

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

Débora Mendonça Nunes

Dinâmica de um mágnon em cadeias ferromagnéticas com  
desordem correlacionada e campos magnéticos não homogêneos

Maceió  
2015

Débora Mendonça Nunes

Dinâmica de um mágnon em cadeias ferromagnéticas com  
desordem correlacionada e campos magnéticos não homogêneos

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física  
da Universidade Federal de Alagoas, como parte  
dos créditos para a obtenção do título de Mestre  
em Física.*

*Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Bar-  
ros Fidelis de Moura*

Maceió  
2015

**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

**Bibliotecário: Roselito de Oliveira Santos**

N972d Nunes, Débora Mendonça.

Dinâmica de um mágnon em cadeias ferromagnéticas com desordem correlacionada e campos magnéticos não homogêneos / Débora Mendonça – 2015

35 f. : il.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.  
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2015.

Bibliografia: f. 33-35.

1. Mágnon-localização 2. Desordem correlacionada-física. 3. Campo magnético. I. Título

CDU: 538.9



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

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil  
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

***“Dinâmica de um mágnon em cadeias ferromagnéticas  
com desordem correlacionada e campos magnéticos não  
homogêneos”***

por

**Débora Mendonça Nunes**

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Alexandre Manoel da Moraes Carvalho, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva, do Campus Arapiraca da Universidade Federal de Alagoas consideram a candidata aprovada com grau A.

Maceió, 16 de março de 2015

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Prof. Dr. Alexandre Manoel da Moraes Carvalho

Prof. Dr. Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva

*Dedico aqueles que nunca mediram esforços para me fazer feliz;  
Aos meus pais, Angela e Daniel.*

## AGRADECIMENTOS

Uma tarefa difícil, porém necessária, assim considero o ato de demonstrar gratidão aqueles que verdadeiramente a merecem. Basta olhar ao meu redor para, imediatamente, perceber o quanto (e a quantos) tenho a agradecer. São conselhos, conversas, força. Uma torcida mais que organizada e se há algo de que eu não queira me arrepender é de não ter agradecido adequadamente a quem se fez importante na minha vida.

Agradeço primeiramente a Deus, autor da minha vida e minha fé, por mais esta grande conquista.

Aos meus pais, Angela e Daniel, que algumas vezes não sabiam o que eu estudava ou não entendiam aquelas horas de leitura solitária, mas que sempre me incentivaram a seguir em frente, me apoiaram em cada decisão e me dedicam um amor tão sublime.

Aos pais que me adotaram em conselhos, conversas e orações, Jadson, Patrícia e Nadilene.

Ao meu namorado Matheus, pelo amor, companheirismo e, principalmente, pela paciência durante os últimos meses. Obrigada por ter feito do meu sonho o nosso sonho.

A minhas avós, tios e primos que, mesmo na distância, foram capazes de estar presentes em minha vida e também fazem parte desta conquista.

A todos os professores com os quais pude conviver ao longo destes dois anos, em especial, ao meu orientador, professor Francisco Fidelis, pela ajuda desde muito antes dessa dissertação. Serei eternamente grata pela oportunidade que me foi dada em trabalhar ao seu lado, por sua grande paciência, incentivo e conselhos.

Aos colegas do Grupo de Física Teórica e Computacional, cuja ajuda vai do Latex a paciência com o computador alheio.

Aos amigos da pós (de questões, estudos e vida), por todos os momentos divididos. A convivência pode até ter sido curta, mas o carinho e admiração tem sido enormes.

A minhas irmãs de coração, Ana Izabela, Elaine, Tainã e Waléria, pela amizade, companheirismo e atos de heroísmo típicos de anjos da guarda.

Aos amigos de perto e de longe, pelos grandes momentos de descontração em meio aos pequenos encontros e conversas, Amanda, Andreia, Edneide, Filipe, Hexilly, Ilberto.

A um grupo bem especial, os nerds mais queridos de Maceió: Amanda (in memoriam), Cesar, João, Lara, Mariana, Natália e Nicole. Sou grata por cada convite, abraço, evento perfeito, noites de jogatina e por ter sido tão bem acolhida aqui.

A família ICPB pelas orações e grandes amizades conquistadas.

Aos funcionários do IF, que sempre nos recebem com alegria e contribuem para o bem estar de todos.

A CAPES, pelo apoio financeiro que possibilitou a continuidade dos meus estudos.

Por fim, para não ser traída pela memória, quero agradecer a todos que contribuíram, direta ou indiretamente, na realização deste trabalho.

*“Esperança é a única coisa mais forte do que o medo.” The Hunger Games*

## Resumo

Neste trabalho investigamos a natureza dos autoestados de um mágnon em uma cadeia desordenada na presença de um campo magnético não uniforme. Em nosso estudo, analisamos o modelo unidimensional de Heisenberg ferromagnético dentro do formalismo de um único mágnon. A interação entre spins vizinhos foi considerada como sendo uma distribuição de desordem correlacionada com espectro lei de potência da forma  $S(k) \propto k^{-\alpha}$ . Para  $\alpha = 0$  recuperamos o modelo de Heisenberg com acoplamentos desordenados e não correlacionados. Para  $\alpha > 0$ , o modelo contém correlações intrínsecas dentro da distribuição dos acoplamentos entre os spins vizinhos. Em nosso estudo, introduzimos também um campo magnético não uniforme. Utilizando métodos numéricos calculamos a evolução temporal de um pacote de ondas Gaussiano inicialmente localizado. Nossos cálculos numéricos indicam que para correlações fracas ( $\alpha < 1$ ) o pacote de ondas magnéticas permanece localizado em torno da posição inicial. Para  $\alpha > 1$ , nossos resultados revelam um perfil oscilatório semelhante ao encontrado em cadeias cristalinas sob o efeito de um campo elétrico uniforme. Portanto, nossos cálculos sugerem a possibilidade de oscilações de Bloch de um mágnon em cadeias com desordem correlacionada e campo magnético externo não uniforme. Nós calculamos a frequência destas oscilações e observamos que essa frequência está em boa concordância com a derivada espacial da energia de interação entre o mágnon e o campo magnético externo. Utilizamos uma abordagem semi-clássica para explicar melhor o comportamento oscilatório encontrado.

**Palavras-chave:** Mágnon, localização, desordem correlacionada, campo magnético

## Abstract

In this work we have investigated the nature of the one-magnon eigenstates in a disordered chain at the presence of a non-uniform magnetic field. In our study, we analyzed the one-dimensional ferromagnetic Heisenberg model within the one-magnon framework. The spin-spin interaction was considered as a correlated disorder distribution with power law spectrum  $S(k) \propto k^{-\alpha}$ . For  $\alpha = 0$  we recover the standard Heisenberg model with uncorrelated disordered local couplings. For  $\alpha > 0$ , the model contains intrinsic correlations within the spin-spin couplings. In our study we have introduced a non-uniform magnetic field. By using numerical methods we calculated the time evolution of an initially localized Gaussian wave-packet. Our numerical calculations indicate that for weak correlations ( $\alpha < 1$ ) the magnetic wave-packet remains localized around the initial position. For  $\alpha > 1$  our results reveal an oscillatory profile similar to that found in crystalline chains under the effect of a uniform electric field. Therefore, our calculations suggest the possibility of one-magnon's Bloch oscillations in chains with correlated disorder. We calculate the frequency of these oscillations and observed that this frequency is in good agreement with the spatial derivative of the energy interaction between the magnon and the magnetic field. Moreover, a semi-classical approach was also used to explain better the oscillatory behavior found.

**Keywords:** Magnon, localization, correlated disorder, magnetic field

# Lista de figuras

1.1	Domínios ferromagnéticos. Fonte: ver texto . . . . .	10
1.2	(a) e (b) Estados fundamentais de uma cadeia ferromagnética. (c) Primeiro estado excitado da cadeia apresentada em (a). Fonte: ver texto . . . . .	12
1.3	Representação de uma função de onda estendida (a) e de uma função de onda localizada num sistema desordenado (b). Fonte: ver texto . . . . .	18
2.1	Dinâmica de um mágnon para $\alpha = 0.0$ . Fonte: autora . . . . .	25
2.2	Dinâmica de um mágnon para (a) $\alpha = 0.5$ e (b) $\alpha = 1.0$ . Fonte: autora . . . . .	26
2.3	Dinâmica de um mágnon para $\alpha = 1.5$ . Fonte: autora . . . . .	26
2.4	Dinâmica de um mágnon para (a) $\alpha = 2.0$ e (b) $\alpha = 2.5$ . Fonte: autora . . . . .	27
2.5	Transformada de Fourier para $\alpha = 2.5$ . Fonte: autora . . . . .	27
2.6	Comprimento de Localização. Fonte: autora . . . . .	30

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>9</b>
1.1	Introdução Teórica . . . . .	9
1.2	Ondas de Spin . . . . .	11
1.3	Mágnons em Sistemas Desordenados . . . . .	15
1.3.1	Desordem correlacionada . . . . .	16
1.4	Aplicação de um campo magnético em uma cadeia de spin . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Dinâmica de Mágnons</b>	<b>21</b>
2.1	O Modelo . . . . .	21
2.2	Resultados . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Conclusões</b>	<b>31</b>
	<b>Referências</b>	<b>33</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Introdução Teórica

As primeiras observações sobre o magnetismo são muito antigas. Dentre elas, destacam-se os gregos, através da explicação, mesmo que de forma filosófica, sobre um minério magnético, hoje chamado de magnetita, e também os chineses que, além de possivelmente serem os pioneiros no estudo deste fenômeno, também foram os primeiros a encontrar explicações práticas e tecnológicas para o magnetismo, como o uso da bússola e a fabricação de ímãs. Mesmo tendo sido descoberto numa época muito anterior, o fenômeno só passou a despertar novamente o interesse técnico e científico no século XIII; com estudos sobre a natureza dos fenômenos elétricos e magnéticos, que, até então, eram completamente distintas.

A resposta das substâncias sob a presença de um campo magnético, e até mesmo substâncias que possuem uma magnetização independente da presença de um campo, são relacionadas as propriedades de cada material estudado. Os materiais podem ser diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos, sendo este último o utilizado em nosso estudo. O fenômeno do ferromagnetismo é, de forma simples, a capacidade com que certos materiais apresentam magnetização espontânea mesmo na ausência de um campo magnético. Este fenômeno que ocorre quando o material está numa temperatura abaixo da temperatura crítica, ou temperatura de Currie,  $T_c$ , envolve a interação entre os dipolos próximos (1). Quando o sistema se encontra a uma temperatura superior à temperatura crítica, a energia de interação entre os elétrons é superada pela energia térmica, sendo assim, as orientações dos spins passam a ser independentes uma das outras, ou seja, a magnetização é uma função da temperatura de tal forma que a medida que esta cresce, a magnetização espontânea diminui.

É possível também que alguns materiais ditos ferromagnéticos possam apresentar uma magnetização quase nula sob temperaturas abaixo da temperatura de Currie. Este comportamento se dá pela existência dos domínios magnéticos, como podemos ver na figura (1.1), extraída da referência (2). Cada domínio possui uma quantidade muito grande de dipolos,

porém, também há uma grande quantidade de domínios em cada material. A orientação desses domínios, em si, é aleatória ou, como no caso de um determinado cristal não magnetizado, possui um alinhamento preferencial, mas existirão tantos domínios apontando em direções opostas que eles se anularão.

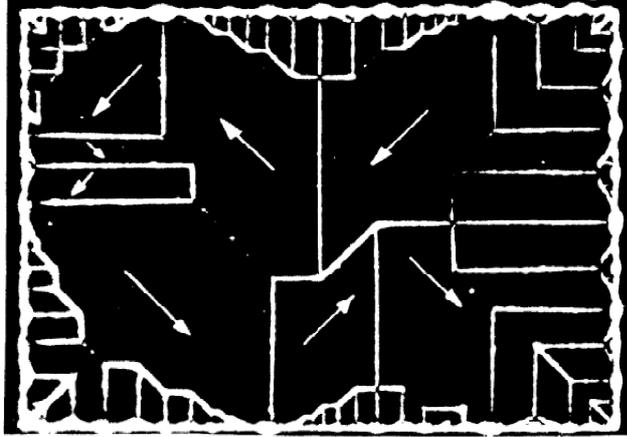


Figura 1.1: Domínios ferromagnéticos. Fonte: ver texto

Apenas no início do século XX, Pierre Weiss elaborou uma teoria que explicava o fenômeno da magnetização espontânea, postulando a existência de um campo molecular que, através da interação mútua entre os elétrons, alinhava os momentos magnéticos dentro do domínio. Embora tenha sido bem sucedida, sua teoria falhava no regime de baixas temperaturas, sendo então explicada de forma mais coerente pelos argumentos da mecânica quântica. Heisenberg e, independentemente, Dirac, mostraram que a origem do campo molecular descoberto por Weiss estava numa interação de troca, ou *exchange*, entre os spins dos elétrons, interação esta que explica o ordenamento magnético do material. Este fenômeno, por não ter análogo clássico, só pode ser explicado pela teoria quântica.

Para representar convenientemente a interação de átomos nesse sistema utilizamos o hamiltoniano de Heisenberg:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.1)$$

Onde  $J_{ij}$  representa a constante de troca e  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são os operadores de spin que agem nos sítios  $i$  e  $j$  respectivamente. Para um ordenamento ferromagnético, onde os spins tendem a alinhar-se paralelamente, a constante de troca deve possuir valores positivos. No caso de um ordenamento antiferromagnético, spins alinhados antiparalelamente, a constante de troca deve possuir valores negativos. É também levado em conta que um sistema regido pela equação (1.1) possua os elétrons da camada de valência suficientemente localizados de modo a associar um spin a cada sítio  $i$  da cadeia.

## 1.2 Ondas de Spin

A fim de explicar a redução da magnetização espontânea, Bloch observou que existem excitações elementares análogas aos fônons. A estas excitações chamamos mágnons, ou quantização da onda de spin. Os mágnons foram descobertos após a verificação de que a medida em que a temperatura de um material ferromagneto aumenta, os spins passam a se desviar de maneira aleatória, que diferentemente do estado de menor energia, quando os spins estão todos alinhados sob uma mesma direção, geram uma diminuição na magnetização líquida do material. Sendo assim, tendo um material ferromagneto no estado fundamental, uma simples excitação em um dos spins provoca uma perturbação coletiva em toda a cadeia.

Para uma melhor compreensão, consideremos uma cadeia unidimensional com  $N$  spins  $\vec{S} = S_x\hat{x} + S_y\hat{y} + S_z\hat{z}$ , que interagem apenas com sítios vizinhos. Neste caso, o hamiltoniano (1.1) é dado por

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}, \quad (1.2)$$

e os operadores que agem sobre a cadeia, modificando a localização do spin num dado sítio  $n$

$$S_n^\pm = S_n^x \pm iS_n^y. \quad (1.3)$$

Utilizando a relação de comutação entre estes operadores

$$\begin{aligned} [S_k^+, S_l^-] &= 2S_k^z \delta_{kl} & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0 \\ [S_k^z, S_l^+] &= S_k^+ \delta_{kl} & [S_k^z, S_l^-] &= -S_k^- \delta_{kl} \\ [S_k^x, S_l^y] &= iS_k^z \delta_{kl} \end{aligned} \quad (1.4)$$

reescrevemos a equação (1.2) como

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left[ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right] \quad (1.5)$$

Observando, em especial, esta última equação podemos notar um termo que transfere o desvio de spin de um dado sítio ao sítio vizinho ( $S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+$ ), o que nos permite afirmar que há uma dinâmica da onda de spin.

Consideremos agora que há uma alteração em apenas um spin da cadeia num dado sítio  $l$ , figura (1.2 c), extraída da referência (3). Uma forma é expressá-lo com o auxílio do operador abaixamento  $S_n^-$ . Como o sistema está, inicialmente, no estado ferromagnético, figura (1.2 a), é considerado como estado fundamental o estado de vácuo  $|\varphi_0\rangle$ . Sendo assim, o estado de uma excitação em um sítio  $l$  é dado por  $|\varphi_l\rangle = S_l^- |\varphi_0\rangle$ . Aplicando o hamiltoniano (1.5)

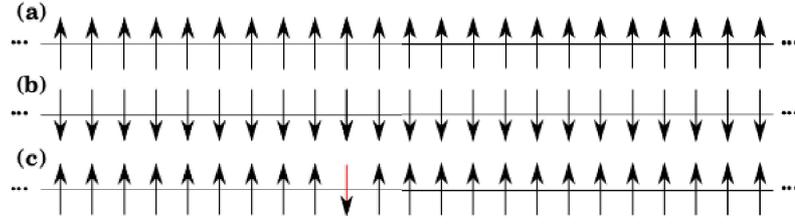


Figura 1.2: (a) e (b) Estados fundamentais de uma cadeia ferromagnética. (c) Primeiro estado excitado da cadeia apresentada em (a). Fonte: ver texto

no estado  $|\varphi_l\rangle$  temos

$$H|\varphi_l\rangle = \underbrace{-\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_l\rangle}_{A} - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\varphi_l\rangle}_{B} - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\varphi_l\rangle}_{C}. \quad (1.6)$$

Lembrando que  $S_l^+|\varphi_0\rangle = 0$  e  $S_l^z|\varphi_0\rangle = S|\varphi_0\rangle$ , resolveremos a equação (1.6) termo a termo.

Termo A

Inserimos termos nulos para chegar as relações de comutação, equação (1.4), dos operadores de spin

$$A = -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z S_l^- |\varphi_0\rangle \quad (1.7)$$

$$A = -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 |\varphi_l\rangle + S(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\varphi_l\rangle. \quad (1.8)$$

Ao observarmos o hamiltoniano da equação (1.5) aplicado no estado fundamental podemos perceber que  $-\sum_{n=1}^N J_{n,n-1} S^2$  é a energia do estado fundamental. Desta forma,

$$A = E_0 |\varphi_l\rangle + S(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\varphi_l\rangle \quad (1.9)$$

Termo B

$$B = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- S_l^- |\varphi_0\rangle \quad (1.10)$$

$$B = J_{l,l+1}S|\varphi_{l+1}\rangle \quad (1.11)$$

Termo C

$$C = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ S_l^- |\varphi_0\rangle \quad (1.12)$$

$$C = J_{l-1,l}S|\varphi_{l-1}\rangle \quad (1.13)$$

Destas últimas equações podemos ver que o desvio no spin não fica localizado no sítio  $l$ , mas se propaga pela cadeia através de seus vizinhos próximos ( $l+1$  e  $l-1$ ). Devido a esta propagação, é possível afirmar que se alterarmos a posição de um spin para baixo, como na figura (1.2), em um tempo posterior a este há a probabilidade de que um spin em um outro sítio (diferente de  $l$ ) esteja para baixo. Graças a esta propagação há a excitação coletiva no sistema, formando assim a onda de spin.

Podemos também observar que  $|\varphi_l\rangle$  não é um autoestado do hamiltoniano (1.5) pois o desvio em um sítio não fica localizado, assim sendo, representaremos por  $|\Phi\rangle$  o estado de um mágnon como uma função na forma

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_{n=1}^N f_n |\varphi_n\rangle \quad (1.14)$$

onde  $f_n$  são as amplitudes de probabilidade de ocorrer um desvio no sítio  $n$ .

Resolvendo, então, a equação de Schrödinger

$$H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad (1.15)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_{n=1}^N f_n H|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} E \sum_{n=1}^N f_n |\varphi_n\rangle \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \{E_0 + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n |\varphi_n\rangle - J_{n,n+1}Sf_n |\varphi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n}Sf_n |\varphi_{n-1}\rangle\} \\ = E \sum_{n=0}^N f_n |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (1.17)$$

Reorganizando os termos

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \{ (J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n |\varphi_n\rangle - J_{n,n+1}f_{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n}f_n |\varphi_{n-1}\rangle \} \\ = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (1.18)$$

Como estamos somando sobre todos os  $n$  estados de um mágnon fazemos

$$\sum_{n=1}^N [(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n - J_{n,n+1}f_{n+1} - J_{n-1,n}f_{n-1}] |\varphi_n\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\varphi_n\rangle \quad (1.19)$$

Sendo  $S = 1/2$  e  $\varepsilon = E - E_0$  obtemos a equação de Schrödinger em termos das amplitudes de probabilidade

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n - J_{n,n+1}f_{n+1} - J_{n-1,n}f_{n-1} = 2\varepsilon f_n \quad (1.20)$$

que é a relação de recorrência para o estudo das ondas de spin. Através desta relação pode-se obter a representação matricial do hamiltoniano  $H$  e, por simulações e rotinas numéricas, obtermos os autovalores e autovetores de  $H$ .

Para o caso puro, em que  $J_n = J_0 = \text{constante}$ , a equação (1.20) fica

$$2J_0f_n - J_0f_{n+1} - J_0f_{n-1} = 2\varepsilon f_n \quad (1.21)$$

Para  $J_{ij} = \text{constante}$ , as ondas de spin se assemelham às funções de Bloch (4), (5) para problemas eletrônicos, pois estas se propagam por toda cadeia. Partindo do teorema de Bloch, que estabelece a maneira como devem ser as funções de onda do elétron, podemos escrever

$$f_n = e^{-ikn} \quad (1.22)$$

e substituindo na eq. (1.21) resulta em

$$\varepsilon = J_0(1 - \cos k) \quad (1.23)$$

Para  $k \rightarrow 0$  podemos utilizar a expansão da função cosseno,  $\cos k \simeq 1 - \frac{k^2}{2} + \dots$ , e assim temos que

$$\begin{aligned} \varepsilon &= J_0(1 - 1 + \frac{k^2}{2}) \\ \varepsilon &\propto k^2 \end{aligned} \quad (1.24)$$

### 1.3 Mágns em Sistemas Desordenados

Nesta sessão vamos introduzir a desordem no problema de 1 mágno, tratando casos com desordem não correlacionada (6) e correlacionada (7).

Vimos anteriormente a propagação de ondas de spin através de uma cadeia ferromagnética com acoplamentos constantes  $J_{ij} = J_0$  (seção 1.2). Porém, quando se trata do mundo real, onde é notória a presença de defeitos, observa-se uma aleatoriedade entre os acoplamentos nos spins. Devido a sua importância, os casos em que existem desordem nos acoplamentos, tem sido objeto de estudos durante muito tempo. Para sistemas com desordem não correlacionada os acoplamentos são variáveis aleatórias, pertencentes a um intervalo  $(J_{min}, J_{max})$ , regidas por uma determinada distribuição de probabilidade  $P(J)$ .

No início da década de 90, Evangelou (6) fez a utilização de uma lei de potência na forma  $P(J) = (1 - \alpha)J^{-\alpha}$ ,  $\alpha \leq 1$ , com  $J$  pertencente ao intervalo  $(0,1)$ . Esta importante escolha nos permite considerar os “extremos” da desordem, podemos notar que para valores negativos de  $\alpha$  a distribuição  $P(J)$  é proporcional ao acoplamento  $J$  (que difere de zero), portanto, é pouco provável que existam  $P(J) \rightarrow 0$ . Desta feita, esta desordem é considerada fraca e, em geral, as funções de onda deste sistema são estendidas, como se os modos vibracionais não notassem a desordem. Observando o outro caso, onde os valores de  $\alpha$  são positivos, notamos que a distribuição escolhida é inversamente proporcional aos acoplamentos, sendo assim, a medida que  $J$  possui valores pequenos,  $P(J) \rightarrow \infty$ . Isto implica numa maior probabilidade de se obter estes valores de  $J$ , ou seja, uma desordem forte que resulta na “quebra” da cadeia pois os acoplamentos funcionam como as barreiras infinitas conhecidas no caso eletrônico, onde as funções de onda são localizadas numa determinada região da cadeia, exceto o modo com energia nula que possui uma função de onda de comprimento infinito, portanto um modo estendido. Sob um grau de desordem intermediário, a depender da ordem do sistema, pode-se apresentar uma transição metal-isolante.

Este estudo pode ser comparado ao modelo de Anderson para o caso eletrônico, pois o mesmo mostra que o grau de desordem existente influencia fortemente a natureza dos estados eletrônicos. Em geral, como já visto, a desordem fraca induz um comportamento metálico para o sistema pois as suas funções de onda são estendidas. Analogamente, um comportamento isolante é notado quando as funções de onda eletrônicas são localizadas, por consequência da desordem forte.

O modelo de Anderson (8), (9), (10), (11), trata de elementos que auxiliam no estudo da natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. O hamiltoniano, que pode ser descrito na representação de Wannier, possui a forma

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (1.25)$$

onde  $|i\rangle$  sao os orbitais atomicos, ortogonais entre si, no sitio  $i$ ,  $\epsilon_i$  e a energia no sitio e  $t_{ij}$  e o elemento de matriz entre os sitios  $i$  e  $j$ , tambem chamado de amplitude de *hopping*, cujo valor decresce com a distancia entre eles. Na eq. (1.25) o termo  $\epsilon_i$  e escolhido aleatoriamente dentro de um intervalo de largura  $W$ , parametro conhecido como largura da desordem.

Para se obter os autoestados deste hamiltoniano, e necessario resolver a equacao de Schrodinger, utilizando a expansao dos autoestados  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ . Obtemos, de (1.25)

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j \quad (1.26)$$

Supondo que as integrais de transferencia possuem a mesma magnitude,  $t_{ij} = t$ , e que agem apenas entre primeiros vizinhos, a equacao (1.26) pode ser escrita como

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_j^{j=z} c_j \quad (1.27)$$

A partir desta ultima equacao podemos analisar os casos limites deste sistema. Quando nao ha desordem, os estados sao estendidos e as energias sao todas iguais, podendo ser escolhidas  $\epsilon_i = 0$ . Temos entao

$$Ec_i = t(c_{i-1} + c_{i+1}) \quad (1.28)$$

Existem funcoes exponenciais complexas que obedecem a equacao (1.28). Fazendo  $c_n = c_0 e^{ink}$ , a equacao (1.28) e satisfeita se  $E = 2t \cos(k)$ , que e o resultado correspondente a banda cristalina da teoria de Bloch ( $-2t < E < 2t$ ). Para o caso em que ha desordem, estados localizados, se considerarmos  $t = 0$  (remocao do acoplamento), teramos os orbitais atomicos como solucao do problema.

### 1.3.1 Desordem correlacionada

Inicialmente observadas por Anderson, as propriedades de localizacao em sistemas desordenados mostravam que a existencia de estados localizados se davam pela presenca da desordem. Atualmente, esses sistemas tem sido um dos temas de estudo mais recorrentes em fisica da materia condensada, em especial, a modificacao nas propriedades da localizacao induzida por correlacoes sobre as distribucoes.

No inicio da decada de 90, o estudo das correlacoes adicionadas a sistemas desordenados era realizado de forma local. Para este caso, a aleatoriedade nos acoplamentos (impurezas, defeitos, etc) era encontrada em alguns sitios, portando, nem todos os estados eram localizados. Um exemplo deste tipo de correlacao e o estudo do Hamiltoniano de Anderson unidimensional para uma liga binaria, cujas energias podem ser  $\epsilon_A$ , com sitios que aparecem

em pares, e  $\epsilon_B$  com probabilidades  $q$  e  $1 - q$  (12).

Um modelo de distribuiao de desordem que  bastante estudado  o tipo dmero. Para este modelo, podemos considerar o Hamiltoniano do modelo tight binding unidimensional, que possui a forma

$$H = \sum_i V_i |i\rangle\langle i| + t[|i\rangle\langle i+1| + |i\rangle\langle i-1|] \quad (1.29)$$

com  $|i\rangle$  sendo o orbital atmico no stio  $i$  e  $V_i$   um potencial aleatrio. Quando escrevemos  $|\psi\rangle = \sum_i \phi_i |i\rangle$ , a equaao de Schrdinger ( $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ ) se torna, em termos das amplitudes de probabilidade

$$t(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) = (E - V_i)\phi_i \quad (1.30)$$

que tambm pode ser escrita em termos de matrizes de transferncia na forma;

$$\phi_{i+1} = T_i \phi_i \quad (1.31)$$

onde

$$\phi_{i+1} = \begin{pmatrix} \phi_{i+1} \\ \phi_i \end{pmatrix}$$

e

$$T_i = \begin{pmatrix} (E - V_i) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A partir da equaao (1.31) temos que

$$T_{n+1} = \prod_{n=0}^i T_n \times \phi_0 \quad (1.32)$$

ou seja, dada a condiao inicial, podemos encontrar as amplitudes da funao de onda em stios posteriores como mostra a equaao (1.32).

Se considerarmos apenas dois tipos de stio, como no caso de dmeros, A e B, com energias  $V_a = V_0$  (que aparecem apenas aos pares) e  $V_b = W$ , respectivamente, com  $E = V_0$  pode-se notar que, para os stios do tipo A, o termo  $(E - V_0)$ , presente na matriz de transferncia se anula. Para este caso, o produto de duas matrizes se torna  $-I$ , ou seja, os dmeros do tipo A no espalham a funao de onda com energia  $E = V_0$ , apenas h uma alteraao de fase, ou seja, a onda se propaga como se no ‘‘percebesse’’ a desordem.

A dificuldade em permanecer com esse tipo de correlaao consistia no fato de que estados suficientemente estendidos podem alterar as propriedades de conduao. Na figura (1.3),

extraída da referência (13) temos a representação de um estado estendido e um estado localizado em um sistema desordenado. Moura e Lyra (14) mostraram, em 1998, que as sequências correlacionadas de longo alcance, diferentemente das primeiras estudadas, em que apenas alguns pontos da cadeia possuíam um certo grau de desordem, eram geradas por vários processos estocásticos na natureza.

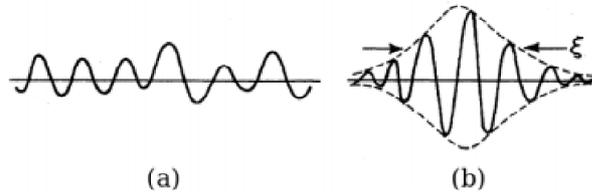


Figura 1.3: Representação de uma função de onda estendida (a) e de uma função de onda localizada num sistema desordenado (b). Fonte: ver texto

Em nosso estudo, as correlações de longo alcance induzem uma dependência nos acoplamentos aleatórios (15),(16). Geralmente, a distribuição que rege esta correlação possui uma densidade espectral do tipo  $S(k) \propto 1/k^\alpha$ , onde  $S(k)$  é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$  e  $k$  é o vetor de onda relacionado com as ondulações no potencial. Os acoplamentos passam, então, a ser escritos na forma

$$V_n = \sum_i^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left( \frac{2\pi kn}{N} + \phi_k \right) \quad (1.33)$$

onde  $\alpha$  passa a controlar o grau de correlação do sistema. Para  $\alpha = 0$ , por exemplo, reproduzimos a situação em que há distribuição uniforme de desordem (caso sem correlação).  $\phi_k$  são fases aleatórias distribuídas no intervalo  $[0, 2\pi]$ .

## 1.4 Aplicação de um campo magnético em uma cadeia de spin

Estudaremos aqui o caso de uma cadeia ferromagnética sem desordem, sob a presença de um campo magnético definido por  $H_n = \mu_B \eta H_0 n$  (17). Este campo é apontado na direção  $\hat{z}$ , cuja norma é uma função da distância  $H_n = Hn$ . Após a inserção de todas as constantes em um único termo, definimos  $H$  como a derivada da energia de interação do campo magnético.

O hamiltoniano de Heisenberg para este sistema é descrito como

$$H = - \sum_n (J_0 \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + \vec{H}_n \cdot \vec{S}_n) \quad (1.34)$$

Considerando o estado fundamental  $|\varphi_0\rangle$  e  $|\varphi_l\rangle = S_l^- |\varphi_0\rangle$ , como na seção 1.2, temos,

$$H|\varphi_l\rangle = \underbrace{-\sum_n J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_l\rangle}_A - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_n J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\varphi_l\rangle}_B - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_n J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\varphi_l\rangle}_C - \underbrace{\sum_n H_n S_n^z |\varphi_l\rangle}_D \quad (1.35)$$

Utilizando as relações de comutação entre os operadores de spins, eq. 1.4, através da inserção de termos nulos em cada parte da eq. 1.36 obtemos as respostas, termo a termo, conforme já mostrado neste capítulo. Resolveremos aqui o termo do campo magnético, único termo ausente na eq. 1.6.

Termo D

$$D = -\sum_{l=1}^N H_l S_l^z |\varphi_n\rangle \quad (1.36)$$

$$D = H_n |\varphi_n\rangle - S |\varphi_n\rangle \quad (1.37)$$

Resultando em

$$H|\varphi_n\rangle = E_0 |\varphi_n\rangle + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\varphi_n\rangle - J_{n,n+1} S |\varphi_{n+1}\rangle + J_{n-1,n} S |\varphi_{n-1}\rangle + H_n |\varphi_n\rangle - S |\varphi_n\rangle = E |\varphi_n\rangle \quad (1.38)$$

É notável, assim como tratado na seção (1.2) que o estado  $|\varphi_l\rangle$  não é autoestado do hamiltoniano (1.34) pois o desvio em um sítio não é localizado. Assim sendo, utilizamos o estado de um mágnon como já apresentado

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_n f_n |\varphi_n\rangle \quad (1.39)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger  $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$ :

$$\frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_n [E_0 + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) + H_n - S] f_n |\varphi_n\rangle - \sum_n J_{n,n+1} S f_n |\varphi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n} S f_n |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} E \sum_n f_n |\varphi_n\rangle \quad (1.40)$$

Somando sobre todos os estados

$$\sum_n \{[E_0 + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) + H_n - S]f_n - J_{n-1,n}Sf_{n-1} - J_{n,n+1}Sf_{n+1}\}|\varphi_n\rangle = \quad (1.41)$$

$$E \sum_n f_n|\varphi_n\rangle$$

obtemos, então, em termos das amplitudes de probabilidade

$$S(J_{n+1,n} + J_{n,n-1})f_n - SJ_{n-1,n}f_{n+1} - SJ_{n,n+1}f_{n-1} + H_n f_n = \varepsilon f_n \quad (1.42)$$

com  $\varepsilon = E - E_0 + S$ .

Para o caso puro, em que  $J_n = J_0 = \text{constante}$ , a eq. 1.42 se torna

$$(2J_0S + H_n)f_n - J_0Sf_{n-1} - J_0Sf_{n+1} = \varepsilon \quad (1.43)$$

Este resultado foi encontrado por Kosevich (17) em 2013 e faremos uso do mesmo em nosso modelo incluindo correlações de longo alcance aos acoplamentos  $J_n$ . O usaremos em uma rotina numérica para verificar os resultados que serão apresentados no próximo capítulo.

# Capítulo 2

## Dinâmica de Mágns

### 2.1 O Modelo

O problema de mágns em sistemas desordenados é um problema interessante e já bem estabelecido. Em geral, quando escrevemos "sistemas desordenados" estamos nos referindo a sistemas cuja distribuição de desordem tem sua transformada de Fourier como sendo um ruído branco, ou seja, não há correlações intrínsecas. Neste tipo de sistema, tradicionalmente, a desordem gera o espalhamento das funções de onda de um mágno e, por consequência, a localização da maioria dos mágns. O modo de energia zero, um modo uniforme, possui um caráter estendido. Algo que tem sido bastante estudado na literatura é o efeito de desordem correlacionada sobre a natureza dos autoestados de mágns. Outro tema importante consiste na competição entre desordem correlacionada e interações das quasi-partículas com campos externos. Como já mencionamos no capítulo 1, em diversos trabalhos, uma das estratégias utilizadas foi a de introduzir distribuições de desordem com correlações de longo alcance. No caso de correlações de longo alcance a função de correlação interna decai, aproximadamente, com a lei de potência. Um dos trabalhos que apresentaram de forma pioneira este problema foi a tese de doutorado de F.A.B.F. (7). Neste trabalho foi escolhido um tipo de desordem correlacionada que segue o movimento Browniano fracionário. Uma das maneiras mais simples de gerar este tipo de desordem consiste em escrever uma formulação de Fourier mantendo uma fonte de desordem harmônica, entretanto fixando a densidade espectral como sendo uma lei de potência  $S(k) = 1/k^\alpha$ . O expoente  $\alpha$  controla o grau das correlações na desordem (14). Para  $\alpha = 0$  recupera-se o problema tradicional

onde a distribuição de desordem é não correlacionada. Contudo, para  $\alpha$  grande a densidade espectral acaba filtrando parte dos vetores de onda  $k$  grandes e assim temos uma distribuição de desordem correlacionada. Matematicamente podemos provar que a função de autocorrelação interna é proporcional a transformada de Fourier de  $S(k)$ , uma lei de potência para longas distâncias. Neste capítulo vamos apresentar nossos estudos sobre a natureza dos autoestados de um mágnon em sistemas com desordem correlacionada e sob o efeito de um campo magnético externo não uniforme. Vamos considerar um campo magnético que cresce linearmente ao longo da cadeia magnética considerada. Vamos apresentar de forma sucinta um breve resumo do formalismo necessário, as técnicas numéricas utilizadas e por fim nossos resultados.

A natureza dos autoestados de um mágnon pode ser obtida através da solução numérica da equação de Schrödinger. Vamos focar boa parte de nossa análise na evolução temporal de um pacote inicialmente localizado. Vamos descrever de forma resumida a equação de Schrödinger para este problema, bem como apresentar nossa metodologia de solução numérica. A equação de Schrödinger independente do tempo basicamente consiste das relações de recorrência que obtivemos no capítulo anterior:

$$S(J_{n+1,n} + J_{n,n-1})f_n - SJ_{n-1,n}f_{n+1} - SJ_{n,n+1}f_{n-1} + H_n f_n = \varepsilon f_n \quad (2.1)$$

e sua importância está, entre outros aspectos, em poder obter uma representação matricial do Hamiltoniano na base de estados de desvio de spin localizados em um dado sítio  $n$ . Estas relações de recorrência, quando escritas em forma matricial, consistem em uma matriz tridiagonal simétrica. A solução numérica é obtida através da diagonalização da matriz efetiva. Em nosso trabalho utilizamos a rotina *tqli* (18), que é uma das mais apropriadas para se encontrar autovetores e autovalores de uma matriz tridiagonal real simétrica. Para investigar a dinâmica do mágnon precisamos resolver a equação que controla a evolução temporal do sistema

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

Utilizando a expansão  $|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t)|\varphi_n\rangle$  podemos escrever

$$S(J_{n+1,n} + J_{n,n-1})f_n(t) - SJ_{n-1,n}f_{n+1}(t) - SJ_{n,n+1}f_{n-1}(t) + H_n f_n(t) = i\hbar \frac{d}{dt} f_n(t) \quad (2.3)$$

com  $n = 1, \dots, N$ . A solução numérica será feita considerando uma dada condição inicial  $|\psi(t=0)\rangle$ , que em nosso estudo é uma gaussiana de largura 1 centrada na “metade” da cadeia. Para encontrar a solução numérica desta equação ou seja, os coeficientes  $f_n(t)$ , vamos aplicar o seguinte formalismo. Expandimos, inicialmente, a condição inicial em termos dos autovetores do Hamiltoniano:

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_j (\langle\psi(t=0)|\psi_j\rangle) |\psi_j\rangle \quad (2.4)$$

onde os autovetores  $|\psi_j\rangle$  são as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo ( $H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$ ). Se faz necessário enfatizar que  $|\psi_j\rangle$  assim como  $E_j$  serão obtidos através da diagonalização numérica da eq. 2.1. A evolução temporal do estado inicial  $|\psi(t=0)\rangle$  pode ser obtida através da aplicação do operador de evolução temporal ( $e^{-iHt}$ ):

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt} |\psi(t=0)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \sum_j (\langle\psi(t=0)|\psi_j\rangle) |\psi_j\rangle e^{-iE_j t} |\psi_j\rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

Agora vamos escrever a expansão de todos os vetores usando a base de desvios de spin localizadas  $\{|n\rangle\}$ :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n f_n(t) |n\rangle \\ |\psi(t=0)\rangle &= \sum_n f_n(0) |n\rangle \\ |\psi_j\rangle &= \sum_n f_n^j |n\rangle \end{aligned}$$

substituindo na eq. 2.5 teremos :

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_j \left( \sum_m f_m(0) f_m^j \right) e^{-iE_j t} \sum_n f_n |n\rangle$$

Logo, permutando o somatório em  $n$  com o somatório em  $j$ , temos:

$$f_n(t) = \sum_j \left( \sum_m f_m(0) f_m^j \right) e^{-iE_j t} f_n \quad (2.6)$$

Este formalismo é bastante preciso e consegue manter a norma da função de onda consideravelmente controlada mesmo para tempos longos. Em nossos estudos a norma  $N$  da função de onda foi mantida sempre dentro do seguinte critério de convergência:  $|1 - N| = |1 - |\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle|^2| = |1 - \sum_n |f_n(t)|^2| < 10^{-8}$ . Este formalismo é bem mais preciso do que tentar resolver numericamente na "força bruta" a eq. 2.3 usando técnicas tradicionais como Runge-Kutta ou outros métodos (18), (19), (20). Entretanto, devido a necessidade de diagonalizar totalmente a matriz Hamiltoniana este procedimento pode ser um pouco "caro" do ponto de vista computacional. O tempo computacional pode crescer bastante se o sistema de interesse tiver muitos sítios.

Como mencionamos anteriormente, em nosso estudo vamos analisar a dinâmica de um mágnon em sistemas com desordem correlacionada e na presença de um campo magnético não uniforme. A desordem correlacionada será introduzida considerando os acoplamentos  $J_n$  como sendo uma sequência aleatória com correlações internas. Vamos considerar o mesmo formalismo usando no trabalho de Moura e Lyra (14):

$$J_n = J_0 + V_n \quad (2.7)$$

onde

$$V_n = \sum_i^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left( \frac{2\pi kn}{N} + \phi_k \right) \quad (2.8)$$

onde  $\alpha$  controla o grau de correlação da desordem,  $\phi_k$  são fases aleatórias distribuídas no intervalo  $[0, 2\pi]$  e  $J_0 = 5$  foi escolhido desta forma para evitar valores de acoplamentos nulos ou negativos. Enfatizamos que os números  $V_n$  obtidos na eq.2.8 são normalizados de maneira tal a manter média 0 e desvio padrão 1.

## 2.2 Resultados

Na tese de doutorado de F.A.B.F. (7) foi mostrado que um sistema com desordem correlacionada possui uma transição de Anderson para  $\alpha > 1$ , apresentando uma fase metálica, ou seja, uma região de energias baixas em que os mágnons são estendidos. Neste trabalho, vamos estudar a competição com o campo magnético considerando os dois regimes de correlação:  $\alpha \leq 1$  e  $\alpha > 1$ .

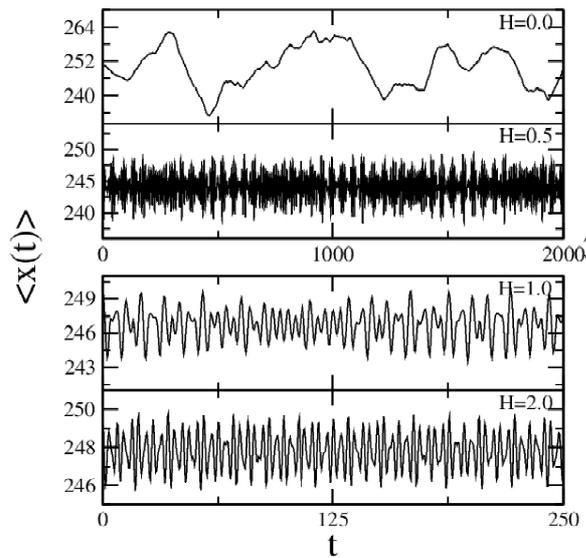


Figura 2.1: Dinâmica de um mágnon para  $\alpha = 0.0$ . Fonte: autora

As figuras 2.1 e 2.2 nos mostram os resultados de nossos cálculos numéricos considerando o grau de correlação inexistente  $\alpha = 0.0$  ou fraco  $\alpha = 0.5$  e  $\alpha = 1.0$ . Podemos ver na figura 2.1 que o pacote, que foi inicialmente abandonado no centro da cadeia, fica se movendo em torno da posição inicial com pouca mobilidade. A medida que vamos crescendo o valor de  $H_n$ , que é a energia de interação do campo magnético com o mágnon, podemos notar, através da diminuição da amplitude de oscilação, que este pacote fica bem mais próximo da posição inicial. Outro aspecto bem claro em nossas simulações é que o movimento oscilatório do pacote não apresenta um padrão coerente bem definido. De fato, os resultados encontrados não sinalizam para a existência de uma oscilação bem definida com uma frequência dominante. Este padrão é semelhante a localização dinâmica que um elétron sofre quando é submetido a um campo elétrico estático. A medida que vamos aumentando o parâmetro  $\alpha$  (figuras 2.2(a) e (b)) observamos resultados semelhantes, o mágnon continua preso em torno da posição

inicial, mas com oscilações que, embora sem uma frequência bem definida, já começam a apresentar um caráter um pouco mais organizado.

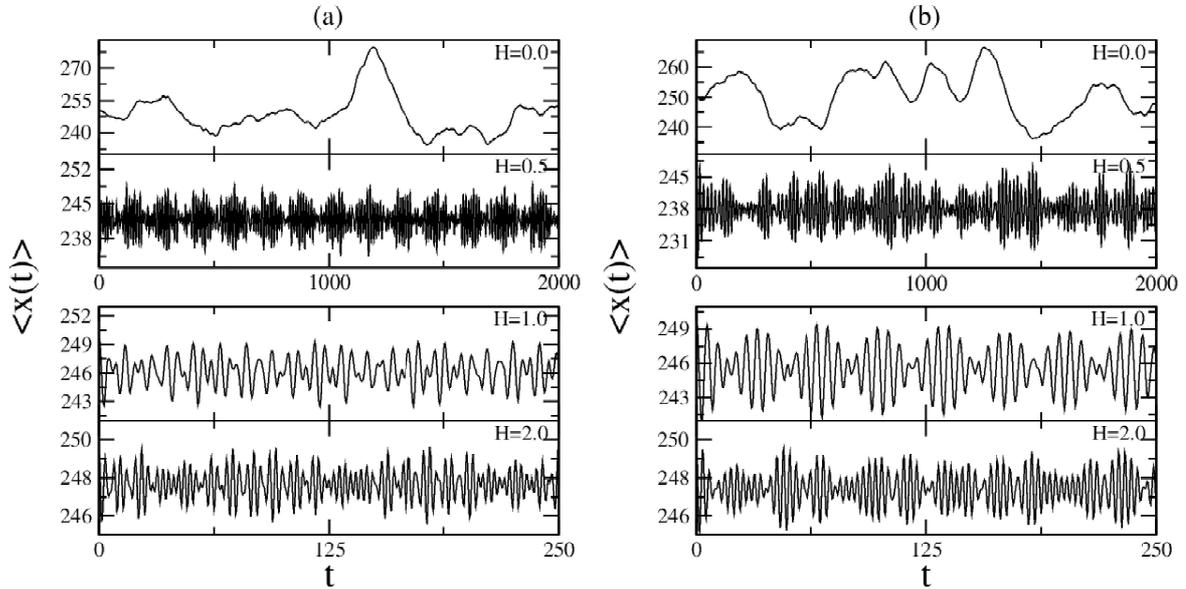


Figura 2.2: Dinâmica de um mágnon para (a)  $\alpha = 0.5$  e (b)  $\alpha = 1.0$ . Fonte: autora

Iremos analisar agora o comportamento do mágnon para graus de correlação alta,  $\alpha = 1.5, 2.0$  e  $2.5$ , apresentado nas figuras 2.3 e 2.4. Diferente da análise anterior, podemos notar

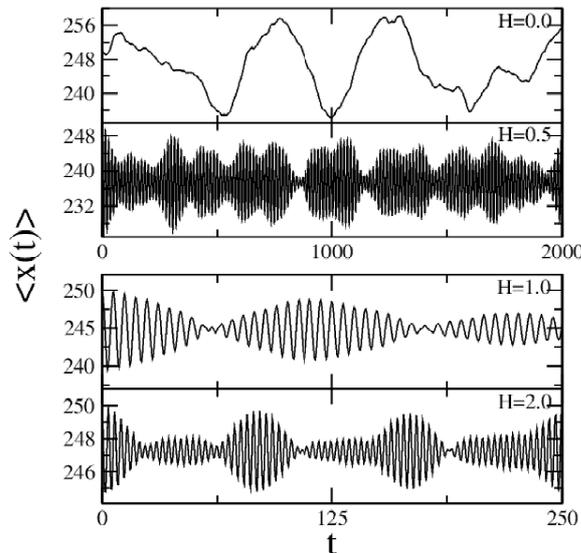


Figura 2.3: Dinâmica de um mágnon para  $\alpha = 1.5$ . Fonte: autora

que mesmo na ausência de campo magnético, o mágnon possui uma certa mobilidade em relação a posição de equilíbrio, embora neste primeiro caso ( $H=0.0$ ) a mobilidade ainda seja

baixa já que o sistema não possui velocidade inicial. A medida que a energia de interação do mágnon com o campo magnético é acrescida podemos observar um padrão oscilatório um pouco mais definido, podendo estimar, inclusive, a frequência dominante desse padrão de oscilação. Na figura 2.5 mostramos a transformada de Fourier para três destes casos e,

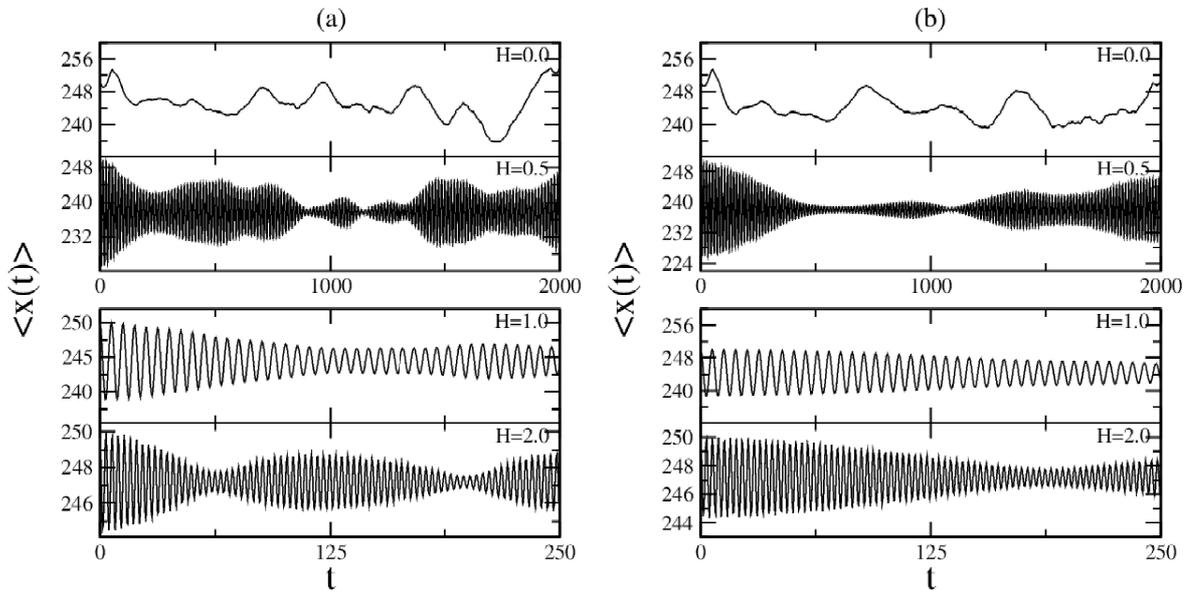


Figura 2.4: Dinâmica de um mágnon para (a)  $\alpha = 2.0$  e (b)  $\alpha = 2.5$ . Fonte: autora

conseguimos observar que, além de possuir uma frequência predominante bem definida, ela é da ordem da derivada da energia de interação do campo,  $H$ .

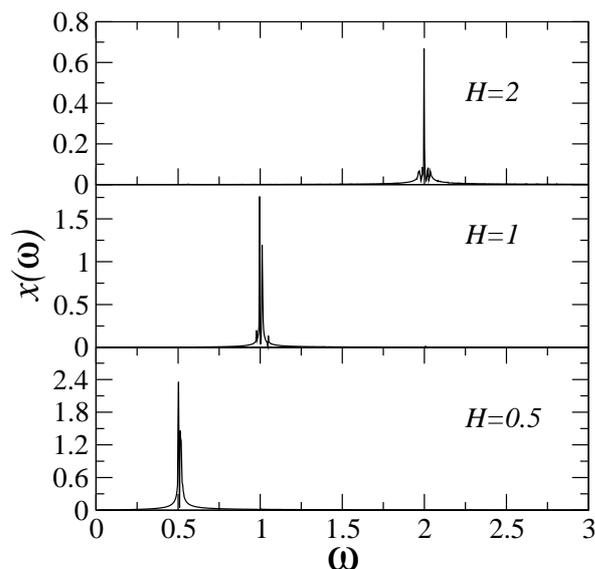


Figura 2.5: Transformada de Fourier para  $\alpha = 2.5$ . Fonte: autora

Podemos aqui fazer um paralelo entre o problema estudado e o problema já conhecido na

literatura de um elétron se movendo em uma cadeia unidimensional cristalina na presença de um campo elétrico estático. Para o caso eletrônico pode-se demonstrar, matematicamente, que o vetor de onda do elétron cresce linearmente com o tempo. A demonstração é simples e rápida. O hamiltoniano do problema de um elétron em uma cadeia linear cristalina pode ser escrito como:

$$H = p^2/2m + V(x) + eEx \quad (2.9)$$

onde  $p$  é o momento,  $V(x)$  o potencial cristalino (que pode ser considerado nulo neste caso, sem perdas de generalidades),  $e$  é a carga do elétron e  $E$  é o campo elétrico estático paralelo a cadeia linear. A equação que controla a dinâmica temporal do momento  $p$  do elétron é dada por:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -eE \quad (2.10)$$

Considerando uma aproximação semiclássica em nosso estudo podemos escrever  $p = \hbar k$  logo temos que:

$$\dot{k} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{eE}{\hbar} \quad (2.11)$$

Resolvendo esta equação temos (considerando  $e = \hbar = 1$ )

$$k(t) = -Et + k_0 \quad (2.12)$$

Por outro lado, sabemos que o vetor de onda  $k$  de um elétron em um cristal é restrito a zona de Brillouin que vai de  $-\pi/a$  a  $\pi/a$ . Devido a esta restrição, a medida que o momento evolui com o tempo e chega ao extremo da zona de Brillouin, ele deve, obrigatoriamente, voltar para o outro lado da banda. Desta forma podemos calcular o tempo que o elétron leva para percorrer toda a zona de Brillouin como sendo  $t_b = 2\pi/E$ . A frequência de oscilação do elétron dentro da zona de Brillouin fica então  $\omega_b = E$ . Espacialmente o que acontece é também uma oscilação pois quando o elétron chega a um dos extremos da banda e é injetado

no outro extremo o sinal do vetor de onda muda o que pode ser aferido espacialmente como uma inversão do sentido de movimento. Podemos considerar que com o mágnon aconteceria algo parecido, uma vez que a eq. 2.1 é matematicamente similar a equação de um elétron em uma cadeia atômica. Desta forma seguindo este raciocínio, podemos fazer uma estimativa de quanto deveria ser a frequência de oscilação dos mágnons com base nesta similaridade matemática. A interação do campo magnético com o mágnon gera um termo diagonal  $H_n$  que, em nosso caso foi escolhido com uma dependência linear com a posição dos spins:  $H_n = Hn$ . Este termo diagonal é muito parecido com o trabalho da força elétrica  $W \propto En$ . Ou seja, a energia de interação  $H_n$  do campo magnético tem um status semelhante ao termo da força elétrica no caso eletrônico. Desta forma, seguindo a abordagem semiclássica que apresentamos, a frequência de oscilação dos mágnons deveria ser  $\omega_{\text{mágnon}} = H$ . Observe que este resultado está em boa concordância com o cálculo numérico da transformada de Fourier do padrão oscilatório dos mágnons (ver. fig.2.5).

Dentro da teoria de oscilação de Bloch para elétrons existe uma análise que compara a largura  $W$  da banda cristalina com a região espacial onde o elétron oscila. O elétron se move dentro da zona de Brillouin de  $-\pi/a$  a  $\pi/a$ , o que corresponde para uma cadeia linear com energia de hopping  $t = 1$  ao intervalo  $[-2t, 2t]$ . Espacialmente, ele tem uma distância  $L$  cuja relação com  $W$  é dada por

$$L = \frac{W}{E} \quad (2.13)$$

onde  $E$  é o campo elétrico externo aplicado.

Faremos aqui uma análise semelhante para a oscilação no caso dos mágnons. Vamos calcular a largura de energia  $\Delta E_{\text{estendido}}$  onde os mágnons tem mobilidade via cálculo do comprimento de localização  $\lambda$ . Vamos utilizar a técnica de matriz de transferência apresentada no capítulo 1. Vamos medir  $\Delta E_{\text{estendido}}$  através do calculo de  $\lambda$  para o problema sem campo magnético e vamos então poder comparar com o tamanho da região onde os mágnons estão oscilando. Na figura 2.6 apresentamos um gráfico do inverso do comprimento de localização ( $1/\lambda$ ) versus a energia para três valores de  $\alpha$ . Quando o sistema apresenta uma fase metálica,  $1/\lambda$  fica da ordem de  $1/N$ , sendo  $N$  o tamanho do sistema ( $N = 5000$

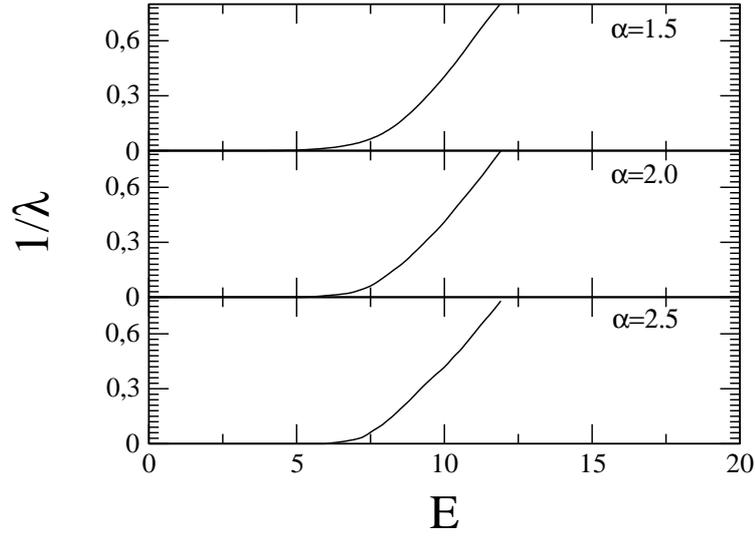


Figura 2.6: Comprimento de Localização. Fonte: autora

em nosso estudo). A posição aproximada onde a fase metálica termina para  $\alpha = 1.5$  é da ordem de 4.5, para  $\alpha = 2.0$  é da ordem de 5.0 e para  $\alpha = 2.5$  é da ordem de 6.0. Desta forma, temos a largura  $\Delta E_{estendido}$  em energia na qual o mágnon oscila. Agora vamos estimar  $\Delta E_{estendido}$  através do tamanho da região espacial onde o mágnon fica oscilando. Vamos medir o tamanho  $\Delta x$  da região espacial através do gráfico da posição média em função do tempo (ver fig.2.3). Através desta quantidade sabemos que a largura  $\Delta E_{estendido}$  pode ser obtida como  $\Delta E_{estendido} = \Delta x H$ . Dado isso, nos é permitido encontrar  $\Delta E_{estendido} \approx 4.0$  para  $\alpha = 1.5$ ,  $\Delta E_{estendido} \approx 5.0$  para  $\alpha = 2.0$  e  $\Delta E_{estendido} \approx 6.0$  para  $\alpha = 2.5$ , o que condiz com os resultados encontrados via calculo do comprimento de localização dentro de de nossa tolerância numérica. Os erros numéricos aqui são menores que 10%. Ou seja, nossa análise numérica mostra fortes indícios que dentro da formulação de um mágnon, a presença de um campo magnético com crescimento linear competindo com desordem correlacionada promove oscilações magnéticas semelhantes as oscilações de Bloch para elétrons. A frequência das oscilações dos estados de um mágnon podem também ser previstas através de uma abordagem semiclássica. A amplitude das oscilações magnéticas pode ser utilizada para se estimar a largura da banda de mágnons livres existente no modelo.

# Capítulo 3

## Conclusões

Neste trabalho de mestrado investigamos a natureza dos estados de um mágnon em cadeias desordenadas na presença de um campo magnético. Em nosso estudo, analisamos o modelo de Heisenberg ferromagnético unidimensional dentro do sub-espço de um mágnon. Os acoplamentos entre os spins foram considerados como sendo uma distribuição de desordem com correlações de longo alcance. Na abordagem considerada aqui utilizamos uma distribuição de desordem com densidade espectral lei de potência  $S(k) \propto k^{-\alpha}$ . Para  $\alpha = 0$  recuperamos o modelo de Heisenberg com desordem não correlacionada. Para  $\alpha > 0$  o sistema apresenta desordem correlacionada. Em alguns estudos anteriores foi mostrado que este tipo de modelo apresenta estados de um mágnon estendidos na região de energia alta se  $\alpha > 1$ . Em nosso estudo introduzimos um campo magnético externo que cresce proporcional a distância. Nosso estudo foi feito através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Através da diagonalização do Hamiltoniano calculamos o operador de evolução temporal e assim encontramos a evolução temporal de um pacote gaussiano inicialmente localizado dentro da cadeia. Nosso estudo mostrou que, para correlações fracas ( $\alpha < 1$ ) o pacote magnético fica localizado de forma dinâmica pelo campo externo. O fenômeno da localização dinâmica também acontece para o caso de um elétron em uma cadeia cristalina sob a ação de um campo elétrico estático e uniforme. Para ( $\alpha > 1$ ) nossos resultados sugerem um perfil oscilatório semelhante ao perfil de oscilações de Bloch, também encontrado, por exemplo, em uma cadeia cristalina sob a ação de um campo elétrico estático e uniforme. Medimos a frequência destas oscilações e observamos que a frequência

é compatível com a derivada espacial da energia de interação do mágnon com o campo magnético. Utilizando uma abordagem semiclássica similar a abordagem eletrônica conseguimos explicar este comportamento.

Portanto, em nosso trabalho , mostramos a existência de oscilações de Bloch para mágnons no modelo de Heisenberg com campo magnético não uniforme competindo com desordem correlacionada. Nossas perspectivas consistem investigar a dependência desta oscilação com a dimensão do sistema bem como o efeito de interações com outros mágnons.

# Referências

- 1 KITTEL, C. *Introduction Solid State Physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1976.
- 2 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Electrodynamics*. [S.l.]: Prentice-Hall, 1999.
- 3 DIAS, W. S. *Propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interação*. Tese (Doutorado) — UFAL, Maceió, 2011.
- 4 BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, p. 555–600, Jul. 1929. Disponível em: <<http://adsabs.harvard.edu/abs/1929ZPhy...52..555B>>.
- 5 DUNLAP, D. H.; KENKRE, V. M. Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field. *Physical Review B*, v. 34, p. 3625–3633, Sep. 1986. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.3625>>.
- 6 EVANGELOUS, S. N.; KATSANOS, D. E. Super-diffusion in random chains with correlated disorder. *Physics Letters A*, Elsevier B.V., v. 164, p. 456–464, Apr. 1992.
- 7 MOURA, F. A. B. F. D. *Transição de Anderson em Sistemas com Baixa Dimensionalidade com Desordem Correlacionada*. Tese (Doutorado) — UFPE, Recife, 2003.
- 8 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, American Physical Society, v. 109, p. 1492–1505, Mar. 1958.
- 9 ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 42, p. 673–676, Mar. 1979.

- 10 KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, v. 56, p. 1469, Dez. 1993. Disponível em: <[http://iopscience.iop.org/0034-4885/56/12/001-  
/](http://iopscience.iop.org/0034-4885/56/12/001-/)>.
- 11 NAZARENO, H. N.; E., B. P.; RODRIGUES, E. S. Quantum percolation in a two-dimensional finite binary alloy: Interplay between the strength of disorder and alloy composition. *Physical Review B*, v. 66, p. 4, Jul. 2002. Disponível em: <<http://journals.aps.org/prb/pdf/10.1103/PhysRevB.66.012205>>.
- 12 MOURA, F. A. B. F. D. *Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada*. Dissertação (Mestrado) — UFAL, Maceió, 1999.
- 13 MIRANDA, D. C. B. *Efeitos de Desordem e Correlação Eletrônica numa Abordagem Local*. Dissertação (Mestrado) — UNICAMP, Campinas, 2009.
- 14 F.A.B.F, D. M.; M.L., L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 81, p. 3735–3738, Oct. 1998.
- 15 MOURA, F. A. B. F. D. et al. Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 66, p. 1–5, Jul 2002.
- 16 LIMA, R. P. A. et al. Magnon delocalization in ferromagnetic chains with long-range correlated disorder. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 65, Feb. 2002.
- 17 KOSEVICH, Y. A.; GANN, V. V. Magnon localization and bloch oscillations in finite heisenberg spin chains in an inhomogeneous magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 25, p. 1–11, May. 2013.
- 18 PRESS, W. H. *Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing*. [S.l.]: Press Syndicate of the University of Cambridge, 1996.
- 19 DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 91, Nov. 2003.

- 
- 20 MOURA, F. A. B. F. D. et al. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder. *Europhysics Letters*, EDP Sciences, v. 66, May. 2004.