

FAGNER MURUCI DE PAULA

INFLUÊNCIA DE VACÂNCIAS DE SPIN NA DINÂMICA
DE VÓRTICES EM SISTEMAS MAGNÉTICOS
BIDIMENSIONAIS

Tese apresentada à Universidade
Federal de Viçosa como parte das exigên-
cias do Programa de Pós-Graduação em
Física Aplicada para obtenção do título
de *Magister Scientiae*

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2006

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

P324i
2006

Paula, Fagner Muruci de, 1983-
Influência de vacâncias de spin na dinâmica de vórtices
em sistemas magnéticos bidimensionais / Fagner Muruci
de Paula. – Viçosa : UFV, 2006.
xi, 58f. : il. ; 29cm.

Orientador: Afranio Rodrigues Pereira.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 55-58.

1. Cristais - Defeitos. 2. Ferromagnetismo.
3. Anisotropia. 4. Métodos de simulação.
I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

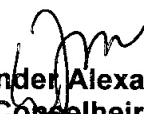
CDD 22.ed. 530.411

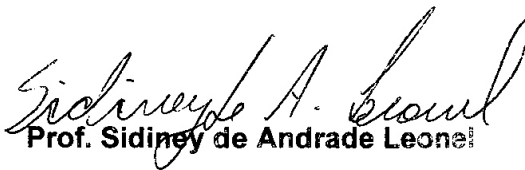
FAGNER MURUCI DE PAULA

**INFLUÊNCIA DE VACÂNCIAS DE SPIN NA DINÂMICA
DE VÓRTICES EM SISTEMAS MAGNÉTICOS
BIDIMENSIONAIS**

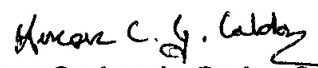
Tese apresentada à Universidade
Federal de Viçosa como parte das exigên-
cias do Programa de Pós-Graduação em
Física Aplicada para obtenção do título
de *Magister Scientiae*

Aprovada: 21 de março de 2006.


Prof. Winder Alexander Moura Melo
(Conselheiro)


Prof. Sidney de Andrade Leonel


Prof. Ismael Lima Menezes Sobrinho


Prof. Heron Carlos de Godoy Caldas


Prof. Afrânio Rodrigues Pereira
(Orientador)

À minha mãe Cléia Aparecida Muruci de Paula,
e ao meu pai Fábio Lúcio de Paula.

Agradecimentos

- À UFV e ao Departamento de Física pela oportunidade de realizar este trabalho.
- À Capes pelo apoio financeiro.
- Ao professor Afranio pela proposta de trabalho e pela excelente orientação.
- Aos professores e funcionários do Departamento de Física pelos bons conselhos e pelas freqüentes dúvidas esclarecidas.
- Aos companheiros de curso pelo agradável convívio desde o início da graduação.
- A todos os amigos que fiz em Viçosa, sem esquecer os amigos de Guaçuí.
- À Kelly pelo apoio fundamental e por estar ao meu lado nos momentos diversos.
- Aos meus pais e familiares pelo apoio e incentivo nos estudos.
- A Deus por tudo.

Conteúdo

Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	ix
Resumo	x
Abstract	xi
1 Introdução	1
2 Considerações Gerais	4
2.1 O Hamiltoniano de Heisenberg: Isotrópico e Anisotrópico	4
2.2 O Modelo XY em Duas Dimensões	6
2.3 O Limite Contínuo do Modelo XY	8
2.4 Monte Carlo	11
2.5 Dinâmica de Spins	15
2.6 Os Vórtices	16
2.7 A Transição de Fase de Kosterlitz e Thouless	18
2.8 Espalhamento de Nêutrons	21
2.9 A Inclusão de Impurezas Não-Magnéticas no Modelo XY	25
3 Vórtice Magnético Sobre uma Superfície Não Simplesmente Conexa	30
3.1 Cálculos Analíticos	30
3.2 Simulações	37
4 Função Correlação Dinâmica em Ferromagnetos 2D com Anisotropia de Plano-Fácil Contendo uma Porcentagem de Impurezas Não-	

Magnéticas	40
4.1 Simulações de Monte Carlo e Dinâmica de Spins em Sistemas Diluídos .	41
4.2 Resultados das Simulações	43
4.3 Cálculos analíticos	47
5 Conclusões	53
Referências	55

Lista de Figuras

2.1	Configurações de mínima energia para o caso ferromagnético (esquerda) e antiferromagnético (direita).	5
2.2	Rede quadrada de spins indicando os quatro sítios que interagem com o sítio genérico i	8
2.3	Esquema de um spin clássico com orientação determinada pelos ângulos esféricos.	10
2.4	Orientação espacial do spin antes (esquerda) e após (direita) seu deslocamento em relação ao campo efetivo.	14
2.5	Vórtice com carga topológica $q = +1$. O símbolo positivo indica o centro da estrutura.	18
2.6	Vórtice com carga topológica $q = -1$. O símbolo negativo indica o centro da estrutura.	18
2.7	Par vórtice-antivórtice.	20
2.8	Representação gráfica geral de uma experiência de espalhamento de nêutrons. Após a interação nêutrons-amostra o momento $\mathbf{q}$ e a energia $\hbar\omega$ são absorvidos pela amostra.	22
2.9	Fator de estrutura planar, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, como função da frequência ω para diversos valores de temperatura. A temperatura de transição é $T_{KT} \sim 0.700J/k_B$. Em todos os gráficos, os quais foram obtidos na Ref.[25], fixou-se $L = 128a$ e $\vec{q} = (\pi/32, 0)$	24

2.10	Representação no contínuo de um sistema contendo apenas uma vacância de spin. A parte externa ao círculo representa a parte do plano que participa da interação magnética. Por outro lado, a parte interna indica a região do plano que não possui magnetismo.	26
2.11	Configuração do vórtice antes (esquerda) e após (direita) 70 passos de Runge-Kutta de tamanho $\Delta t = 0.04J^{-1}$. O quadradinho preto indica a posição da vacância.	27
2.12	Gráfico do potencial efetivo de interação vórtice-vacância em função da razão r_1/a	28
2.13	Posição do centro do vórtice como função do tempo para $L = 100a$ e sua transformada de Fourier.	29
3.1	Um vórtice centrado na origem $(0, 0)$ e dois discos não-magnéticos localizados em $\vec{r}_1 = (x_1, 0)$ e $\vec{r}_2 = (x_2, y_2)$. A distância entre os buracos é $p = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 $. .	33
3.2	Configurações dos três defeitos correspondentes as energias E_{1v} (esquerda) e E_{2v} (direita).	35
3.3	Potenciais ξ_1 (curva pontilhada) e ξ_2 (curva sólida) como funções de p . Note que para $p > 1.087a$, $\xi_2 < \xi_1$	35
3.4	Configuração inicial com um vórtice centrado na origem e duas vacâncias de spin (quadrados próximos ao centro do vórtice) separadas por uma distância $p \simeq 3.16a$	38
3.5	Estado final da Fig. (3.4) após 10^4 passos de tempo o núcleo do vórtice posiciona-se no centro de uma vacância.	39
3.6	Configuração antes (esquerda) e após (direita) 10^4 passos de tempo. Neste caso ($p = a$), o vórtice desloca-se da origem para o ponto central da reta que ligas as vacâncias.	39
4.1	Fator de estrutura planar $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para $T = 0.350J/k_B$, $\vec{q} = (\pi/4a, 0)$, $L = 64a$ e em três concentrações de impureza $\rho_v = 0.00, 0.16$ e 0.20	43

4.2	$\log[S_{xx}(\vec{q}, \omega)]$ em função de ω para diversos valores de q . Note que a posição do pequeno pico inelástico (indicada pela seta) é independente de q	44
4.3	Comportamento de $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para algumas concentrações de impureza ρ_v	44
4.4	$S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para alguns valores de L	45
4.5	O fator $C(\rho_v, T)$ em função de ρ_v para $L = 96a$ e $T = 0.200J/k_B$. A linha pontilhada é um ótimo ajuste para os dados. Observe que $C(\rho_v \rightarrow 0, T) \rightarrow 12.09Ja$	46
4.6	Gráfico de $C(\rho_v, T)$ contra ρ_v para as temperaturas $T = 0.050$, $T = 0.250$, $T = 0.450$ em unidades de J/k_B . O gráfico interno, $C(\rho_v \rightarrow 0, T)$ em função de T , indica que $C(\rho_v \rightarrow 0, T \rightarrow 0) \rightarrow 13.00Ja$	47

Lista de Tabelas

4.1	Parâmetros de controle do Monte Carlo.	42
-----	--	----

Resumo

PAULA, Fagner Muruci de, M.S., Universidade Federal de Viçosa, Março, 2006. **Influência de Vacâncias de Spin na Dinâmica de Vórtices em Sistemas Magnéticos Bidimensionais.** Orientador: Afranio Rodrigues Pereira; Conselheiros: Winder Alexander Moura Melo e Ricardo Reis Cordeiro.

Neste trabalho estudamos a dinâmica de spins no modelo XY 2D clássico, incluindo impurezas não-magnéticas. Os resultados analíticos, testados por simulações, indicam duas formas de "aprisionar" um vórtice por meio de duas vacâncias de spin. Além disso, revelam uma interação efetiva do tipo atrativa entre estes defeitos. Analisamos também a função espalhamento de nêutrons $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ para um sistema contendo uma porcentagem de sítios não-magnéticos. O pico central e o de ondas de spin obtidos em nossas simulações são completamente diferentes do caso puro e, em adição, um pequeno pico inelástico surge. Propomos uma teoria fenomenológica baseada na interação vórtice-vacância para explicar as modificações observadas.

Abstract

PAULA, Fagner Muruci de, M.S., Universidade Federal de Viçosa, March, 2006. **Influence of Spin Vacancies in the Vortex Dynamics in Two-Dimensional Magnetic Systems.** Adviser: Afranio Rodrigues Pereira; Committee members: Winder Alexander Moura Melo and Ricardo Reis Cordeiro.

In this work we have studied the spin dynamics in the two-dimensional classical XY model, including nonmagnetic impurities. The analytic results, tested by simulations, indicate two forms of "pinning" a vortex by means of two spin vacancies. Besides, they reveal an effective interaction of attractive nature among these defects. We have also analyzed the neutron scattering function $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ for a system containing a percentage of nonmagnetic sites. The central and spin waves peaks obtained in our simulations are completely different from the that of the pure case and, in addition, a small inelastic peak arises. We propose a phenomenological theory based on the vortex-vacancy interactions to explain the observed modifications.

Capítulo 1

Introdução

No final do século XIX e começo do século XX, houve uma enorme busca por modelos capazes de explicar o magnetismo desde o ponto de vista corpuscular da matéria. Essa busca foi motivada principalmente pela formulação de Maxwell para a Eletrodinâmica e as primeiras idéias da Mecânica Estatística de Boltzmann. Entretanto, não demorou para se descobrir que os modelos baseados na Mecânica Clássica não podiam descrever corretamente os fenômenos magnéticos conhecidos. Especificamente, em 1919 J. H. van Leeuwen, um estudante de doutorado de Niels Bohr, mostrou que a estatística de Boltzmann aplicada em qualquer sistema clássico prediz propriedades de equilíbrio independentes do campo magnético aplicado ¹, o qual mostra a necessidade de uma teoria quântica para explicar qualquer fenômeno magnético[1].

Na década de 30, Dirac, Heisenberg e outros propuseram um modelo quântico para o magnetismo, baseado na interação entre momentos magnéticos de spin vizinhos[2]. O caráter dessa interação é dada por uma constante de acoplamento J , de forma que dois spins terão uma preferência energética de ficarem paralelos ou antiparalelos entre si, dependendo do valor dessa constante. Neste modelo, o efeito de um campo magnético externo aparece como uma forma de anisotropia ou tendência adicional dos spins se alinharem em uma direção preferencial no espaço.

No término da década de 70, o estudo do modelo de Heisenberg bidimensional

¹Este resultado é conhecido como o teorema de Bohr-van Leeuwen.

(2D), assim como de outras variantes mais restritas como o modelo XY e o modelo de Ising, passou a ser de intenso interesse na área de magnetismo. Isso deveu-se às possibilidades de fabricações de materiais quase-bidimensionais que se ajustam bastante a estes modelos e, é claro, ao fato da redução da dimensionalidade proporcionar um tratamento teórico mais simples de sistemas magnéticos. No entanto, mesmo em baixas dimensões, cálculos analíticos não são geralmente obtidos, requerendo o uso de métodos aproximados.

Em especial, o modelo XY 2D é um interessante modelo em magnetismo, pois suporta excitações localizadas e não-lineares (os vórtices de spin) como soluções particulares, os quais regem uma transição de fase topológica do tipo Kosterlitz-Thouless[3] e são de fundamental importância no entendimento das propriedades termodinâmicas e dinâmicas de uma grande classe de magnetos 2D. Além disso, tais excitações topológicas aparecem em outras escalas do espaço-tempo. Realmente, especulações indicam que defeitos topológicos (tipo vórtice) surgem de transições de fase cosmológicas à medida que o universo expande e esfria[4]. Fenômenos semelhantes foram recentemente simulados em laboratório a partir de experimentos realizados principalmente com superfluidos e cristais líquidos, os quais pertencem à classe de universalidade do modelo XY. Dessa forma, pesquisas em magnetismo podem elucidar problemas em aberto nessas outras áreas da Física.

Atualmente, mesmo com o uso das técnicas mais avançadas, é impossível produzir materiais perfeitos. Portanto, defeitos de rede como impurezas devem ser incluídas nos modelos teóricos para uma descrição mais precisa de amostras reais. Por exemplo, efeitos de dopagens nos cupratos supercondutores a "altas temperaturas" vêm sendo assunto de interesse do ponto de vista teórico e experimental[5, 6] e, obviamente, os motivos estão relacionados com as possíveis aplicações tecnológicas dos mesmos. Além disso, a análise destes sistemas pode nos dar informações valiosas para uma possível "unificação" entre fenômenos como magnetismo e supercondutividade.

Do texto acima, fica claro que um tema recente e importante em Física é a questão do papel de impurezas em materiais magnéticos 2D. Por esse motivo, esta dissertação trata, essencialmente, do efeito de sítios não-magnéticos no modelo XY.

Nosso objetivo consiste em avaliar as interações de vórtices com estas vacâncias em sistemas de spin clássicos e os efeitos desta interação sobre a dinâmica de spins. Especificamente, pretendemos compreender o mecanismo que leva a possíveis mudanças na função correlação dinâmica, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, quando o sistema apresenta certa concentração de impurezas. De fato, a questão do pico central que aparece na função correlação dinâmica em sistemas puros não está totalmente resolvida. Trabalhos indicam que o movimento efetivo de vórtices possa ser o responsável por tal pico[7, 8, 9]. Portanto, se a dinâmica de vórtice é afetada por vacâncias de spin, a análise do pico quando estas imperfeições estão presentes poderia ser crucial na solução desse problema.

Os trabalhos expostos nesta tese foram publicados em revistas científicas internacionais [10, 11], nos quais houve uma enorme colaboração dos pesquisadores Afranio Rodrigues Pereira[10], Gary Matthew Wysin[11] e do recente mestre Lucas Alvares da Silva Mól[10]. Os resultados obtidos são válidos para ferromagnetos que se ajustam ao modelo XY com diluições de spin. Na Ref.[10], à temperatura nula, estudamos o comportamento de um único vórtice na presença de duas vacâncias de spin. No artigo [11], analisamos a função correlação dinâmica, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, em diversas temperaturas e concentrações de vacâncias. A tese apresentada a seguir é apenas uma descrição mais didática e completa destes dois trabalhos. O texto encontra-se organizado do seguinte modo: no capítulo 2 discutimos as principais características de materiais magnéticos 2D e os procedimentos utilizados no seu estudo. Nos capítulos 3 e 4, expomos nossos resultados. Por último, no capítulo 5, apresentamos as conclusões.

Capítulo 2

Considerações Gerais

Neste capítulo é apresentada uma revisão das principais características do magnetismo em duas dimensões. Particularmente, daremos ênfase ao modelo XY, descrevendo as excitações elementares que surgem, as transições de fase que ocorrem e algumas técnicas utilizadas para análise das propriedades termodinâmicas e dinâmicas de sistemas que se enquadram a este modelo. Comentaremos, também, sobre a questão de impurezas não-magnéticas, expondo alguns trabalhos já desenvolvidos.

2.1 O Hamiltoniano de Heisenberg: Isotrópico e Anisotrópico

As interações entre os momentos magnéticos de átomos vizinhos provém em geral de três tipos de fontes: a interação de troca, a interação dipolar spin-spin e o acoplamento spin-órbita.

A interação de troca tem sua origem na interação eletrostática combinada com o princípio de exclusão de Pauli, o qual requer que a função de onda total (espacial $\times$ spin) mude seu sinal com a permutação de dois elétrons. Para um sistema de dois elétrons, existem dois tipos de estados de spin: singlete e tripleto os quais são, respectivamente, antissimétricos (spins antiparalelos) e simétricos (spins paralelos) com a troca de spins dos elétrons. Dessa forma, com respeito à permutação

das posições dos elétrons, a parte espacial da função de onda total deve ser simétrica quando se trata de um singlete e antissimétrica no caso de um tripleto. Se E_S e E_{AS} são as autoenergias associadas as autofunções simétricas e antisimétricas, respectivamente, então a diferença $J = E_S - E_{AS}$, de origem puramente eletrostática, mede também o custo de energia necessário para trocar um estado tripleto por um singlete. Se $J > 0$ os estados com spins paralelos são favorecidos, enquanto que $J < 0$ prevalecem os estados com spins antiparalelos. Isso dá origem a um termo de interação, denominado termo de troca, o qual é simplesmente modelado por $-J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$. Então, para um sólido constituído de inúmeros spins eletrônicos situados nos átomos da rede cristalina, podemos descrever a energia de troca total desse sistema por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.1)$$

Este Hamiltoniano, no qual a energia só depende da orientação relativa de spins vizinhos e portanto é espacialmente isotrópico, é conhecido como o Hamiltoniano de Heisenberg. Ao investigar esta expressão, para o caso de acoplamentos isotrópicos entre spins vizinhos ($J_{ij} = J$), verifica-se que a configuração de mínima energia será tal que todos os spins se orientaram paralelos em alguma direção do espaço quando $J > 0$ (ordem ferromagnética), enquanto que $J < 0$ o alinhamento será antiparalelo (ordem antiferromagnética), como mostrado na figura (2.1).

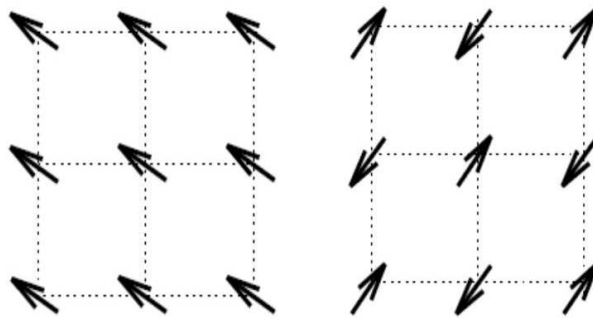


Figura 2.1: Configurações de mínima energia para o caso ferromagnético (esquerda) e antiferromagnético (direita).

A interação dipolar spin-spin e a interação relacionada ao acoplamento spin-órbita estão associadas, respectivamente, ao momento de dipolo angular de spin e

orbital do elétron. Estas interações não explicam as temperaturas de transições de fase magnéticas observadas em determinados materiais, pois as mesmas são de longo alcance e da ordem de mil vezes mais fracas que a interação de troca. No entanto, tais interações podem produzir um tipo de anisotropia, na qual os spins se acoplam à certas direções do cristal. Isso implica em fácil magnetização em determinados eixos ou planos dependendo do ordenamento espacial do sistema. Uma forma de modelar um acoplamento anisotrópico favorecendo um plano de norma $\hat{n}$ é somando ao Hamiltoniano (2.1) uma energia proporcional à $(\mathbf{S} \cdot \hat{n})^2$. Outra maneira de incluir anisotropia espacial no modelo é considerar a interação com um campo magnético $\mathbf{B}$, cuja energia deve ser proporcional à $\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$. Desse modo, o modelo de Heisenberg anisotrópico apresenta um Hamiltoniano de spin dado pela seguinte expressão[12]:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2 - B_x \sum_i S_i^x, \quad (2.2)$$

onde D é um parâmetro de anisotropia no plano xy e B_x é a intensidade do campo externo aplicado no eixo x. Geralmente, utiliza-se uma forma mais simplificada da Eq.(2.2), dada por

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z). \quad (2.3)$$

Este Hamiltoniano, que considera acoplamentos isotrópicos entre spins vizinhos (ou seja, $J_{ij} = J$) e despreza a interação com campos externos, contém vários casos limites que dependem do valor do parâmetro de anisotropia λ : o intervalo $0 \leq \lambda < 1$ leva ao modelo de Plano-Fácil, caracterizado pela preferência dos spins de se alinharem paralelamente ao plano xy. No caso de $\lambda > 1$ obtém-se o modelo de Eixo-Fácil, onde os spins tendem a apontar perpendicularmente ao plano xy. Note que $\lambda = 1$ recupera o modelo de Heisenberg isotrópico, definido pelo Hamiltoniano (2.1).

2.2 O Modelo XY em Duas Dimensões

O modelo XY é objeto de grande interesse no estudo de sistemas magnéticos 2D, principalmente pela sua simplicidade e equivalência com outros sistemas de Matéria

Condensada. Dentre estes, podemos mencionar o gás de Coulomb, superfluidos, cristais líquidos e supercondutores. Este modelo é um caso particular do modelo de Plano-Fácil, no qual o parâmetro de anisotropia λ assume o valor nulo:

$$H_{XY} = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y). \quad (2.4)$$

No Hamiltoniano acima, diferentemente do caso isotrópico descrito pela Eq.(2.1), as interações entre as componentes z dos spins não aparecem. Conseqüentemente, conclui-se que os spins deste modelo possuem uma fortíssima tendência de se alinharem paralelamente ao plano xy.

Do Hamiltoniano (2.4), a dinâmica dos spins é obtida por meio da seguinte equação do movimento[13]:

$$i\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = [\mathbf{S}_i, H_{XY}]. \quad (2.5)$$

Quanticamente, os operadores de spin satisfazem a típica regra de comutação de momento angular

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\hbar \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \delta_{ij} S_i^\gamma, \quad (2.6)$$

onde o fator $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é um pseudotensor completamente antissimétrico (símbolo de Levi-Civita) e os índices α, β, γ indicam as componentes x, y, z de cada spin $\mathbf{S}_i$; $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ assume os valores 1 e -1 se α, β, γ forem cíclicos e anticíclicos respectivamente e valor nulo, caso contrário. Definindo o operador unitário de spin $\mathbf{s} = \mathbf{S}/S$, com $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$, a relação de comutação entre as componentes de cada spin pode ser escrita como

$$s_x s_y - s_y s_x = (i\hbar/S) s_z. \quad (2.7)$$

No limite clássico ¹, $S \rightarrow \infty$, os operadores s_x e s_y comutam e podemos substituir o operador $\mathbf{s}_i$ por um vetor unitário, o qual representaremos por $\vec{S}_i$. Desta forma, é possível desenvolver o comutador $[\mathbf{S}_i, H_{XY}]$ utilizando a expressão (2.4) e obter uma equação de movimento para os vetores clássicos $\vec{S}_i$ a partir de (2.5). A expressão final

¹O número de estados discretos que um spin pode assumir é dado por $n = 2S + 1$. Tomar o limite $S \rightarrow \infty$ elimina a quantização sobre o spin, permitindo-lhe um contínuo de estados.

escreve-se como

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = -J\vec{S}_i \times \sum_j (S_j^x \hat{e}_x + S_j^y \hat{e}_y), \quad (2.8)$$

onde $\hat{e}_x$ e $\hat{e}_y$ são vetores unitários nas direções x e y , respectivamente. As equações (2.4) e (2.8) definem o modelo XY clássico, o qual utilizaremos daqui em diante. Vale ressaltar que os spins assumidos como vetores desprezam automaticamente o princípio da incerteza de Heisenberg e o modelo aplica-se, com boa aproximação, a amostras constituídas de partículas com valores elevados do número quântico de spin.

2.3 O Limite Contínuo do Modelo XY

Apesar da simplicidade do modelo XY, muitas vezes ele carece de soluções analíticas exatas. Por exemplo, é inviável tratar sistemas macroscópicos nos quais o número de partículas é da ordem de 10^{23} , deste modo, aproximações no modelo tornam-se necessárias. Normalmente, utilizam-se técnicas de simulações tais como o método de Monte Carlo e Dinâmica de Spins, que serão apresentados em seções posteriores. Analiticamente, podemos trabalhar com teorias de campos[14], as quais descrevem sistemas com infinitos graus de liberdade.

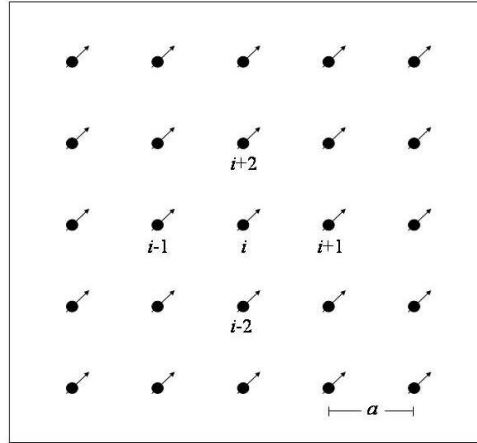


Figura 2.2: Rede quadrada de spins indicando os quatro sítios que interagem com o sítio genérico i .

Uma forma de obter uma teoria de campos correspondente ao modelo XY é tomando o limite contínuo do Hamiltoniano (2.4). Nesta aproximação, considera-se

espaçamentos desprezíveis entre spins vizinhos e assumi-se que a direção dos mesmos varia lentamente ao longo da rede. Conseqüentemente, esse limite implica na análise de sistemas com baixas energias sendo aplicado, portanto, a intervalos de baixas temperaturas. A seguir, deduziremos o Hamiltoniano associado à versão contínua do modelo XY.

Seja i um sítio genérico que interage apenas com seus quatro sítios vizinhos² $i + 1$, $i - 1$, $i + 2$ e $i - 2$, contidos numa rede quadrada como indicado na figura (2.2). Partindo do Hamiltoniano (2.4), obtemos a seguinte expressão:

$$H_{XY} = -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{\alpha=x,y} S_i^\alpha (S_{i+1}^\alpha + S_{i-1}^\alpha + S_{i+2}^\alpha + S_{i-2}^\alpha), \quad (2.9)$$

onde o fator $1/2$ foi incluído para impedir interações repetitivas entre pares de sítios. No limite de pequenos espaçamentos de rede a , podemos expandir as componentes dos spins em série de Taylor, como uma boa aproximação, até segunda ordem:

$$S_{i+1}^\alpha \simeq S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2}, \quad (2.10)$$

$$S_{i-1}^\alpha \simeq S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2}, \quad (2.11)$$

$$S_{i+2}^\alpha \simeq S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2}, \quad (2.12)$$

$$S_{i-2}^\alpha \simeq S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2}. \quad (2.13)$$

Levando-nos a

$$H_{XY} \simeq -\frac{J}{2} \sum_i \sum_\alpha S_i^\alpha \left[4S_i^\alpha + a^2 \left(\frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} \right) \right]. \quad (2.14)$$

Em seguida, substituindo o somatório em i pela integral dupla $\int \int \frac{dxdy}{a^2} = \int \frac{d^2r}{a^2}$ e

²Esta aproximação está fundamentada no curto alcance da interação de troca.

arranjando os termos, chegamos a

$$H_{XY} = -\frac{2J\vec{S}^2}{a^2} \int d^2r - \frac{J}{2} \sum_{\alpha} \int S^{\alpha} \left[\frac{\partial^2 S^{\alpha}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^{\alpha}}{\partial y^2} \right] d^2r + \frac{J}{2} \int \frac{4}{a^2} (S^z)^2 d^2r. \quad (2.15)$$

No limite termodinâmico, onde o tamanho do sistema tende ao infinito, o primeiro termo diverge e deve ser subtraído do Hamiltoniano original. No entanto, as integrais do segundo termo são facilmente resolvidas por partes. Dessa forma, obtemos

$$H_{XY} = \frac{J}{2} \int \left\{ \sum_{\alpha} \left[\left(\frac{\partial S^{\alpha}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S^{\alpha}}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{4}{a^2} (S^z)^2 \right\} d^2r. \quad (2.16)$$

Parametrizando o spin como $\vec{S} = (\sqrt{1-m^2}\cos\phi, \sqrt{1-m^2}\sin\phi, m)$, onde os campos escalares $m = \cos\theta$ e ϕ estão relacionados com os ângulos polar e azimutal mostrados na figura (2.3), finalmente encontramos o Hamiltoniano desejado:

$$H_{XY} = \frac{J}{2} \int \left[\frac{m^2(\vec{\nabla}m)^2}{1-m^2} + (1-m^2)(\vec{\nabla}\phi)^2 + \frac{4}{a^2}m^2 \right] d^2r, \quad (2.17)$$

com $\vec{\nabla} \equiv \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y}$.

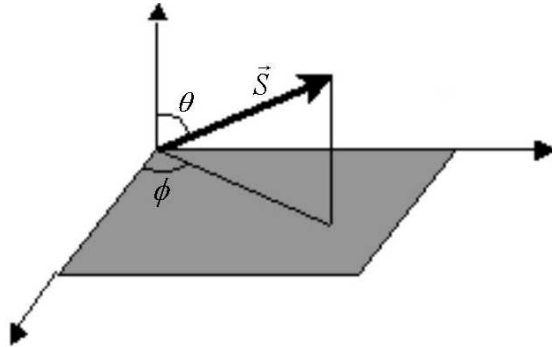


Figura 2.3: Esquema de um spin clássico com orientação determinada pelos ângulos esféricos.

A dinâmica dos campos m e ϕ é obtida a partir da equação quântica de movimento:

$$i\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = [\mathbf{S}_i, h], \quad (2.18)$$

onde h é a densidade hamiltoniana dada por

$$h = \frac{J}{2} \left[\frac{m^2(\vec{\nabla}m)^2}{1-m^2} + (1-m^2)(\vec{\nabla}\phi)^2 + \frac{4}{a^2}m^2 \right]. \quad (2.19)$$

No limite clássico, $S \rightarrow \infty$, verifica-se que os campos m e ϕ constituem um par de variáveis canonicamente conjugadas[14], significando que

$$\dot{m} = \frac{\partial h}{\partial \phi} \quad e \quad \dot{\phi} = -\frac{\partial h}{\partial m}. \quad (2.20)$$

Estas expressões, juntamente com o Hamiltoniano (2.17), formam uma teoria de campos escalares (m, ϕ) adequada ao modelo XY clássico.

2.4 Monte Carlo

No tratamento de sistemas de muitos corpos, técnicas de simulações são bastante úteis, servindo como um tipo de laboratório para verificação de cálculos analíticos. As propriedades termodinâmicas destes sistemas normalmente são investigadas através do famoso método de Monte Carlo (MC) o qual aplica-se em diversos ramos da física, desde mecânica estatística à física de partículas elementares. A idéia central do MC é gerar as configurações em equilíbrio térmico mais relevantes do espaço amostral do sistema, as quais são utilizadas para calcular valores esperados de grandezas termodinâmicas, tais como energia, calor específico, magnetização, suscetibilidade etc. Nesta seção, faremos uma sucinta revisão do método MC tradicional para servir como base no entendimento de alguns algoritmos empregados nesta tese. Um estudo mais detalhado é apresentado na Ref.[15].

No equilíbrio, o valor esperado de uma grandeza termodinâmica A é dado por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{-E_i/k_B T}, \quad (2.21)$$

onde Z é a função de partição canônica e A_i é o valor de A no estado de energia E_i . O somatório em i é efetuado sobre todos os microestados acessíveis ao sistema.

Geralmente, tal soma não pode ser realizada, devido ao número gigantesco de configurações envolvidas (infinito no caso do modelo XY). O método MC consiste em escolher apenas as M configurações mais importantes em cada temperatura e calcular as quantidades físicas por meio de uma média aritmética simples:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_i^M A_i, \quad (2.22)$$

que é facilmente obtida em simulações. As M configurações são conseguidas através de uma cadeia de Markov, onde novos estados são criados dos estados anteriores satisfazendo a condição de balanço detalhado:

$$W = e^{-(E_i - E'_i)/k_B T}, \quad (2.23)$$

onde W indica a probabilidade de transição entre duas configurações de energia E_i e E'_i . Convém ressaltar que ao utilizar o método MC em simulações independentes, a trajetória percorrida pelo sistema no espaço de fase dificilmente é a mesma, no entanto, as médias das grandezas físicas são sempre iguais.

Em simulações de sistemas clássicos de spin, existem diversos algoritmos de MC que podemos considerar, destacando-se o de Metrópolis, Wolff e Super-Relaxação. Estes algoritmos encontram-se resumidos abaixo:

Metrópolis

1. Inicie com uma configuração de spin aleatória.
2. Selecione aleatoriamente um sítio i da rede.
3. Calcule o custo de energia, $\Delta E = E_j - E_i$, necessário para substituir $\vec{S}_i$ por um novo spin $\vec{S}_j$ escolhido ao acaso.
4. Sorteie um número aleatório r no intervalo $0 \leq r \leq 1$.
5. Se $W = e^{-\Delta E/k_B T} > r$ troque $\vec{S}_i$ por $\vec{S}_j$. Caso contrário, mantenha a con-

figuração.

6. Retorne ao passo 2, repetindo o procedimento para todos os spins da rede.

O algoritmo acima gera uma seqüência de configurações em equilíbrio térmico. No entanto, a configuração aleatória com que se inicia esta seqüência provavelmente não corresponde àquela de equilíbrio na temperatura de interesse. Portanto, antes de calcular qualquer média deve-se percorrer a rede milhares de vezes aceitando e rejeitando configurações. No final obtém-se uma rede termalizada a partir da qual pode-se gerar novas configurações para o cálculo de médias.

Wolff

U. Wolff[16] criou um algoritmo de MC no qual um cluster (conjunto de spins) é atualizado simultaneamente, ao contrário do algoritmo de Metrópolis, onde apenas um único spin é atualizado. Sua vantagem está em reduzir consideravelmente o "critical slowing down", dificuldade encontrada por sistemas de spin clássico em atingir o equilíbrio térmico em baixas temperaturas. A formação do cluster consiste na seqüência de operações abaixo[17].

1. Escolha uma direção aleatória $\vec{r}$ no plano xy e um sítio i como primeiro elemento do cluster a ser formado.
2. Marque o sítio i e aplique o operador de reflexão $R(\vec{r})$ em $\vec{S}_i$, definido como:

$$R(\vec{r})\vec{S}_i = \vec{S}_i - 2(\vec{S}_i \cdot \vec{r})\vec{r}. \quad (2.24)$$

3. Visite todas as ligações que conectam i com seus primeiros vizinhos j . A ligação $i - j$ é ativada com probabilidade

$$P(\vec{S}_i, \vec{S}_j) = 1 - \exp\{\min[0, 2(\vec{S}_i \cdot \vec{r})(\vec{S}_j \cdot \vec{r})/k_B T]\}. \quad (2.25)$$

Se a ligação ocorrer, inverta $\vec{S}_j$ e marque o sítio j adicionando-o ao cluster.

4. Repita o passo 3 para todas as ligações que levam a sítios não marcados, vizinhos daqueles que foram adicionados mais recentemente ao cluster, até que o processo termine.

Super-Relaxação

1. Escolha um sítio i aleatório e calcule o campo efetivo gerado pelos seus quatro vizinhos mais próximos j , dado por

$$\vec{H}_{ef} = \sum_j (S_j^x \hat{e}_x + S_j^y \hat{e}_y). \quad (2.26)$$

2. Desloque $\vec{S}_i$ em relação à direção de $\vec{H}_{ef}$, como na figura (2.4).

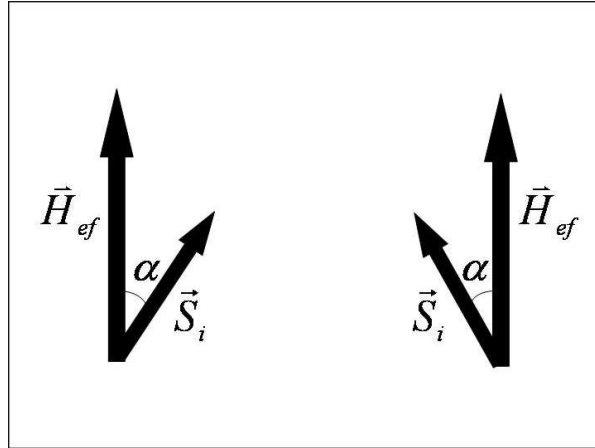


Figura 2.4: Orientação espacial do spin antes (esquerda) e após (direita) seu deslocamento em relação ao campo efetivo.

3. Repita o procedimento acima para todos os sítios da rede.

Esta técnica consiste em diminuir a correlação entre os spins do sistema, tornando-se muito eficiente quando aplicada em conjunto com os algoritmos de Metrópolis e Wolff.

2.5 Dinâmica de Spins

As propriedades estáticas de um grande número de sistemas magnéticos vem sendo intensamente estudadas e entendidas teoricamente, experimentalmente e via simulações, no entanto, as propriedades dinâmicas ainda não estão bem compreendidas. O método da Dinâmica de Spins (DS), diferentemente do método MC, fornece uma aproximação determinística para obter a evolução temporal destes sistemas de spins por meio da integração de equações de movimento. Dessa forma, diversas características importantes tais como excitações de ondas de spin e vórtices, as quais estão intimamente relacionadas à dinâmica em tempo real, podem ser analisadas. Em particular, a lei que rege a dinâmica do modelo XY 2D no limite clássico de spin é dada por

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = -J\vec{S}_i \times \sum_j (S_j^x \hat{e}_x + S_j^y \hat{e}_y). \quad (2.27)$$

Este conjunto de equações acopladas, deduzido anteriormente na seção 2.2, pode ser resolvido por vários integradores. Um dos mais usados, e que foi empregado em nossas simulações, é o método de Runge-Kutta de quarta ordem, definido por[17]

$$\vec{S}_n^i = \vec{S}_{n-1}^i + \frac{\Delta t}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \quad (2.28)$$

com

$$K_1 = \dot{\vec{S}}_i(t_{n-1}, \vec{S}_{n-1}), \quad (2.29)$$

$$K_2 = \dot{\vec{S}}_i(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, \vec{S}_{n-1} + \frac{K_1}{2}), \quad (2.30)$$

$$K_3 = \dot{\vec{S}}_i(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, \vec{S}_{n-1} + \frac{K_2}{2}), \quad (2.31)$$

$$K_4 = \dot{\vec{S}}_i(t_n, \vec{S}_{n-1} + K_3), \quad (2.32)$$

onde $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ é o incremento de tempo.

Como toda equação diferencial ordinária, a resolução de (2.27) requer um conjunto de condições iniciais. Em Dinâmica de Spin, tais condições podem ser impostas arbitrariamente ou geradas pelo método de Monte Carlo. Vale ressaltar que o método

DS é microcanônico, pois a energia é conservada durante a integração das equações de movimento. Dessa forma, estimativas confiáveis de grandezas termodinâmicas devem ser obtidas a partir da média dos resultados da integração de um conjunto canônico de configurações iniciais de spin.

2.6 Os Vórtices

O modelo de Heisenberg bidimensional com anisotropia de plano-fácil contém vórtices de spin como soluções particulares. Tais excitações topológicas surgem devido à baixa dimensionalidade e à não linearidade do modelo. As propriedades termodinâmicas e dinâmicas de um dado material dependem do comportamento dessas estruturas no sistema. De fato, os vórtices são responsáveis pela transição de fase de Kosterlitz-Thouless[3]. Além disso, acredita-se que os mesmos causam um pico central na função correlação dinâmica[7, 8, 9], previsto em simulações[18, 19] e detectado em experimentos através de espalhamento de nêutrons[20].

Existem dois tipos de vórtice: o vórtice planar, no qual todos os spins estão confinados no plano xy e o vórtice fora do plano, onde os spins próximos ao centro do vórtice possuem componentes perpendiculares ao plano xy . Daqui em diante trataremos o tipo planar, pois no modelo XY somente estes são estáveis[21].

De forma a encontrar soluções planares, vamos tomar $m = 0$ na Eq.(2.17):

$$H = \frac{J}{2} \int (\vec{\nabla} \phi)^2 d^2 r. \quad (2.33)$$

O Hamiltoniano acima define a versão contínua do modelo Rotor-Planar, no qual os vetores de spin só possuem duas componentes (i.e., $S_x^2 + S_y^2 = 1$). O campo de spin correspondente ao mínimo local de H é obtido a partir da condição de extremo:

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{r})} = 0 \Rightarrow \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.34)$$

Esta equação de Laplace possui dois tipos de soluções. A primeira é o estado fundamental $\phi(\mathbf{r}) = \text{constante}$. O segundo tipo consiste de vórtice, o qual representa-se

por

$$\phi_v(x, y) = q \arctan \left(\frac{y - y_v}{x - x_v} \right), \quad (2.35)$$

onde q define a carga topológica do vórtice e o par (x_v, y_v) indica o centro da estrutura. Por exemplo, a configuração de um vórtice com carga topológica $q = +1$ está representada na figura (2.5). Para valores negativos da carga, a excitação topológica é usualmente chamada de antivórtice (veja uma configuração dessa estrutura na figura 2.6).

Outra forma de definir um vórtice é por meio do seguinte conjunto de condições de contorno sobre a integral de circulação de $\phi(\mathbf{r})$:

1) Para todas as curvas fechadas que englobam a posição $\mathbf{r}_v$ do centro do vórtice

$$\oint \nabla \phi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = 2\pi q. \quad (2.36)$$

2) Para todos os caminhos que não englobam a posição $\mathbf{r}_v$ do centro do vórtice

$$\oint \nabla \phi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = 0. \quad (2.37)$$

Agora, podemos estimar a energia de um vórtice do seguinte modo. O problema é cilindricamente simétrico, conseqüentemente o campo ϕ_v deve ser da forma $\phi_v(\mathbf{r}) = \phi_v(r)$. A dependência sobre r pode ser conseguida pela Eq.(2.36), calculando a integral de circulação ao longo de um círculo de raio r centrado na posição $r_v = (x_v, y_v)$ do vórtice:

$$2\pi q = \oint \nabla \phi_v(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = 2\pi r |\nabla \phi_v|, \quad (2.38)$$

obtendo $|\nabla \phi_v(r)| = q/r$. Substituindo este resultado no Hamiltoniano Eq.(2.33), encontramos a seguinte energia:

$$E_v \simeq \frac{Jq^2}{2} \int_0^{2\pi} \int_a^L r dr \frac{1}{r^2} = \pi q^2 J \ln \left(\frac{L}{a} \right). \quad (2.39)$$

Note que $|\nabla \phi_v|$ decai com $1/r$ levando a uma divergência logarítmica da energia. Conseqüentemente foi preciso levar em conta os limites na integral radial da Eq.(2.39),

onde L é o tamanho de um sistema finito e a é o espaçamento de rede. O valor $a_0 = 0.24a$ é mais apropriado para o limite inferior de integração; tal valor foi obtido numericamente para uma rede quadrada [22].

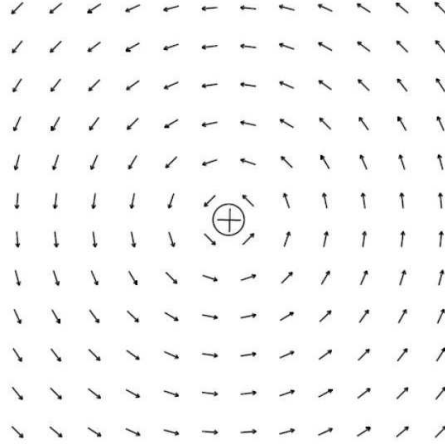


Figura 2.5: Vórtice com carga topológica $q = +1$. O símbolo positivo indica o centro da estrutura.

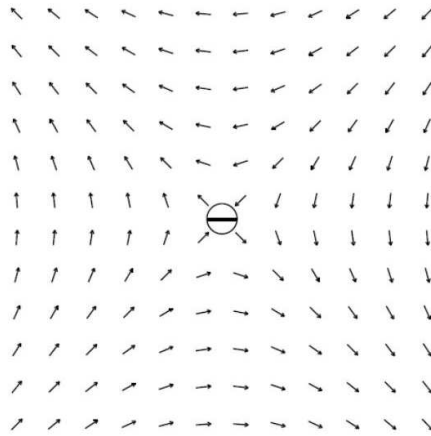


Figura 2.6: Vórtice com carga topológica $q = -1$. O símbolo negativo indica o centro da estrutura.

2.7 A Transição de Fase de Kosterlitz e Thouless

De acordo com o teorema de Mermin-Wagner[23], enunciado em 1966, modelos bidimensionais com interações de curto alcance, cujos Hamiltonianos apresentam alguma simetria global contínua, só apresentam ordem de longo-alcance (OLA) no zero

absoluto de temperatura. A ausência de OLA em temperaturas não nulas deve-se a presença de excitações de baixa energia, as ondas de spin. Por conseqüência, os modelos XY e do Rotor-planar não exibem uma transição de fase do tipo ordem-desordem, ou seja, não existe uma temperatura crítica que separa uma fase magnetizada de uma desmagnetizada. No entanto, as correlações entre os spins nestes modelos mudam qualitativamente de comportamento com a temperatura, indicando outra espécie de transição de fase. Por exemplo, considere a função correlação spin-spin do Rotor-Planar, dada por

$$C(r) = \langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(r) \rangle = Re[\langle e^{i(\phi(0) - \phi(r))} \rangle]. \quad (2.40)$$

Para valores de temperaturas superiores a um dado valor crítico T_{KT} , pode-se mostrar que $C(r)$ decai exponencialmente com a distância r entre os spins da seguinte forma:

$$C(r) \sim e^{-r/\xi(T)}, \quad (2.41)$$

implicando na existência de um comprimento característico finito

$$\xi(T) \sim e^{b(T/T_{KT}-1)^{-1/2}}, \quad (2.42)$$

o qual indica a que distância dois spins permanecem correlacionados. Neste caso, diz-se que o sistema apresenta ordem de curto-alcance. Para $T < T_{KT}$, $C(r)$ decai a zero segundo uma Lei de potência:

$$C(r) \sim \left(\frac{1}{r}\right)^\eta, \quad (2.43)$$

com $\eta = k_B T / 2\pi J$. Este decaimento é extremamente mais lento que o exponencial e possui um comprimento de correlação quase-infinito. Neste caso, diz-se que o sistema exibe ordem de quase-longo alcance.

A partir dos fatos expostos acima, em 1973 Kosterlitz-Thouless mostraram que a carga topológica dos sistemas descritos pelo modelo do Rotor-Planar deve se conservar e que existe uma transição de fase topológica, denominada posteriormente por transição de fase de Kosterlitz-Thouless[3]. Abaixo da temperatura de transição

T_{KT} , ondas de spin são as excitações relevantes da teoria e pares vórtice-antivórtice podem surgir, os quais não desordenam significativamente o sistema devido ao seu efeito local. A configuração de um par está ilustrada na figura (2.7). À medida que a temperatura aumenta, o tamanho dos pares cresce até a temperatura T_{KT} . Para $T > T_{KT}$, os vórtices encontram-se livres desordenando o sistema e, por conseqüência, a função correlação spin-spin decai exponencialmente.

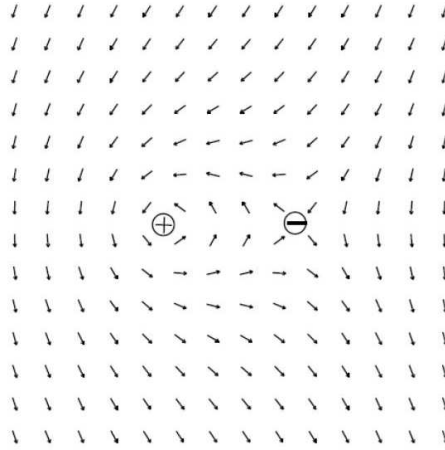


Figura 2.7: Par vórtice-antivórtice.

A energia de um único vórtice, dada pela Eq.(2.39), é proporcional ao logaritmo do tamanho L da rede. Conseqüentemente, ela diverge no limite termodinâmico. Por esta razão, a criação de vórtices em baixas temperaturas ($T < T_{KT}$) torna-se energeticamente desfavorável. Por outro lado, um par vórtice-antivórtice separados por uma distância R pode ser criado, desde que ele só custa uma energia finita[14]

$$E_{par} \simeq \pi^2 J + 2\pi J l n(R/a_0). \quad (2.44)$$

O potencial logarítmico na Eq.(2.44) tem a mesma forma que o potencial eletrostático coulombiano em duas dimensões, o qual sugere que vórtices podem ser tratados como cargas coulombianas[24].

Agora, vamos estimar a temperatura de transição T_{KT} . Esta pode ser estimada, numa primeira aproximação, facilmente através do custo de energia livre, $F = E - Ts$, para criar um único vórtice livre. A contribuição do custo de energia, E , é

simplesmente dado pela Eq.(2.39). Levando em conta a contribuição da entropia, $S = k_B T \ln \Omega$, relacionada com o número de estados acessíveis para colocar um vórtice no sistema, $\Omega = L^2/a^2$, obtemos o custo de energia livre

$$F = (\pi J - 2k_B T) \ln(L/a). \quad (2.45)$$

Na equação acima o termo de energia domina a energia livre em temperaturas baixas ($\pi J > 2K_B T$) e a probabilidade de aparecer vórtices ligados é extremamente grande. Em altas temperaturas, o termo de entropia passa a dominar e vórtices livres surgem espontaneamente. Dessa forma, a temperatura crítica T_{KT} é aquela onde F se anula:

$$T_{KT} = \pi J / 2k_B. \quad (2.46)$$

O modelo do Rotor-Planar não é adequado para analisar o comportamento dinâmico de sistemas, uma vez que os spins estão confinados no plano xy ($S_z = 0$), implicando na ausência de dinâmica (i.e, $[S_x, H] = [S_y, H] = 0$ de forma que $d\vec{S}/dt = 0$). Neste caso recorre-se ao modelo XY, o qual apresenta um cenário semelhante ao do Rotor-Planar, o que é confirmado por simulações[25].

2.8 Espalhamento de Nêutrons

A técnica de espalhamento de nêutrons consiste essencialmente em fazer incidir sobre a amostra em estudo um feixe de nêutrons em equilíbrio térmico com a mesma (veja figura 2.8). Após a interação entre o feixe e o sistema, pode-se obter, por meio de um detector, a distribuição da intensidade dos nêutrons emergentes em função da energia e momento transferidos ao sistema. Esta função de distribuição carrega informações das propriedades dinâmicas do sistema.

O uso da técnica de espalhamento de nêutrons para investigar experimentalmente o comportamento dinâmico de excitações magnéticas, tais como mágnons e vórtices, está intimamente relacionada a certas características intrínsecas dos nêutrons e da sua interação com a matéria. Como é conhecido, o nêutron não contém carga

elétrica e possui spin-1/2. Estas propriedades indicam basicamente que as interações entre materiais magnéticos e nêutrons é de caráter puramente magnético. Além disso, o comprimento de onda dos nêutrons pode ser facilmente ajustável, o que permite escolher as excitações que serão relevadas durante o experimento.

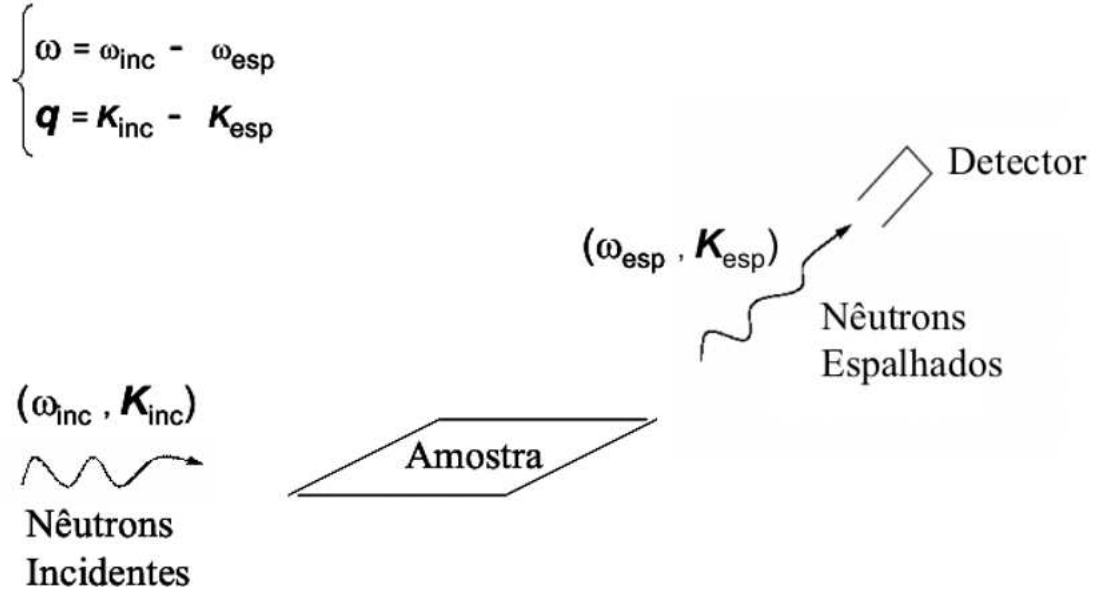


Figura 2.8: Representação gráfica geral de uma experiência de espalhamento de nêutrons. Após a interação nêutrons-amostra o momento $\mathbf{q}$ e a energia $\hbar\omega$ são absorvidos pela amostra.

Na análise dinâmica de sistemas magnéticos, a quantidade de maior interesse é a função correlação dinâmica $S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega)$ (também conhecida como fator de estrutura dinâmico) a qual é proporcional à seção de choque de espalhamento de nêutrons. No limite contínuo de um sistema infinito, esta função é definida em termos das seguintes transformadas de Fourier aplicadas ao campo de spin:

$$S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \langle S^{\alpha}(\vec{q}, \omega) S^{\alpha}(-\vec{q}, 0) \rangle \quad (2.47)$$

com

$$S^{\alpha}(\vec{q}, t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy S^{\alpha}(\vec{r}, t), \quad (2.48)$$

onde α é qualquer componente de $\vec{S}$ e, por simetria, $S^{xx}(\vec{q}, \omega) = S^{yy}(\vec{q}, \omega)$. No entanto, em simulações, nas quais consideram-se redes finitas e não contínuas, o cálculo de

$S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega)$ deve ser discreto. Utilizando N_t passos de tempo de duração Δt , este cálculo leva a correlações definidas em vetores de onda discretos $\vec{q}_{n_1, n_2} = (2\pi/L)(n_1, n_2)$ e frequências discretas $\omega_n = (2\pi/t_{max})n$, com n_1, n_2, n inteiros e $t_{max} = N_t \Delta t$ sendo o intervalo de tempo total considerado na integração. A partir das configurações de spin coletadas em cada instante t_j , obtemos

$$S_{\vec{q}_{n_1, n_2}, \omega_n}^{\alpha} = \frac{1}{N_t} \sum_{t_j} \left[\frac{1}{L} \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}, t_j}^{\alpha} e^{-i\vec{q}_{n_1, n_2} \cdot \vec{r}} \right] e^{i\omega_n t_j}, \quad (2.49)$$

com a função correlação dinâmica discreta sendo simplesmente o módulo quadrado dessa equação:

$$S_{\vec{q}_{n_1, n_2}, \omega_n}^{\alpha\alpha} = |S_{\vec{q}_{n_1, n_2}, \omega_n}^{\alpha}|^2. \quad (2.50)$$

Para tornar possível uma comparação direta entre simulações e o modelo contínuo, basta dividir a Eq.(2.50) pelos intervalos de vetor de onda $d^2q = (2\pi/L)^2$ e frequência $d\omega = 2\pi/t_{max}$, o que leva a função correlação contínua:

$$S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega) = \frac{t_{max}}{2\pi} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 S_{\vec{q}, \omega}^{\alpha\alpha}. \quad (2.51)$$

Para magnetos puros com simetria de plano-fácil, existe uma enorme quantidade de dados experimentais e de simulações descrevendo o comportamento da função correlação dinâmica. Através de MC combinado com DS, muitos autores vêm estudando o fator de estrutura planar $S^{xx}(\vec{q}, \omega)$ e o fora do plano $S^{zz}(\vec{q}, \omega)$ em diversas temperaturas. Aqui, somente o fator $S^{xx}(\vec{q}, \omega)$ será comentado.

Em baixas temperaturas ($T < T_{KT}$), resultados indicam, em geral, dois picos importantes na função correlação planar para um dado $\vec{q}$: o pico de onda de spin (POS) numa frequência não nula ω_q , associado a um espalhamento inelástico de nêutrons, e um pequeno pico central situado em $\omega = 0$, devido a um espalhamento elástico. Para temperaturas próximas de T_{KT} , ambos os picos ainda aparecem, porém, o pico central encontra-se mais apreciável. Em altas temperaturas, o POS desaparece e somente um grande pico central prevalece. A figura (2.9) mostra o comportamento de $S^{xx}(\vec{q}, \omega)$ com a temperatura obtido por simulações.

A coexistência do POS e o pico central em baixas temperaturas também foi observada experimentalmente (via espalhamento de nêutrons) em magnetos tais como $CoCl_2$, $BaCo_2(AsO_4)_2$ e Rb_2CrCl_4 [20, 26, 27] que possuem um comportamento quase-bidimensional.

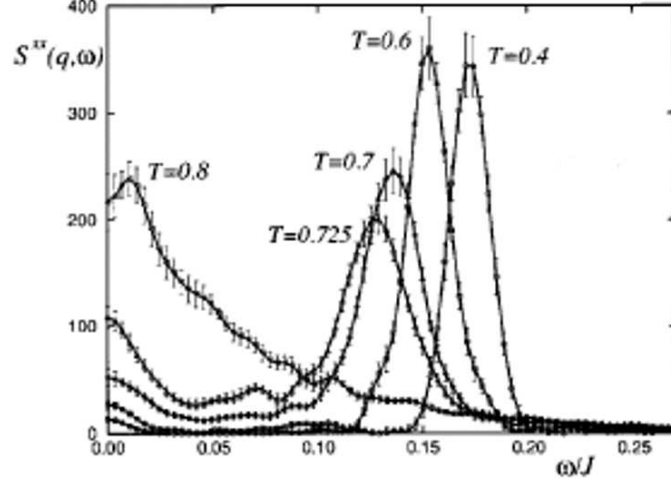


Figura 2.9: Fator de estrutura planar, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, como função da frequência ω para diversos valores de temperatura. A temperatura de transição é $T_{KT} \sim 0.700J/k_B$. Em todos os gráficos, os quais foram obtidos na Ref.[25], fixou-se $L = 128a$ e $\vec{q} = (\pi/32, 0)$.

O modelo XY 2D é uma boa aproximação para descrever diversos materiais reais, além disso, há vários estudos teóricos relativos à dinâmica de ondas de spin em baixas temperaturas. Villain[28] mostrou que o fator de estrutura planar exibe um POS da forma

$$S_{xx}(\vec{q}, \omega) \sim |\omega - \omega_q|^{-1+\eta/2}, \quad (2.52)$$

onde η é o expoente crítico que descreve o decaimento da função correlação estática ($\eta = 1/4$ em T_{KT} e na aproximação de onda de spin, válida para baixas temperaturas, ele é dado por $\eta = k_B T / 2\pi J$). Nelson e Fisher[29] trataram o modelo em uma descrição hidrodinâmica de tamanho fixo, obtendo

$$S_{xx}(\vec{q}, \omega) \sim q^{-3+\eta} |1 - \omega^2/\omega_q^2|^{-1+\eta}, \quad (2.53)$$

onde $\omega_q = cq$ para pequenos valores de q , e c é a velocidade das ondas de spin. Estas aproximações teóricas conduzem para um POS que diverge em ω_q e, mesmo assim, pro-

porcionam um bom entendimento sobre a dinâmica de spin em baixas temperaturas, descrevendo parte dos resultados numéricos e experimentais. Porém, com o aumento da temperatura, um pico central torna-se mais evidente e como já mencionado, ele não está descrito teoricamente de uma forma adequada. Mertens e colaboradores[7] calcularam $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ para sistemas puros acima de T_{KT} , assumindo um gás ideal de vórtices livres os quais movimentam-se na presença de ondas de spin, e encontraram um pico central Lorentziano com altura proporcional a $1/\bar{u}$ e largura Γ proporcional a $\bar{u}$, onde $\bar{u}$ é a velocidade quadrática média dos vórtices. Como mostrado nas Refs.[30, 31, 32], vórtices não se movem apreciavelmente numa rede discreta e então, para justificar a teoria, Mertens e Bishop[33] propuseram uma idéia interessante na qual a fenomenologia baseada em movimentos de vórtices ainda é válida, no entanto, apenas movimentos efetivos são impotentes.

2.9 A Inclusão de Impurezas Não-Magnéticas no Modelo XY

Durante o processo de fabricação de magnetos quase-bidimensionais, muitas vezes ocorre a troca accidental de um íon magnético por um não-magnético. Este fato deve ser levado em consideração nos modelos bidimensionais de forma a possibilitar uma descrição mais realística desses materiais. Realmente, a presença de impurezas pode afetar fortemente diversas propriedades de sistemas magnéticos 2D. Como exemplos, sítios não-magnéticos presentes em sistemas com anisotropia de plano-fácil diminuem a temperatura crítica T_{KT} de transição de fase[34, 35, 36], tornam vórtices planares mais estáveis[37] e podem excitar vórtices com cargas topológicas duplas, jamais detectadas em sistemas puros[38].

Em particular, nesta seção consideraremos a presença de vacâncias de spin (impurezas não-magnéticas) no modelo XY. Para esta finalidade, devemos alterar o Hamiltoniano (2.4), incluindo uma nova variável σ_i que assume valor 0 ou 1 depen-

dendo se o sítio i possui spin ou vacância:

$$H_{XY} = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \sigma_i \sigma_j. \quad (2.54)$$

No limite contínuo a modificação é feita multiplicando-se o Hamiltoniano (2.17) por uma função $U_{\vec{r}_i}(\vec{r})$ que é igual a 1 em todo espaço e nula numa região circular de raio a centrada na posição $\vec{r}_i$ (veja figura 2.10):

$$H_{XY} = \frac{J}{2} \int d^2r \left[\frac{m^2 (\vec{\nabla} m)^2}{1 - m^2} + (1 - m^2) (\vec{\nabla} \phi)^2 + \frac{4}{a^2} m^2 \right] \prod_{i=1}^{N_v} U_{\vec{r}_i}(\vec{r}), \quad (2.55)$$

onde N_v indica o número de buracos não-magnéticos, os quais modelam átomos desprovidos de spin.

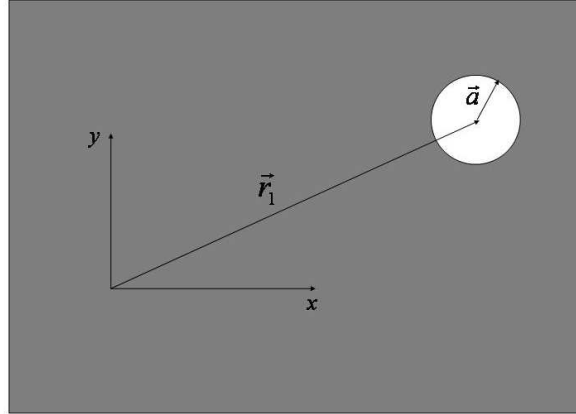


Figura 2.10: Representação no contínuo de um sistema contendo apenas uma vacância de spin. A parte externa ao círculo representa a parte do plano que participa da interação magnética. Por outro lado, a parte interna indica a região do plano que não possui magnetismo.

Na referência[39] os autores estudaram a interação entre um vórtice planar e uma única vacância de spin utilizando cálculos analíticos, baseados no Hamiltoniano (2.55), e métodos de simulações sobre uma rede discreta. Através da técnica DS, verificou-se que a estrutura do vórtice permanece praticamente inalterada próxima à impureza e que o núcleo da estrutura move-se em direção à posição da mesma, como mostra a figura (2.11). Guiados por esta simulação, calcularam a energia do sistema

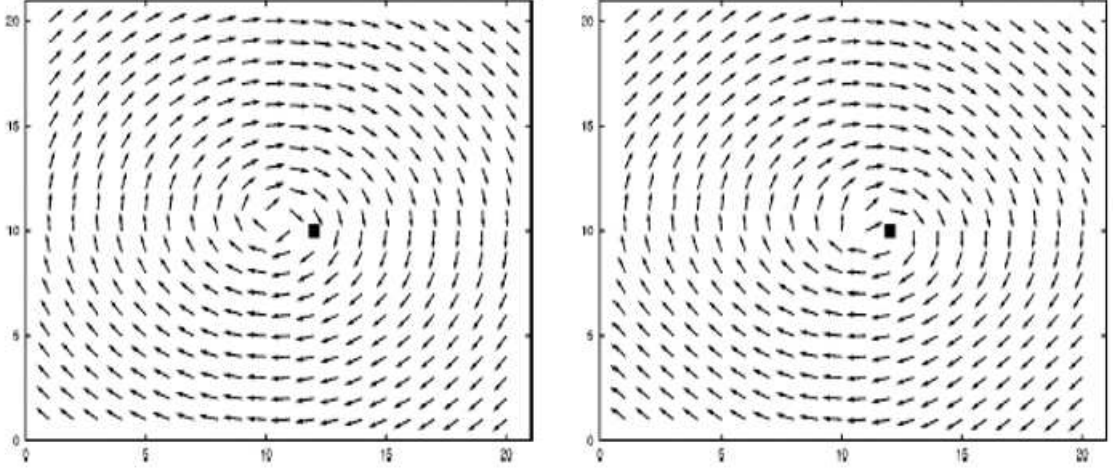


Figura 2.11: Configuração do vórtice antes (esquerda) e após (direita) 70 passos de Runge-Kutta de tamanho $\Delta t = 0.04J^{-1}$. O quadradinho preto indica a posição da vacância.

com o vórtice centrado na origem, $\vec{r}_v = (0, 0)$, e a vacância localizada em $\vec{r}_1$:

$$E_I(\vec{r}_1) = E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_1^2 + b^2} \right), \quad (2.56)$$

sendo o potencial efetivo de interação vórtice-vacância dado por

$$V_{ef}(\vec{r}_1) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_1^2 + b^2} \right). \quad (2.57)$$

Nas equações (2.56) e (2.57) E_v é a energia do vórtice na ausência da vacância, L é a dimensão linear do sistema e b é uma constante da ordem do espaçamento de rede ($b = 1.03a$). Note que $E_I < E_v$ indica um potencial efetivo atrativo, o qual apresenta um mínimo ($-4.48J$) em $r_1 = 0$ e reduz-se a zero para $r_1 > 2a$ (veja figura 2.12).

O resultado acima sugere que vórtices podem ser considerados como partículas clássicas, uma vez que este tipo de estrutura desloca-se na presença de impureza. De fato, Wysin mostrou que a posição $\vec{r}_v$ do núcleo de um vórtice satisfaz a segunda lei de Newton[22]:

$$\vec{F} = M \frac{d\vec{r}_v}{dt}, \quad (2.58)$$

com sua massa efetiva M diretamente proporcional ao quadrado do tamanho do sistema ($M \propto L^2$) e $\vec{F}$ uma força central qualquer. Sabendo disso, Pereira e colabo-

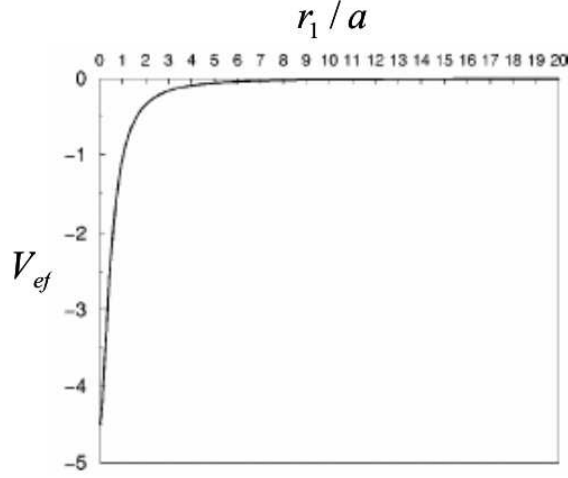


Figura 2.12: Gráfico do potencial efetivo de interação vórtice-vacância em função da razão r_1/a .

radores analisaram o movimento do vórtice próximo à impureza[40]. Os resultados analíticos, os quais foram obtidos considerando-se $r_1 \ll a$ na Eq.(2.57), indicam um movimento harmônico do vórtice em torno da vacância, com uma frequência de oscilação ω inversamente proporcional ao tamanho do sistema ($\omega \propto L^{-1}$). Em contraste, as simulações indicam uma oscilação anarmônica que ocorre devido principalmente ao surgimento de ondas de spins no sistema. Estas ondas são excitadas durante o movimento translacional do vórtice e são refletidas nas bordas do sistema e, por conseqüência, interagem com o vórtice, afetando o caráter harmônico do movimento do mesmo. Nas simulações, observou-se a posição do centro do vórtice com o passar do tempo para $L = 100a$, obtendo-se como resultado a figura (2.13). Note que a amplitude de oscilação é da ordem de um espaçamento de rede. Esta figura também apresenta a transformada de Fourier do movimento oscilatório do centro do vórtice. Observam-se diversos picos com frequências bem definidas neste gráfico, os quais representam modos normais que resultam da interação vórtice-vacância. Para a frequência do pico mais intenso, obteve-se o seguinte comportamento com o tamanho do sistema:

$$\omega_0 \simeq \frac{13.57}{L}. \quad (2.59)$$

Convém ressaltar que os resultados descritos nesta seção são de fundamental importância para o entendimento dos trabalhos que serão expostos nos próximos

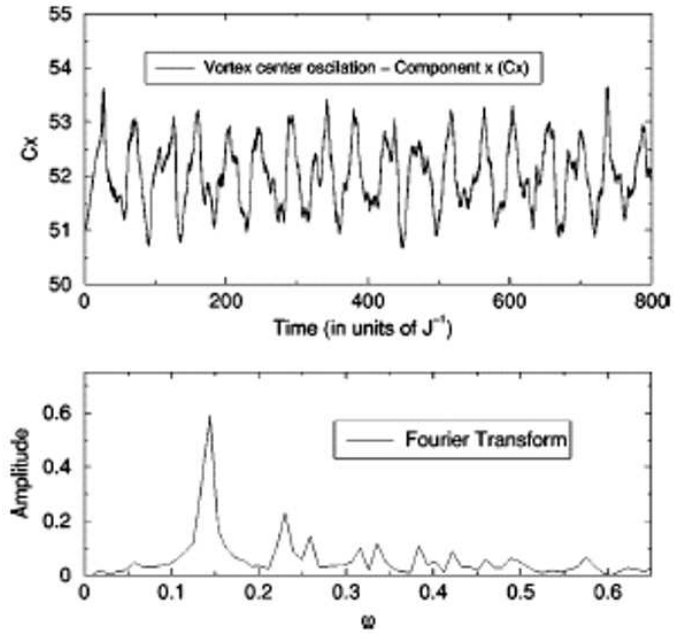


Figura 2.13: Posição do centro do vórtice como função do tempo para $L = 100a$ e sua transformada de Fourier.

capítulos, uma vez que o modelo fenomenológico que será proposto baseia-se principalmente na interação vórtice-vacância.

Capítulo 3

Vórtice Magnético Sobre uma Superfície Não Simplesmente Conexa

Neste trabalho, analisamos o comportamento de um vórtice magnético imerso num plano bidimensional não simplesmente conexo (i.e, no plano $\mathbb{R}^2$ contendo pelo menos um buraco). Aqui, particularmente, o estudo será feito considerando o limite contínuo do modelo XY clássico sobre um plano com dois discos removidos, sendo estes interpretados como impurezas não-magnéticas. Os resultados analíticos indicam duas maneiras de "aprisionar" um vórtice por meio destas vacâncias e, além disso, revelam a existência de uma interação efetiva de caráter atrativo entre as mesmas devido à presença do vórtice. Simulações também foram realizadas para testar parte destes resultados, os quais se aplicam a ferromagnetos 2D diluídos que apresentam anisotropia de plano-fácil¹.

3.1 Cálculos Analíticos

Como discutido no capítulo anterior, para incluir duas impurezas não-magnéticas na versão contínua do modelo XY 2D basta considerar duas funções do tipo $U_{\vec{r}_i}(\vec{r})$ no

¹Este trabalho foi publicado em *Physics Letters A* **329** (2004) 155-161.

Hamiltoniano puro (2.17):

$$H_{XY} = \frac{J}{2} \int \left[\frac{m^2 (\vec{\nabla} m)^2}{1 - m^2} + (1 - m^2) (\vec{\nabla} \phi)^2 + \frac{4}{a^2} m^2 \right] U_{\vec{r}_1}(\vec{r}) U_{\vec{r}_2}(\vec{r}) d^2 r, \quad (3.1)$$

onde o termo entre colchetes é a densidade h do Hamiltoniano puro, a função $U_{\vec{r}_1}(\vec{r})$, definida como $U_{\vec{r}_1}(\vec{r}) = 1$ se $|\vec{r} - \vec{r}_1| \leq a$ e $U_{\vec{r}_1}(\vec{r}) = 0$ se $|\vec{r} - \vec{r}_1| > a$, representa uma vacância de spin (um disco de raio a) centrada na posição $\vec{r}_1$ e $U_{\vec{r}_2}(\vec{r})$, definida como $U_{\vec{r}_2}(\vec{r}) = 1$ se $|\vec{r} - \vec{r}_2| \leq a$ e $U_{\vec{r}_2}(\vec{r}) = 0$ se $|\vec{r} - \vec{r}_2| > a$, representa outra vacância centrada na posição $\vec{r}_2$. A distância entre as vacâncias é dada por $p = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$. Essa equivalência entre um buraco no plano e uma vacância de spin no Hamiltoniano justifica-se por meio da seguinte relação matemática que segue da propriedade associativa dos termos presentes na expressão (3.1):

$$\int h [U_{\vec{r}_1}(\vec{r}) U_{\vec{r}_2}(\vec{r}) d^2 r] = \int [h U_{\vec{r}_1}(\vec{r}) U_{\vec{r}_2}(\vec{r})] d^2 r. \quad (3.2)$$

Observe que o problema de um plano coberto magneticamente e não simplesmente conexo (lado esquerdo da identidade) é equivalente ao problema de um plano magnético simplesmente conexo, porém, contendo vacâncias de spin no Hamiltoniano (lado direito). A interpretação depende apenas do ponto de vista: os discos são removidos ou do plano ou da densidade h . Nesta seção, apresentamos o estudo da interação entre estes dois buracos e apenas um vórtice. Lembramos que as simulações indicam que a estrutura do vórtice não é deformada significativamente pela presença de uma vacância de spin, o que foi assumido em nossos cálculos.

Por simplicidade, consideramos um vórtice planar de carga $q = +1$ posicionado na origem $(x_v, y_v) = (0, 0)$ cuja estrutura é descrita pelo seguinte par de campos escalares:

$$m_v = 0, \quad \phi_v = \arctan\left(\frac{y}{x}\right). \quad (3.3)$$

Com isso, a energia de um sistema de tamanho L contendo este vórtice e um par de impurezas não-magnéticas, localizadas em $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, é facilmente determinada substituindo-

se os campos (m_v, ϕ_v) no Hamiltoniano (3.1). Dessa forma, obtemos

$$E_I(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left[1 - \frac{a^2}{r_1^2 + d^2} - \frac{a^2}{r_2^2 + d^2} + \frac{a^4}{(r_1^2 + d^2)(r_2^2 + d^2)} \right], \quad (3.4)$$

com o potencial efetivo de interação entre estes três defeitos (os dois defeitos na rede e um no campo de spin) definido por

$$V_{ef}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_I(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - E_v. \quad (3.5)$$

Lembrando que $E_v = \pi J \ln(L/0.24a)$ é a energia do vórtice na ausência de impurezas e a constante d , que possui a mesma ordem de grandeza do espaçamento de rede a , foi introduzida na Eq.(3.4) para impedir divergências espúrias na energia, que surgem quando o centro do vórtice coincide com o centro de uma das impurezas. Essa constante é estimada, por exemplo, posicionando os três defeitos na origem. Fazendo isso, o problema de três "corpos" se reduz ao problema de um vórtice sobre um único buraco. Neste caso o potencial $V_{ef}(\vec{0}, \vec{0})$, obtido da Eq. (3.5), deve assumir o valor $-4.48J$ (veja seção 2.9) e conseqüentemente, obtemos $d = 1.1472a$. Embora a superposição de buracos seja permitida no limite contínuo, numa rede discreta e real, onde a separação mínima entre sítios é $p = a$, duas vacâncias de spin não podem ocupar o mesmo ponto. No entanto, o limite contínuo é apenas uma aproximação, o qual espera-se que leve a importantes conclusões sobre sistemas com excitações topológicas e impurezas não-magnéticas.

Primeiramente, encontramos a configuração de energia mínima envolvendo esses três defeitos. Para este propósito, bastou minimizar a quantidade $F_d(r_1, r_2)$ definida por

$$F_d(r_1, r_2) = -\frac{1}{r_1^2 + d^2} - \frac{1}{r_2^2 + d^2} + \frac{a^2}{(r_1^2 + d^2)(r_2^2 + d^2)}. \quad (3.6)$$

Como condição inicial, consideramos a geometria mostrada na figura (3.1). Nesta figura o vórtice encontra-se centralizado na origem $(0, 0)$ e as coordenadas das impurezas são $(x_1, 0)$ e (x_2, y_2) . Por efeito de simplicidade, escolhemos $y_1 = 0$ (i.e., uma

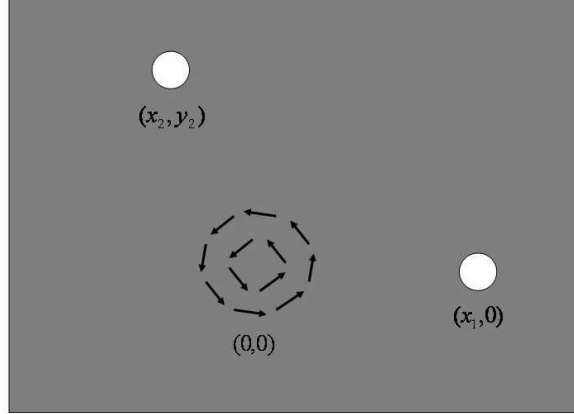


Figura 3.1: Um vórtice centrado na origem $(0,0)$ e dois discos não-magnéticos localizados em $\vec{r}_1 = (x_1, 0)$ e $\vec{r}_2 = (x_2, y_2)$. A distância entre os buracos é $p = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$.

das impurezas posicionada ao longo do eixo x). Com estas considerações, a Eq.(3.6) é reescrita como

$$F_d(x_1, x_2, y_2) = \frac{a^2 - 2d^2 - x_1^2 - x_2^2 - y_2^2}{(x_1^2 + d^2)(x_2^2 + y_2^2 + d^2)}. \quad (3.7)$$

Para minimizar a função $F_d(x_1, x_2, y_2)$, empregamos o método dos multiplicadores de Lagrange, o qual consiste em fazer

$$\vec{\nabla} F_d(x_1, x_2, y_2) = -\kappa \vec{\nabla} \varphi(x_1, x_2, y_2) \quad (3.8)$$

com

$$\varphi(x_1, x_2, y_2) = p^2 - (x_2 - x_1)^2 - y_2^2 = 0, \quad (3.9)$$

onde φ é um vínculo que mantém fixa a distância p entre as duas vacâncias e κ é um parâmetro. Dessa forma, encontramos o seguinte sistema de equações para ser

resolvido nas variáveis x_1 , x_2 e y_2 :

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 \frac{a^2 - d^2 - x_1^2}{(x_1^2 + d^2)^2 (x_2^2 + y_2^2 + d^2)} - (x_2 - x_1)\kappa = 0, \\ x_2 \frac{a^2 - d^2 - x_2^2 - y_2^2}{(x_1^2 + d^2)(x_2^2 + y_2^2 + d^2)^2} + (x_2 - x_1)\kappa = 0, \\ y_2 \left[\frac{a^2 - d^2 - x_1^2}{(x_1^2 + d^2)(x_2^2 + y_2^2 + d^2)^2} + \kappa \right] = 0, \\ p^2 - (x_2^2 - x_1^2 - y_2^2) = 0. \end{array} \right. \quad (3.10)$$

As soluções fisicamente possíveis deste sistema, as quais satisfazem a condição de extremo da função $F_d(r_1, r_2)$, são:

$$(x_1, x_2, y_2) = \left(\pm \frac{p}{2}, \mp \frac{p}{2}, 0 \right) \quad (3.11)$$

e

$$(x_1, x_2, y_2) = (0, 0 \pm p), \quad (3.12)$$

com suas respectivas geometrias indicadas na figura (3.2). Substituindo as soluções (3.11) e (3.12) na equação (3.4), obtem-se as energias E_{1v} e E_{2v} , respectivamente, como funções de p . Estes dois valores de energia (extremos da função $E_I(r_1, r_2)$) são dados por

$$E_{1v} = E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{(p/2)^2 + d^2} \right)^2 \quad (3.13)$$

e

$$E_{2v} = E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left[\left(1 - \frac{a^2}{p^2 + d^2} \right) \left(1 - \frac{a^2}{d^2} \right) \right]. \quad (3.14)$$

Conseqüentemente, em geral, qualquer configuração desses três defeitos onde o centro do vórtice encontra-se no ponto médio da reta que liga as duas vacâncias, gera a energia E_{1v} . Por outro lado, configurações desse sistema na qual o centro do vórtice posiciona-se no centro de uma das duas vacâncias, produz a energia E_{2v} .

Para analisar a estabilidade dessas duas possibilidades, comparamos as energias E_{1v} e E_{2v} em função da separação p entre as impurezas. A figura (3.3) mostra as

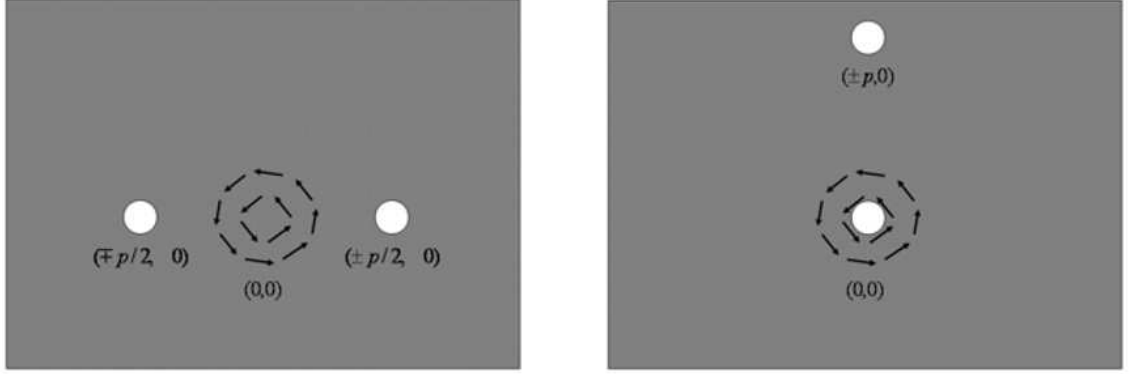


Figura 3.2: Configurações dos três defeitos correspondentes as energias E_{1v} (esquerda) e E_{2v} (direita).

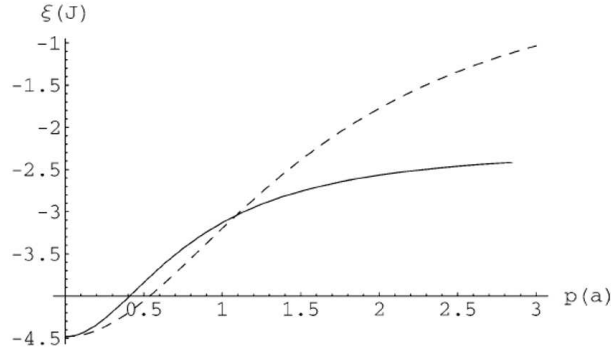


Figura 3.3: Potenciais ξ_1 (curva pontilhada) e ξ_2 (curva sólida) como funções de p . Note que para $p > 1.087a$, $\xi_2 < \xi_1$.

funções $\xi_i(p)$, definidas como $\xi_i(p) = E_{iv} - E_v$ ($i = 1, 2$). Note que $\xi_1 > \xi_2$ para todo $p > 1.087a$ e $\xi_1 < \xi_2$ para $0 < p < 1.087a$, indicando que a configuração 2 (com o centro do vórtice coincidindo com o centro de uma das impurezas) é energeticamente favorável para um grande intervalo de separação p . É interessante notar que, no caso de duas vacâncias vizinhas, separadas por uma distância $p = a$, o centro do vórtice estabiliza-se no centro da interseção dos discos (ou no centro da região não-magnética contendo as duas vacâncias de spin no caso discreto). Além disso, a Fig.(3.3) revela que o potencial ξ_2 é praticamente constante para $p > 2a$ e, conseqüentemente, a força entre a estrutura vórtice-sobre-vacância e a outra vacância decai rapidamente com a distância de separação. Note também que, neste caso, a energia necessária para remover o vórtice de uma vacância é $2.24J$, sendo a metade de $4.48J$, ou seja, a presença de outras impurezas diminui a energia de ligação do estado vórtice-sobre-vacância.

Extrapolando os resultados expostos para magnetos 2D contendo baixas concentrações de impurezas, supondo que a densidade de vórtices seja praticamente igual à densidade de vacâncias, devemos observar uma rede de vórtices magnéticos (não necessariamente periódica, desde que a distribuição de vórtices siga a mesma distribuição de vacâncias) no sistema. Acreditamos que esta rede de vórtices não seja extremamente rígida, pois, como visto anteriormente, a concentração de impurezas decresce a energia de ligação do estado vórtice-sobre-vacância. Esse cenário deve ter importantes conseqüências na dinâmica de spins, que pode ser analisada em experimentos. Por exemplo, a função espalhamento de nêutrons, $S_{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega)$, ainda pode apresentar um pico central (pois a sua causa é devido ao movimento translacional dos vórtices[7, 8, 9]), porém, esperamos uma modificação considerável em sua forma (largura e altura).

Investigamos também a natureza da interação entre duas vacâncias estáticas na presença de um vórtice. Como já discutido, a energia de um vórtice na origem e na presença de uma única impureza (localizada em $\vec{r}_i$) é dada por

$$E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_i^2 + b^2} \right), \quad (3.15)$$

onde $b = 1.03a$. Conseqüentemente, a energia necessária para remover um spin (localizado em $\vec{r}_i$) de um plano infinito contendo um vórtice na origem é

$$\varepsilon_1(\vec{r}_i) = -\frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_i^2 + b^2} \right). \quad (3.16)$$

É claro que, devido a simetria cilíndrica, esta energia não depende da direção $\vec{r}_i$. Da mesma forma, conclui-se facilmente da Eq.(3.4) que o custo de energia para retirar dois spins (localizados nos sítios $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$) do plano é

$$\varepsilon_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\pi J}{2} \ln \left[1 - \frac{a^2}{r_1^2 + d^2} - \frac{a^2}{r_2^2 + d^2} + \frac{a^4}{(r_1^2 + d^2)(r_2^2 + d^2)} \right]. \quad (3.17)$$

Portanto, existe um potencial efetivo de interação entre os buracos estáticos devido

ao vórtice dado por $\Delta = \varepsilon_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \varepsilon_1(\vec{r}_1) - \varepsilon_1(\vec{r}_2)$, o qual é expresso como

$$\Delta = \frac{\pi J}{2} \ln \left[\frac{1 + a^2 F_b(r_1, r_2)}{1 + a^2 F_d(r_1, r_2)} \right], \quad (3.18)$$

onde $F_b(r_1, r_2)$ é obtido da Eq.(3.6), substituindo d por b . Como $b < d$, o potencial Δ é negativo, indicando uma interação efetiva atrativa entre as vacâncias.

O problema apresentado se resume da seguinte forma: Considere, por exemplo, a configuração inicial indicada na Fig.(3.1). Supondo que $p > 1.087a$, a distribuição de spin (ou a energia magnética) será reajustada para minimizar a energia do sistema, deslocando o núcleo do vórtice para o centro de uma das vacâncias. Mesmo assim, a distribuição de spin não alcança o estado de mínima energia, pois a estrutura vórtice-sobre-vacância formada é ainda atraída pela outra vacância. Mas agora, nenhuma destas estruturas podem se mover. De fato, o plano rígido impossibilita o movimento dos buracos sobre o mesmo, mantendo-os em suas posições iniciais. Como consequência, o sistema não atinge seu nível de mais baixa energia; há uma frustração geométrica que se origina de um vínculo (a distância p fixa entre os dois buracos desconectados). Claro que o problema de vacâncias estáticas é um modelo limitado, porém, importante para compreendermos a interação de buracos móveis no background magnético (i.e, no vórtice de spin). Supondo as duas vacâncias livres, a interação atrativa entre elas deve resultar num par de buracos imerso no plano magnético. Provavelmente, em sistemas elásticos, uma variação na geometria do plano, compensando a invariância de p , minimiza a energia magnética. Neste caso, esperamos que a introdução de uma densidade hamiltoniana elástica no problema modele a deformação no plano.

3.2 Simulações

Com o intuito de testar os resultados obtidos no limite contínuo, utilizamos a técnica da Dinâmica de Spins. Consideramos uma rede quadrada de lado $L = 20a$ com um vórtice inicialmente localizado na origem do sistema e com duas vacâncias de spin igualmente distanciadas do mesmo, como mostra a figura (3.4). Os resultados

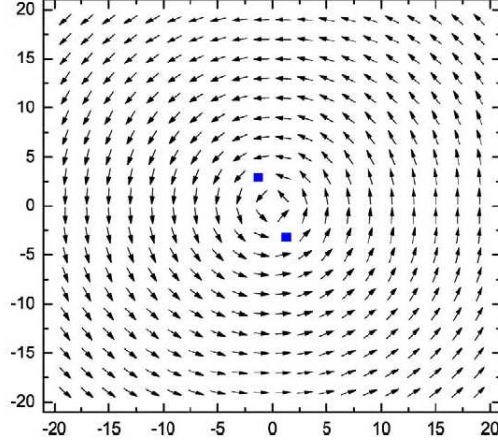


Figura 3.4: Configuração inicial com um vórtice centrado na origem e duas vacâncias de spin (quadrados próximos ao centro do vórtice) separadas por uma distância $p \simeq 3.16a$.

analíticos indicam que, para essa configuração inicial ($p \simeq 3.16a > 1.087a$), a origem é uma posição de equilíbrio instável para o centro do vórtice. Então, espera-se que nas simulações o centro do vórtice mova em direção a uma das impurezas. Para observar isso, impomos condições de contorno diagonais antiperiódicas[41]:

$$\begin{aligned}\vec{S}_{L+1,y} &= -\vec{S}_{1,L-y+1}, & \vec{S}_{0,y} &= -\vec{S}_{L,L-y+1}, \\ \vec{S}_{x,L+1} &= -\vec{S}_{L-x+1,1}, & \vec{S}_{x,0} &= -\vec{S}_{L-x+1,L},\end{aligned}\tag{3.19}$$

para todo $1 \leq x, y \leq L$, que permite manter um único vórtice no sistema. As equações que regem o movimento dos spins, dadas por

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = -J\vec{S}_i \times \sum_j (S_j^x \hat{e}_x + S_j^y \hat{e}_y),\tag{3.20}$$

foram integradas numericamente pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem com um passo de tempo $\Delta t = 4 \times 10^{-4} J^{-1}$. Após 10^4 passos a posição do centro do vórtice atinge o equilíbrio localizando-se em uma das vacâncias (veja figura 3.5), estando de pleno acordo como os resultados analíticos.

Por outro lado, se a separação entre as impurezas for menor do que $1.087a$, a teoria prevê um equilíbrio estável do vórtice no ponto médio da reta que liga as duas vacâncias. As simulações também concordam com esse resultado, como pode ser visto

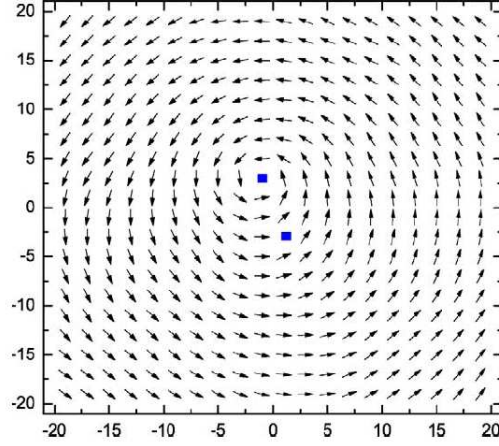


Figura 3.5: Estado final da Fig. (3.4) após 10^4 passos de tempo o núcleo do vórtice posiciona-se no centro de uma vacância.

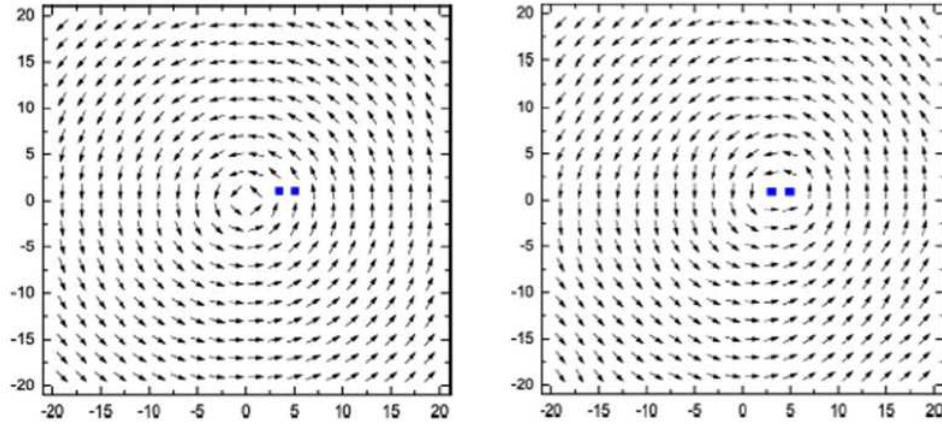


Figura 3.6: Configuração antes (esquerda) e após (direita) 10^4 passos de tempo. Neste caso ($p = a$), o vórtice desloca-se da origem para o ponto central da reta que ligas as vacâncias.

na figura(3.6). Nesta figura, as vacâncias encontram-se distanciadas por apenas um espaçamento de rede. Durante 10^4 passos de tempo, o centro do vórtice desloca-se da origem para o ponto médio da reta que conecta as duas impurezas.

Além das configurações apresentadas nesta seção, diversas outras também foram testadas, confirmando os resultados analíticos. Informamos também que as configurações finais obtidas em cada simulação não são completamente estáticas, pois notamos um pequeno movimento do vórtice em torno da sua posição de equilíbrio. Uma análise cuidadosa desta dinâmica encontra-se na Ref.[40], onde observa-se um movimento anarmônico de um vórtice ao longo de uma linha de impurezas não-magnéticas.

Capítulo 4

Função Correlação Dinâmica em Ferromagnetos 2D com Anisotropia de Plano-Fácil Contendo uma Porcentagem de Impurezas Não-Magnéticas

Neste trabalho, investigamos a função correlação dinâmica planar, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, para o modelo XY clássico sobre uma rede quadrada contendo diluições de spin. Para esta finalidade, utilizamos a técnica de Monte Carlo (MC) combinada com Dinâmica de Spins (DN). O pico central e o de ondas de spin, obtidos por nossas simulações, são completamente diferentes do caso puro. Além disso, um pico inelástico adicional surge. Sugerimos um modelo fenomenológico baseado na interação vórtice-vacância para explicar as modificações observadas.¹

¹Este trabalho foi publicado em *Physical Review B* **72**, 094425 (2005).

4.1 Simulações de Monte Carlo e Dinâmica de Spins em Sistemas Diluídos

Por meio de simulações, analisamos as alterações que uma concentração ρ_v de impureza não-magnética causa na função correlação dinâmica planar para o modelo XY clássico, o qual é definido como

$$H_{XY} = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \sigma_i \sigma_j, \quad (4.1)$$

onde adotamos J positivo (caso ferromagnético) e, para uma determinada densidade de impureza, atribuímos aleatoriamente valores 0 ou 1 aos fatores de diluição $\{\sigma_i\}$. Os cálculos foram realizados em redes quadradas de spin com dimensões lineares $L = 16a$, $32a$, $64a$ e $96a$, impondo condições de contorno periódicas:

$$\begin{aligned} \vec{S}_{L+1,j} &= \vec{S}_{1,j}, & \vec{S}_{0,j} &= \vec{S}_{L,j}, \\ \vec{S}_{i,L+1} &= \vec{S}_{i,1}, & \vec{S}_{i,0} &= \vec{S}_{i,L}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Analisamos várias concentrações de vacância (desde $\rho_v = 0.00$ até 0.30) nas mais diversas temperaturas. O comportamento dinâmico dos sistemas foram obtidos combinando as técnicas MC e DS, as quais encontram-se descritas na Ref[42]. Estas técnicas baseiam-se nos métodos de simulação desenvolvidos nas Refs.[7, 43] e parte do MC foi aplicado recentemente no modelo de Plano-Fácil diluído[36, 38]. Essencialmente, o método MC gera um ensemble canônico (temperatura fixa) de configurações que incluem diferentes posições de vacâncias. Para cada configuração, a técnica DS produz um ensemble microcanônico (energia total conservada) de estados, a partir do qual calcula-se a função correlação dinâmica $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$. O produto final da simulação é simplesmente a média das correlações dinâmicas que resultam dos diferentes estados de MC utilizados para iniciar a DS.

No cálculo de MC, empregamos uma combinação de Metropolis com Super-Relaxação que atualizam as três componentes de cada spin. Além disso, adicionamos o Wolff que modifica apenas as componentes x e y. Os dois últimos algoritmos são

importantes em baixas temperaturas, onde as componentes no plano xy tendem a "congelar" e o algoritmo de Metropolis torna-se ineficiente. Definimos o "passo de MC" como a combinação de um passo de Super-Relaxação com um passo de Metropolis, seguido por um passo de Wolff, os quais são definidos como segue:

Um passo de Metropolis conclui-se quando todos os $N = (1 - \rho_v)L^2$ spins do sistema são atualizados em sequência aleatória. A orientação de cada spin é modificada somando um pequeno incremento em direção aleatória e, em seguida, renormalizando o comprimento do spin. A aceitação ou rejeição das alterações ocorrem de acordo com o algoritmo de Metropolis tradicional, com o tamanho dos incrementos de spin ajustados de forma que a taxa de aceite das mudanças caia entre 10% e 40%.

O passo de Super-Relaxação concretiza-se quando os N spins, também escolhidos em sequência aleatória, são refletidos em relação às direções dos campos efetivos produzidos pelos seus respectivos vizinhos mais próximos, conservando o comprimento unitário dos mesmos e a energia total do sistema.

No caso do Wolff, um passo consiste na formação de um cluster, o qual origina-se de um sítio aleatório e cresce até atingir pelo menos 1/4 do total de sítios da rede. Neste algoritmo, associa-se a cada vacância um comprimento nulo de spin, de maneira que os cálculos prossigam normalmente como em sistemas puros. Dessa forma, expansões de clusters através de sítios não-magnéticos são permitidas, ou seja, um grande cluster pode ser composto de vários sub-clusters conectados por vacâncias.

X	L=16a	L=32a	L=64a	L=96a
nskip	5000	5000	10000	10000
binsize	20000	20000	40000	80000
nestates	500/64	500/32	500/8	500/4
nsys	64	32	8	4
icdelay	2560	1280	640	640

Tabela 4.1: Parâmetros de controle do Monte Carlo.

Os parâmetros de controle do MC, indicados na tabela 4.1, foram ajustados da seguinte forma. Primeiramente, utilizamos *nskip* passos de MC para equilibrar o

sistema. Durante $binsize$ passos, armazenamos uma média de $nstates$ configurações de spin para iniciar a DS. Realizamos estes procedimentos para $nsys$ posições diferentes de vacâncias, de forma que um total de $nsys \times nstates = 500$ configurações, espaçadas por $icdelay$ passos, fossem geradas.

Iniciando com cada configuração termalizada, obtemos a evolução temporal dos spins empregando o método de Runge-Kutta com um passo no tempo $\Delta t = 0.04J^{-1}$. O intervalo de integração foi $t_{max} = 8192J^{-1}$ e, conseqüentemente, obtivemos uma ótima resolução de frequência $\Delta\omega = 2\pi/t_{max} \simeq 7.67 \times 10^{-4}J^{-1}$. Por meio de 2^{11} configurações de spin, espaçadas por $10 \times \Delta t$ passos de tempo, calculamos $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ restringindo $\vec{q}$ na direção $(1, 0)$ e fazendo a média sobre a integração no tempo dos 500 estados gerados pelo MC.

4.2 Resultados das Simulações

Agora, resumiremos os principais resultados. A figura (4.1) mostra $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ para $T = 0.350J/k_B$, $\vec{q} = (\pi/4a, 0)$, $L = 64a$ em três concentrações de impureza, $\rho_v = 0.00, 0.16, 0.20$. As temperaturas críticas T_c (utilizamos T_{KT} para o sistema

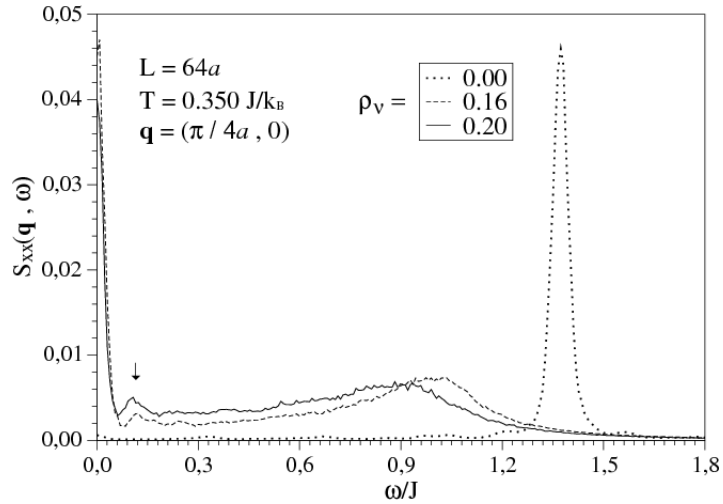


Figura 4.1: Fator de estrutura planar $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para $T = 0.350J/k_B$, $\vec{q} = (\pi/4a, 0)$, $L = 64a$ e em três concentrações de impureza $\rho_v = 0.00, 0.16$ e 0.20 .

puro) correspondentes a estas densidades de vacância são, respectivamente, 0.700,

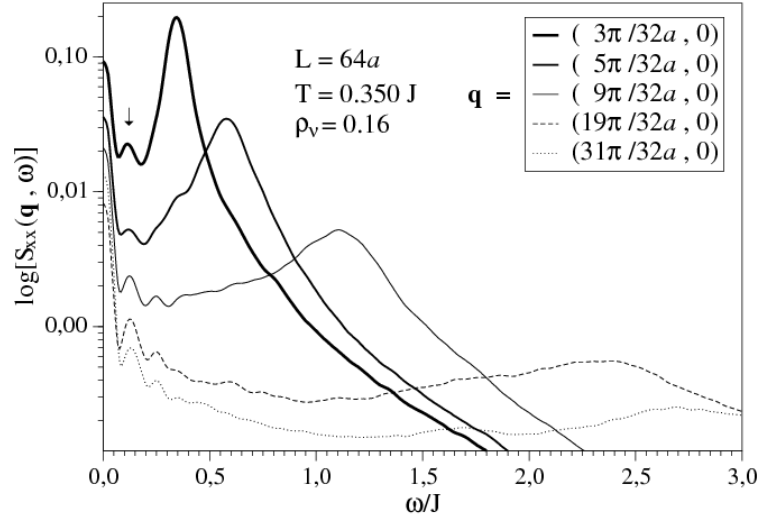


Figura 4.2: $\log[S_{xx}(\vec{q}, \omega)]$ em função de ω para diversos valores de q . Note que a posição do pequeno pico inelástico (indicada pela seta) é independente de q .

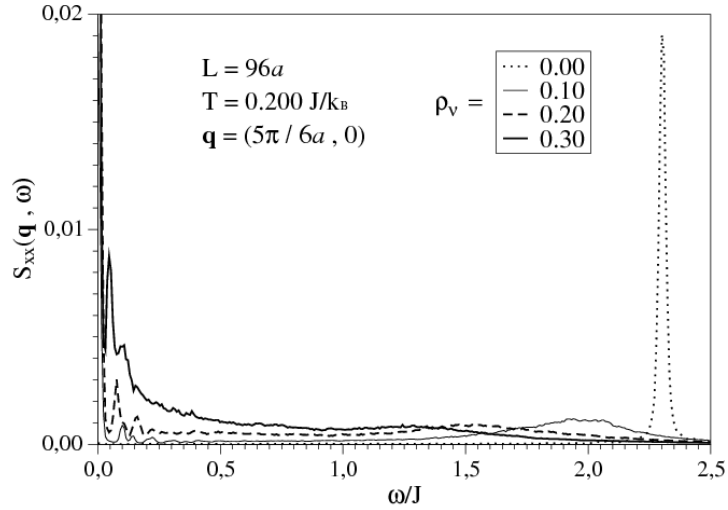


Figura 4.3: Comportamento de $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para algumas concentrações de impureza ρ_v .

0.453 e 0.384 (em unidades de J/k_B)[36]. Note a presença de um pico bastante estreito posicionado em $\omega = 0$ que é completamente diferente do pico central observado em sistemas puros. Em geral, para $T \leq T_c$, o pico central torna-se mais estreito com o aumento de ρ_v e, ao mesmo tempo, o pico de mágnons (POS) move-se em direção de baixas frequências e alarga-se. Além do POS, outro interessante pico inelástico numa frequência finita ω_v independente de q surge (a independência com q pode ser notada pela figura 4.2). Com o intuito de visualizar melhor esta nova

estrutura, utilizamos valores intermediários de q . Para pequenos valores de momento, o POS posiciona-se em baixas frequências, dominando a região na qual o novo pico aparece e, conseqüentemente, q pequeno não é apropriado para detectá-lo. Este pico inelástico movimenta-se lentamente no sentido de baixas frequências, tornando-se mais estreito e mais elevado com o acréscimo de ρ_v , como melhor observado na Fig.(4.3). Comportamento análogo ocorre quando fixamos ρ_v e ampliamos o tamanho L do

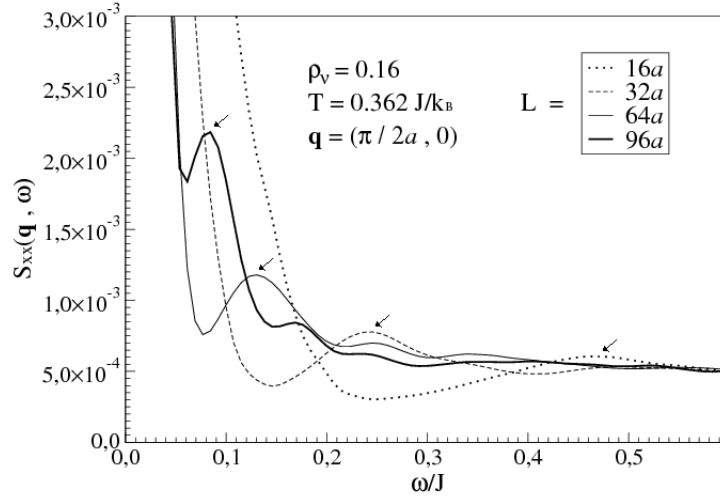


Figura 4.4: $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ em função de ω para alguns valores de L .

sistema (veja Fig. 4.4). De fato, verificamos que $\omega_v = C(\rho_v, T)/L$ (em unidades de J), onde o fator $C(\rho_v, T)$ depende da concentração de impureza e da temperatura. Quando ρ_v ou T aumenta, o fator $C(\rho_v, T)$ decresce, no entanto, o efeito de ρ_v sobre $C(\rho_v, T)$ é muito mais forte. Na figura (4.5), plotamos $C(\rho_v, T)$ contra ρ_v para $T = 0.200J/k_B$. Essencialmente, para uma determinada temperatura T , $C(\rho_v, T)$ diminui linearmente com ρ_v . No limite de baixíssimas concentrações de impureza ($\rho_v \rightarrow 0$), o fator $C(\rho_v, 0.200)$ tende ao valor $12.09Ja$. Também, estudamos o comportamento de $C(\rho_v \rightarrow 0, T)$ para outros valores de temperatura, como mostrado na figura (4.6). Nesta figura, plotamos o gráfico de $C(\rho_v, T)$ contra ρ_v para três temperaturas. Com a diminuição de T , $C(\rho_v \rightarrow 0, T)$ aumenta e extrapolando os dados para o limite $T \rightarrow 0$ adquirimos $C(\rho_v \rightarrow 0, T \rightarrow 0) \approx 13.00Ja$, conduzindo a

$$\omega_v \approx \frac{13.00J}{L}. \quad (4.3)$$

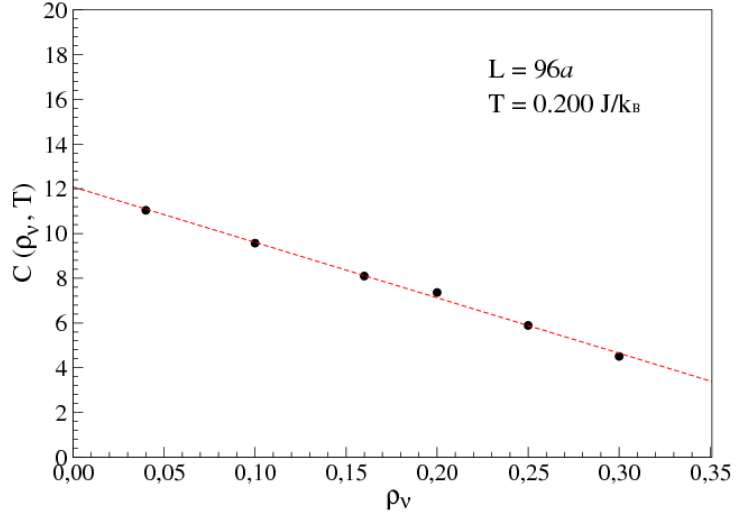


Figura 4.5: O fator $C(\rho_v, T)$ em função de ρ_v para $L = 96a$ e $T = 0.200 J/k_B$. A linha pontilhada é um ótimo ajuste para os dados. Observe que $C(\rho_v \rightarrow 0, T) \rightarrow 12.09 Ja$.

Este resultado é muito interessante, uma vez que Pereira e colaboradores [40] mostraram que vórtices podem oscilar em torno de vacâncias, com tal movimento caracterizado por modos normais de frequências bem definidas que possuem o mesmo comportamento de ω_v em relação ao tamanho L do sistema. Seus cálculos foram efetuados em um sistema a temperatura zero, contendo somente um vórtice e uma única impureza e, então, válido no limite $\rho_v \rightarrow 0$ e $T \rightarrow 0$. A frequência associada ao modo principal do movimento oscilatório do vórtice, calculada como $\omega_0 \approx (13.57/L)J$, está muito próxima do valor de ω_v no limite $\rho_v \rightarrow 0, T \rightarrow 0$. Portanto, a relação $\omega_v(\rho_v \rightarrow 0, T \rightarrow 0) \approx \omega_0$ sugere fortemente que a causa do novo pico inelástico, observado em nossas simulações, é devido à interação vórtice-vacância. Realmente, a presença de outras vacâncias reduz consideravelmente a energia que "prende" um vórtice a uma vacância, como vimos no capítulo anterior.

Diferentemente dos vórtices livres em sistemas puros, o estado ligado vórtice-vacância contém grau interno de liberdade com algumas frequências características. Portanto, em experimentos, a interação de nêutrons com uma amostra diluída deve excitar modos de vibração de vórtices em torno de vacâncias, implicando em alguns picos inelásticos (que devem ser independentes de q) na função resposta. De fato,

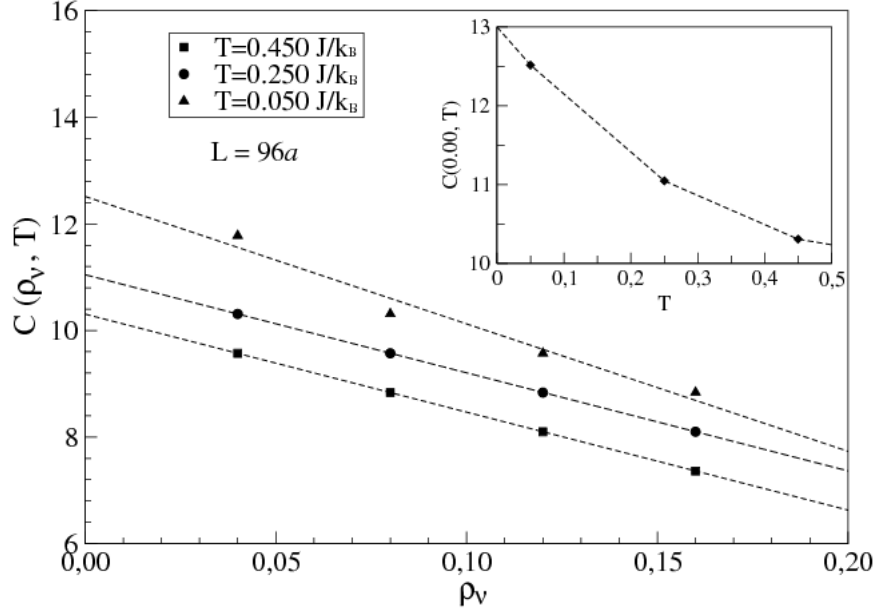


Figura 4.6: Gráfico de $C(\rho_v, T)$ contra ρ_v para as temperaturas $T = 0.050$, $T = 0.250$, $T = 0.450$ em unidades de J/k_B . O gráfico interno, $C(\rho_v \rightarrow 0, T)$ em função de T , indica que $C(\rho_v \rightarrow 0, T \rightarrow 0) \rightarrow 13.00Ja$.

em condições especiais, principalmente para valores grandes do momento transferido q , outros picos inelástico quase imperceptíveis (não analisados aqui) surgem nas simulações (veja figura 4.2). Estes pequenos picos devem ter conexões com os outros modos de vibração menos intensos analisados na Ref.[40].

Na seção (2.8), mencionamos que Mertens e colaboradores construíram um modelo fenomenológico baseado no movimento efetivo de vórtices. A função $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ obtida por eles contém um pico central com largura proporcional à mobilidade $\bar{u}$ dos vórtices e altura inversamente proporcional à $\bar{u}$. Sabemos que vacâncias reduzem a mobilidade dos vórtices. Dessa forma, se este modelo realmente funciona, a inclusão de impurezas deve diminuir a largura do pico central e, ao mesmo tempo, intensificar sua altura. De fato, nossas simulações verificam este fenômeno.

4.3 Cálculos analíticos

Como vimos, para uma determinada temperatura T , à medida que ρ_v aumenta a posição do pico de onda de spin (POS) move-se na direção de baixas frequências ω ,

com a largura do pico aumentando ligeiramente. Comportamento semelhante ocorre em sistemas puros quando a temperatura se eleva, indicando que a desordem não-magnética é, até certo ponto, similar à desordem térmica. Cálculos teóricos, baseados na aproximação de onda de spin, mostram que o expoente η_v da função correlação spin-spin estática do sistema diluído possui a mesma forma do expoente η para o caso puro, diferindo somente por um parâmetro que renormaliza a temperatura[34]. A relação aproximada entre η_v e η é dada por

$$\eta_v \simeq \eta/(1 - 2\rho_v). \quad (4.4)$$

Escrevendo $\eta_v = 1/2\pi J\beta_v$, obtemos

$$\beta_v \simeq \beta(1 - 2\rho_v) \quad (4.5)$$

e então, o efeito de vacâncias é aumentar a temperatura efetiva do sistema. De fato, a temperatura de transição de fase T_c diminui com o acréscimo de ρ_v , anulando-se no limiar de percolação do sistema ($\rho_v \approx 0.41$)[34, 36]. Substituindo η por η_v na função correlação dinâmica obtida por Villain (2.52) ou Nelson e Fisher (2.53), nota-se um alargamento do POS com o acréscimo de ρ_v , estando de acordo qualitativo com nossas simulações.

Enquanto o comportamento do POS está qualitativamente bem entendido para o problema diluído, a pequena estrutura inelástica adicional a uma frequência ω_v , não observada em sistemas puros, é um novo e interessante pico que necessita de explicação. Propomos que a interação vórtice-vacância pode ser a justificativa para tal estrutura. Um simples modelo fenomenológico fundamentado em oscilações de vórtices será desenvolvido agora.

Os vórtices são criados em pares de vórtice-antivórtice e, em sistemas com impurezas, deve ser energeticamente favorável para um par permanecer na região próxima de uma vacância, preferencialmente, com uma das duas estruturas localizada exatamente no centro da vacância[44]. Então, o sistema pode conter alguns vórtices (antivórtices) fixos às impurezas e com seus respectivos antivórtices (vórtices) na

vizinhança (em geral, não fixos, pelo menos para baixas concentrações de vacância). Considerando um vórtice fixo específico, definimos seu par como o antivórtice mais próximo. A energia desta configuração pode ser estimada como $E_i \cong E_{2v} + U_{vi}$, onde E_{2v} é a energia de criação do par (para uma rede discreta, Landau e Binder[45] encontraram $E_{2v} \approx 6.39J$) e $U_{vi} \approx -3.178J$ é a energia do estado vórtice-sobre-vacância[37].

A função correlação de spin dependente do tempo foi obtida após as seguintes suposições. Primeiro, assumimos que a magnetização em qualquer ponto $\vec{r}_i$ da rede é devida aos vórtices localizados em sítios $\vec{r}_\gamma$ não-magnéticos com

$$S^x(\vec{r}_i, t) = \sum_{\gamma} S^x(\vec{r}_i - \vec{r}_\gamma, t). \quad (4.6)$$

Na realidade, os antivórtices, distanciados de $|\vec{R}_\gamma|$ dos seus respectivos vórtices fixos, contribuem para a magnetização e também devem ser considerados. Nesta notação, a solução planar vórtice-antivórtice é escrita em coordenadas polares (Θ, Φ) como

$$\Theta_p = \pi/2, \quad \Phi_p = \arctan \left[\frac{y - y_\gamma}{x - x_\gamma} \right] - \arctan \left[\frac{y - y_\gamma - \vec{R}_\gamma \cdot \hat{y}}{x - x_\gamma - \vec{R}_\gamma \cdot \hat{x}} \right]. \quad (4.7)$$

Na análise mais simples, quando não centrados em vacâncias, os antivórtices só contribuem para o fator de estrutura estático, desde que eles não podem se mover consideravelmente na rede. Mais isso não é completamente verdade, pois estas estruturas afetam o pico central no modelo proposto por Mertens e Bishop[33] (obviamente, com menos intensidade que no caso puro). A dependência temporal foi assumida das oscilações dos vórtices em torno das vacâncias. Como vimos (seção 2.9), tais oscilações não são tão simples e a amplitude de movimento é da ordem de um espaçamento de rede a . Porém, por simplicidade, assumimos uma aproximação harmônica escrevendo

$$S^x(\vec{r}_i, t) = \sum_{\gamma} S^x[\vec{r}_i - \vec{r}_\gamma - \vec{a}_\gamma \sin(\omega_v t)], \quad (4.8)$$

onde o vetor $\vec{a}_\gamma$ ($|\vec{a}_\gamma| = a$) indica a direção do movimento do vórtice (em relação ao

eixo x) e ω_v é a frequência de oscilação do mesmo. Usando as considerações acima, a função correlação $S_{xx}(\vec{r}, t) = \langle S^x(\vec{r}, t) S^x(\vec{0}, 0) \rangle$ é calculada como

$$S_{xx}(\vec{r}, t) \approx n_v \int \mu(R) d^2 r_\gamma dR \langle S^x(\vec{r} - \vec{r}_\gamma - \vec{a}_\gamma \sin(\omega_v t), R, \alpha) S^x(\vec{r}_\gamma, R, \alpha) \rangle_{\alpha, \vartheta}, \quad (4.9)$$

onde n_v é a densidade de par de vórtice, $\mu(R)$ é a função distribuição de tamanhos de pares[46] e α, ϑ são os ângulos que os vetores $\vec{R}_\gamma$ e $\vec{a}_\gamma$ fazem com o eixo x, respectivamente. O símbolo $\langle \dots \rangle_{\alpha, \vartheta}$ representa uma média sobre estes dois ângulos. No regime de baixa concentração de impureza e temperatura, estimamos n_v substituindo β por β_v no fator de Boltzmann, obtendo

$$n_v(\rho_v) \approx B(\rho_v) \exp(-\beta E_i), \quad (4.10)$$

onde o coeficiente B é determinado por $B(\rho_v) \approx \exp(2\rho_v \beta E_i)$. Como esperado, a desordem geométrica (ou desordem não-magnética) contribui para a formação de pares.

A transformada de Fourier espaço-temporal da Eq.(4.9) leva-nos a:

$$S_{xx}(\vec{q}, \omega) \approx n_v F_{xx}(\vec{q}) \int \langle \exp[-i\vec{q} \cdot \vec{a}_\gamma \sin(\omega_v t)] \rangle_{\vartheta} \exp(i\omega t) dt, \quad (4.11)$$

onde $F_{xx}(\vec{q}) = \int \mu(R) \langle |f_{xx}(\vec{q}, R, \alpha)|^2 \rangle_{\alpha} dR$, com

$$|f_{xx}(\vec{q}, R, \alpha)|^2 = \frac{1}{2} [|f_x(\vec{q}, R, \alpha)|^2 + |f_y(\vec{q}, R, \alpha)|^2]. \quad (4.12)$$

Os fatores de estrutura estáticos na Eq.(4.12) são

$$f_x(\vec{q}, R, \alpha) = \int \cos[\Phi_p(\vec{q}, R, \alpha)] \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) d^2 r, \quad (4.13)$$

$$f_y(\vec{q}, R, \alpha) = \int \sin[\Phi_p(\vec{q}, R, \alpha)] \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) d^2 r \quad (4.14)$$

e foram calculados como na Ref.[47] [$f_x \sim O(R^2)$]. Depois de calcular a média sobre

ϑ , a integral em (4.11) é escrita como

$$\int [J_0(qa \sin(\omega_v t)) \cos(\omega t) + H_0^s(qa \sin(\omega_v t)) \sin(\omega t)] dt, \quad (4.15)$$

onde J_0 and H_0^s são as funções de Bessel e Struve, respectivamente. A Integração numérica da Eq.(4.15) implica em dois picos estreitos em frequências bem definidas $\omega = 0$ e $\omega = \omega_v$, sendo o pico central bem mais intenso. Dessa forma, aproximamos

$$S_{xx}(\vec{q}, \omega) \cong n_v(\rho_v) F_{xx}(\vec{q}) [b_1 \delta(\omega) + b_2 \delta(\omega - \omega_v)], \quad (4.16)$$

onde b_1 e b_2 são parâmetros que especificam as intensidades dos picos. Este simples resultado analítico sugere que a interação vórtice-vacânica contribui significativamente para a função correlação planar, implicando em dois picos infinitamente altos e estreitos. Claro que, assim como os picos de onda de spin obtidos teoricamente divergem[28, 29], as funções delta na Eq.(4.16) são apenas aproximações. No entanto, as formas dos picos podem ser modificadas incluindo outras interações no modelo, tal como a interação vórtice-mágnon. Neste trabalho não consideramos este tipo de interação, porém, esperamos que as funções delta devam ser substituídas por distribuições Lorentzianas centralizadas em $\omega = 0$ e $\omega = \omega_v$, uma vez que

$$\pi \delta(\omega - \omega') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\epsilon}{(\omega - \omega')^2 + \epsilon^2} \right]. \quad (4.17)$$

Com isso, a função correlação planar é reescrita como

$$S_{xx}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{c_1 \epsilon_1}{\omega^2 + \epsilon_1^2} + \frac{c_2 \epsilon_2}{(\omega - \omega_v)^2 + \epsilon_2^2}, \quad (4.18)$$

onde c_i e ϵ_i representam, respectivamente, as alturas e larguras do pico central ($i = 1$) e inelástico ($i = 2$). Tais parâmetros devem ser funções de ρ_v , T , $\vec{q}$ e L . Este modelo analítico simples reproduz o comportamento qualitativo de $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$ observado em nossas simulações.

Em resumo, vórtices interagem com vacâncias em ferromagnetos 2D diluídos

que se ajustam ao modelo XY, resultando num pequeno pico inelástico na função correlação dinâmica. Como ponto fraco de nossa teoria, o modelo fenomenológico proposto não explica a relação $\omega_v \propto L^{-1}$ que indica duvidosamente um desaparecimento do pequeno pico inelástico no limite termodinâmico. No entanto, embora todas as simulações só podem ser realizadas em sistemas finitos, daremos uma idéia simples sobre esta relação no limite $L \rightarrow \infty$. Em sistemas clássicos de spin, o espectro de mágnon não possui gap. Portanto, qualquer movimento de vórtice inevitavelmente excita ondas de spin[22, 40], implicando em consequências fundamentalmente diferentes entre sistemas finitos e ilimitados. Para amostras finitas, a radiação de mágnons, suas reflexões nas bordas e sua interação com os vórtices, estabelece um estado dinâmico do material que consiste da superposição de ambos o movimento de mágnons e da oscilação de vórtices[22, 40, 48], implicando na relação entre ω_v e L observada nas simulações. Provavelmente, esta relação é uma propriedade geral de magnetos 2D finitos constituídos de uma lei de dispersão desprovida de gap. Por outro lado, em amostras infinitas, os mágnons comportam-se diferente devida à ausência de bordas e possivelmente ω_v torna-se independente L , permanecendo um pico inelástico numa frequência característica finita, embora os métodos usados aqui não possam calcular seu valor.

Capítulo 5

Conclusões

Nesta dissertação estudamos a influência de impurezas não-magnéticas sobre a dinâmica de vórtices no modelo 2D. Particularmente, avaliamos sistemas ferromagnéticos de spin clássico. No capítulo 3, utilizamos cálculos analíticos no limite contínuo e métodos numéricos em redes discretas para investigar a estabilidade de um vórtice na presença de duas vacâncias estáticas. Encontramos duas possibilidades de capturar um vórtice em magnetos 2D, as quais dependem da distância p entre as duas impurezas. Como consequência deste resultado, predizemos uma notável modificação nos picos contidos na função correlação dinâmica quando analisada em sistemas com baixas concentrações de impurezas. Os cálculos analíticos também indicam que o vórtice induz uma interação efetiva de natureza atrativa entre as duas vacâncias. Estes fenômenos possivelmente são características gerais de modelos magnéticos. De fato, recentes trabalhos mostram que excitações topológicas tipo sóliton, os quais surgem no modelo de Heisenberg isotrópico, também são atraídas por impurezas não-magnéticas[49]. Outro fato é a verificação da interação entre duas vacâncias numa cadeia de Ising quântica[50]. Dessa forma, nossos resultados podem ser relevantes, por exemplo, no estudo do efeito Hall quântico, onde interações entre skyrmions e impurezas devem exercer um papel fundamental no gás de elétrons 2D.

No capítulo 4, descrevemos sucintamente as simulações de Monte Carlo e Dinâmica de Spin que empregamos na análise da função correlação dinâmica, $S_{xx}(\vec{q}, \omega)$, no modelo XY 2D quando sítios não-magnéticos estão presentes. Observamos um

movimento do pico de mágnon (POS) na direção de baixas frequências ω com sua altura decrescendo à medida que a concentração de impureza aumenta. Ao mesmo tempo, o pico central torna-se mais alto e estreito. Providenciamos cálculos analíticos que explicam o comportamento destes dois picos. Nas simulações, notamos também a presença de um novo pico inelástico independente de q , o qual localiza-se em uma frequência bem definida $\omega_v = C(\rho_v, T)/L$. Propomos um modelo fenomenológico baseado em oscilações de vórtice em torno de vacâncias para reproduzir esta nova estrutura. Este modelo sugere uma forma eficiente e indireta de detectar vórtices experimentalmente em materiais magnéticos 2D; para valores típicos de amostras ferromagnéticas ($J \cong 0.1\text{eV}$, $a \cong 1\text{\AA}$ e $L \cong 1\text{cm}$), devemos observar o novo pico numa frequência da ordem de $\omega_v \cong 10^7\text{s}^{-1}$ (para baixos valores de ρ_v e T). Nossa teoria pode ser testada em diversos materiais reais (ferromagnetos e, provavelmente, em antiferromagnetos), incluindo a classe de compostos $(R - NH_3)_2M_yMn_{1-y}X_4$, onde R é um radical orgânico que separa os planos MnX e X sendo o Cl ou Br . O spin do íon Mn ($S = 5/2$) assegura que estes compostos são bem modelados por Hamiltonianos clássicos, e os átomos não-magnéticos, representados por M , podem ser o Mg ou Cd . Esperamos que nosso trabalho possa motivar experimentos para detectar o interessante pico inelástico predito aqui.

Referências Bibliográficas

- [1] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, "Solid State Physics, International Edition", ed. D.G. Crane (Saunders College Publishing, 1976).
- [2] S.R.A. Salinas, "Introdução à Física Estatística", (EDUSP, São Paulo, 1999).
- [3] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [4] W.H. Zurek, Phys. Reports **276**, 177 (1996).
- [5] J.G. Bednorz and K.A. Mueller, Z. Phys.B **64**, 189 (1986).
- [6] M.H. Julien et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 3422 (2000).
- [7] F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, and C. Kawabata, Phys. Rev. Lett. **59**, 117 (1987); Phys. Rev.B **39**, 591 (1989).
- [8] M.E. Gouvêa, G.M. Wysin, A.R. Bishop, and F.G. Mertens, Phys. Rev. B **39**, 11840 (1989).
- [9] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E.Gouvêa and B.V. Costa, Z. Phys. B: Condens. Matter **89**, 109 (1992).
- [10] F.M. Paula, A.R. Pereira, L.A.S.Mól, Phys. Lett.A **329**, 155 (2004).
- [11] F.M. Paula, A.R. Pereira, G.M. Wysin, Phys. Rev. B **72**, 094425 (2005).
- [12] M.Steiner and A.R Bishop, in Solitons 786, published for V.M. Agranovich and A.A. Maradudin (North-Holland, Amsterdam,1986).

- [13] J.J. Sakurai, "Modern Quantum Mechanics", (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).
- [14] L.A.S. Mól, Dissertação de Mestrado Apresentada à UFV (2004).
- [15] D.P. Landau and K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", (Cambridge University Press, New York, 2000).
- [16] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [17] J.E.R. Costa, Dissertação de Doutorado Apresentada à UFMG (1997).
- [18] D.P. Landau and R.W. Gerling, J. Magn. Magn. Mat. **104**, 843 (1992).
- [19] D.P. Landau and M. Krech, J. Phys.: Condens. mat. **11**, 179 (1999).
- [20] D.G. Wisler and H. Zabel, S.M. Shapiro, Z. Phys. B **93**, 277 (1994).
- [21] G.M. Wysin, Phys. Rev. B **49**, 8780 (1993).
- [22] G.M. Wysin, Phys. Rev. B **54**, 15156 (1996).
- [23] N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [24] P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
- [25] H.G. Evertz and D.P. Landau, Phys. Rev. B **54**, 12302 (1996).
- [26] L.P. Regnault, J.P. Boucher, J. Rossat-Mignod, R. Pynn, J.Y. Henry, and J.P. Renard, Physica B+C **136B**, 329 (1986).
- [27] M.T. Hutchings, P. Day, E. Janke, and R. Pinn, J. Magn. Magn. Mater. **54-57**, 673 (1986).
- [28] J. Villain, J. Phys. **35**, 27 (1974).
- [29] D.R. Nelson and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **16**, 4945 (1977).
- [30] J.E.R. Costa, B.V. Costa, and D.P. Landau, Phys. Rev. B **57**, 11510 (1998).

- [31] D.A. Dimitrov and G.M. Wysin, Phys. Rev. B **53**, 8539 (1996).
- [32] B.V. Costa, J.E.R. Costa, and D.P. Landau, J. Appl. Phys. **81**, 5746 (1997).
- [33] F.G. Mertens and A.R. Bishop, cond-mat/9903037 (1999).
- [34] B. Berche, A.I. Farinas-Sanches, Y. Holovatch, and R. Paredes, Eur. Phys. J. B **36**, 91 (2003).
- [35] S.A. Leonel, P.Z. Coura, A.R. Pereira, L.A.S. Mól, and B.V. Costa, Phys. Rev. B **67**, 104426 (2003).
- [36] G.M. Wysin, A.R. Pereira, I.A. Marques, S.A. Leonel, and P.Z. Coura, Phys. Rev. B **72**, 094418 (2005).
- [37] G.M. Wysin, Phys. Rev. B **68**, 184411 (2003).
- [38] G.M. Wysin, Phys. Rev. B **71**, 094423 (2005).
- [39] A.R. Pereira, L.A.S. Mól, S.A. Leonel, P.Z. Coura, and B.V. Costa, Phys. Rev. B **68**, 132409 (2003).
- [40] A.R. Pereira, S.A. Leonel, P.Z. Coura, and B.V. Costa, Phys. Rev. B **71**, 014403 (2005).
- [41] H. Kawamura and M. Kikuchi, Phys. Rev. B **47**, 1134 (1993).
- [42] G.M. Wysin and A. R. Bishop, Phys. Rev. B **42**, 810 (1990).
- [43] C. Kawabata, M. Takeuchi and A. R. Bishop, J. Magn. Magn. Mater. **54-57**, 871 (1986); J. Stat. Phys. **43**, 869 (1986).
- [44] A.R. Pereira, J. Magn. Magn. Mater. **279**, 396 (2004).
- [45] D.P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. B **24**, 1391 (1981).
- [46] H.J. Jensen and H. Weber, Phys. Rev. B **45**, 10468 (1992).
- [47] A.R. Pereira and A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **60**, 6226 (1999).

- [48] A.R. Pereira, F.O. Coelho and A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **54**, 6226 (1996).
- [49] L.A.S Mól, A.R. Pereira, W.A. Moura Melo, Phys. Rev.B **67**, 132403 (2003).
- [50] R.S. Silva and P.R.C. Guimarães, A.R. Pereira, Solid State Communication **134**, 313 (2005).