médio escala com $t^{0.5}$.

Para complementar nosso estudo da distância média, calculamos a função de onda para um instante de tempo posterior à saturação. Foi visto que a probabilidade de haver um movimento mútuo entre os mágnons é desprezível. O dinâmica acontece com um dos mágnons em repouso enquanto o outro desloca-se. Isto se deve ao próprio caráter probabilístico da Mecânica Quântica. A probabilidade de ocorrer dois eventos simultaneamente é menor que a de tais eventos ocorrerem de forma independente. Outro fato notada, que também é consequência deste caráter probabilístico, é a existência de uma espécie de "colisão elástica" entre os mágnons, ou seja, quando o mágnon em movimento alcança o sítio ocupado pelo mágnon em repouso, devido ao fato de a probabilidade de haver movimento simultâneo ser pequena, os mágnons trocam seus estados de movimento, como em uma colisão mecânica onde não há perda de energia, o mágnon que estava em repouso passa a entrar em movimento, enquanto que o outro passa para o estado de repouso.

Em resumo, apresentamos nesta dissertação de mestrado um conjunto de informações importantes numéricas bem como analíticas sobre a natureza de excitações

magnéticas não interagentes bem como interagentes em uma cadeia ferromagnética desordenada. Estamos interessados em investigar excitações magnéticas interagentes na presença de correlações de longo alcance bem como em sistemas bidimensionais.

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **109**, 1492 (1958)
- [2] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. G. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [3] D. J. Thouless, *Physics Reports* **13**, 93 (1974).
- [4] B. Kramer e A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
- [5] K. Slevin e T. Ohtsuki, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 382 (2001).
- [6] K. Slevin, P. Marko e, T. Ohtsuki, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3594 (2001).
- [7] S. L. A. de Queiroz, *Phys. Rev. B* **63**, 214202 (2001).
- [8] K. Slevin, T. Ohtsuki e, T. Kawarabayashi, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3915 (2000).
- [9] H. Aoki e T. Ando, *Solid State Commun* **18**, 1981 (1979).
- [10] S. Etamad, R. Thompson e M. J. Andrejco, *Phys. Rev. Lett* **57**, 575 (1986).
- [11] E. Akkermans e R. Maynard, *J. Physique Lett.* **46 L1045** (1985).
- [12] p. E. Lindelof, J. Nørregaard e J. Hanberg, *Phys. Scr.* **T14**, 17 (1986).

- [13] G. A. Tomas, *Localisation and Interactions in Disordered and Doped Semiconductors* ed D. M. Finlayson (Edinburgh: SUSSP) p. 172 (1986).
- [14] S. Katsumoto, *Localisation 1990* ed K. A. Benedict and J.T. Chalker (Bristol: Institute of Physics) p. 17 (1991)
- [15] G. Biskupski e A. Briggs, *J. Non-Cryst. Solids* **87**, 683 (1988).
- [16] C. Y. Chen, R. J. Birgeneau, D. R. Gabbe, H. P. Jenssen, M. A. Kastner, P. J. Picone, N. W. Preyer e T. Thio, *Physica C* **162**, 1031 (1989).
- [17] S. Washburn e R. A. Webb, *Adv. Phys.* **35**, 375 (1986)
- [18] P. A. Lee, A. D. Stone e H. Fukuyama, *Phys. Rev.* *35*, 1039 (1987).
- [19] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik, e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 137 (1999).
- [20] S. Waffenschmidt, C. Pfeleiderer, e H. V. Lhneysen, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3005 (1999).
- [21] N. F. Mott, *Proc. Phys. Soc.* **A62**, 416 (1949).
- [22] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Academic Press, London 1985).
- [23] P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **254**, 507 (1960).
- [24] N. F. Mott e W. D. Twose, *Adv. in Phys.* **10**, 107 (1961).
- [25] R. E. B. Makinson e A. P. Roberts, *Proc. Phys. Soc.* **79**, 222 (1962).
- [26] P. Dean e M. D. Bacon, *Proc. Phys. Soc.* *81*, 642 (1963).

- [27] P. Dean, *Proc. Phys. Soc.* **84**, 727 (1964).
- [28] D. H. Dunlap, H-L Wu, P. W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1 (1990).
- [29] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Torricone, G. B. Parravicini, R. Domínguez-Adame e R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 10 (1999).
- [30] Veja por exemplo; M. Paczuski, S. Maslov e P. Bak, *Phys. Rev. E* **53**, 414(1996) e as referências nela contidas.
- [31] M. C. Varriale e A. Theumann, *Phys. Rev. B* **52** 4631, (1995); *J. Phys. A-Math. Gen.* **23**, L719-L725 (1990); M. C. Varriale, *Transção de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*, Tese de doutorado, UFRGS, Porto Alegre (1994).
- [32] F. A. B. F. de Moura e M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998); *ibid.* **84**, 199 (2000).
- [33] H. Yamada, *Physics Letters A* **332**, 65 (2004)
- [34] H. Yamada, *International Journal of Modern Physics B* **18(12)**, 1697 (2004).
- [35] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho, E. P. Raposo e M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **68(1)**, 012202 (2003).
- [36] G. Theodorou, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **15**, 1315 (1982)
- [37] M. Cieplak e G. Ismael, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **20**, 1309 (1987).
- [38] S. N. Evangelou e D. E. Katsonos, *Phys. Lett. A* **164**, 5,6 (1992).
- [39] I. R. Pimentel e R. B. Stinchcombe, *Europhys Lett.* **6(8)**, 719 (1988).

-
- [40] I. M. Lifshitz, *Soviet Phys.* **7**, 549 (1965).
- [41] R. P. A. Lima, M. L. Lyra, E. M. Nascimento, e A. D. de Jesus, *Phys. Rev. B* **65**, 104416 (2002).
- [42] P. Weiss, *J. Phys.* **6**, 667 (1907).
- [43] F. Keffer, *Spin Waves - Handbuck der Physik*, vol XVIII/2
- [44] F. Bloch, *Zeitschrift der Physik* **61**, 2061 (1930).
- [45] W. Heisenberg, *Zeitschrift der Physik* **38**, 441 (1926).
- [46] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* **112**, 661 (1926).
- [47] A. Bovier, *J. Phys. A* **25**, 1021 (1992).
- [48] H. -L. Wu e P. Phillips, *Phys. Rev. Lett. A* **66**, 456 (1991).
- [49] D. C. McCollum, Jr. e J. Callaway, *Phys. Rev. Letters* **9**, 376 (1962).
- [50] T. A. L. Ziman, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 337 (1982).
- [51] H. A. Bethe, *Z. Physik* **71**, 205 (1931)
- [52] T. Holstein, H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940)
- [53] F. J. Dyson, *Physical Review* **102,5**, 1217 (1956)
- [54] R. P. Reklis, J. E. Drumheller, *Physical Review B* **9**, 174 (1974)