

LUCAS ALVARES DA SILVA MÓL

ESTUDO DE MATERIAIS MAGNÉTICOS DE BAIXA
DIMENSIONALIDADE DOPADOS COM IMPUREZAS NÃO
MAGNÉTICAS

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

2004

Aos meus pais,
Waldir Moacyr Perdigão Mól e
Maria Martha Alvares da Silva Mól,
meus amigos e familiares.

Agradecimentos

- Aos meus pais, Waldir e Maria Martha, pelo incentivo nesta jornada.
- Ao prof. Afranio Rodrigues Pereira, pela orientação, companherismo e incentivo.
- Aos profs. Antônio Sérgio, Winder, Sidney, Pablo, Bismarck e Sílvio pela ajuda nos trabalhos.
- Aos professores do departamento de Física da UFV por estes anos de aprendizado e convívio.
- Aos funcionários pelo belo serviço prestado e pelos papos nas horas de descanso.
- Aos colegas de curso pelo apoio e ajuda nos momentos mais difíceis.
- A todos meus amigos, tanto os que sempre estiveram em Viçosa quanto os que tiveram que partir, que por felicidade não cito nomes pois tomaria várias paginas.
- À Capes pelo apoio financeiro.

Conteúdo

Lista de Tabelas	vi
Lista de Figuras	vii
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
2 Considerações Gerais	3
2.1 Sistemas de Baixa Dimensionalidade	3
2.2 Sistemas Magnéticos Bidimensionais: O Modelo de Heisenberg	6
2.3 Excitações não Lineares	12
2.4 A Transição de Fase de Kosterlitz-Thouless	17
2.5 O Método de Monte Carlo	20
2.6 A Importância da Inclusão de Impurezas e/ou Defeitos nos Modelos Magnéticos	23
3 Interações Sóliton-Impureza em Antiferromagnetos 2D Isotrópicos	26
3.1 Interações Estáticas	26
3.2 Sólitons Oscilantes	34
4 Interações Vórtice-Impureza e sua Influência na Transição de Kosterlitz-Thouless em Ferromagnetos de Plano-Fácil	41
4.1 Resultados Analíticos	41
4.2 Simulações da Interação Vórtice-Impureza	47

4.3	Simulações de Monte Carlo para o Modelo do Rotor Planar	51
5	Conclusões	58
A	Desenvolvimento de Algumas Equações	60
A.1	Equações de Movimento	60
A.2	Energia de um vórtice não deformado	61
	Referências Bibliográficas	63
	Anexo: Trabalhos Publicados	66

Lista de Tabelas

2.1 Exemplos de materiais magnéticos 1D e 2D.	5
---	---

Lista de Figuras

2.1	Material magnético 1D.	4
2.2	Material magnético 2D.	5
2.3	Rede quadrada 2D.	7
2.4	Esquemática da anisotropia de eixo-fácil.	8
2.5	Formação de um sólton.	12
2.6	Configuração de um sólton.	13
2.7	Configuração de um vórtice.	14
2.8	Configuração de um antivórtice.	15
2.9	Configuração de um par vórtice-antivórtice.	16
3.1	Representação do potencial de impurezas.	28
3.2	Potencial efetivo de interação entre sólitons e impurezas para $\vec{r}_0 \neq 0$	31
3.3	Valores de $b(R)$ que minimizam a energia do sólton-I.	34
3.4	Energia dos sólitons-P e I em função do tamanho R	35
3.5	Frequências de oscilações de sólitons-P ou I em função do tamanho R	38
4.1	Vórtice deformado a um espaçamento de rede da impureza.	45
4.2	Vórtice deformado a 5 espaçamentos de rede da impureza.	46
4.3	Potencial efetivo de atração entre um vórtice e uma impureza.	47
4.4	Configuração inicial dos cálculos dinâmicos.	48
4.5	Configuração após 70 passos de tempo.	49
4.6	Configuração após 150 passos de tempo.	49
4.7	Potencial de "pinning" dos vórtices.	50
4.8	Configuração de um vórtice obtida por MC.	50
4.9	Configuração de um antivórtice obtida por MC.	51
4.10	Υ versus T com 5% de impurezas e $L = 30, 60$ e 80	54
4.11	Υ versus T para várias concentrações de impurezas em uma rede 60x60.	55
4.12	Temperatura crítica em função da concentração de impurezas para uma rede 60x60.	56
4.13	Υ versus T para uma rede 60x60 com impurezas aglomeradas.	57

Resumo

MÓL, Lucas Alvares da Silva, Universidade Federal de Viçosa, março, 2004. **Estudo de Materiais Magnéticos de Baixa Dimensionalidade Dopados com Impurezas não Magnéticas**. Orientador: Afranio Rodrigues Pereira. Conselheiros: Marcelo Lobato Martins e Ricardo Reis Cordeiro.

A presença de impurezas não magnéticas em materiais magnéticos com comportamento de baixa dimensionalidade pode alterar drasticamente suas propriedades. Por exemplo, a substituição dos íons magnéticos Cu^{2+} por íons não magnéticos, aumentam as correlações antiferromagnéticas em cupratos supercondutores. Neste trabalho, tratamos das interações entre impurezas não magnéticas e excitações topológicas, além de investigarmos alguns de seus efeitos nas propriedades do sistema. Encontramos as frequências características de possíveis oscilações de sólitons em torno de impurezas em antiferromagnetos isotrópicos. Já as interações impurezas-vórtices, em ferromagnetos planares, mostraram-se atrativas, o que leva a uma redução na temperatura de transição de fase de Kosterlitz-Thouless.

Abstract

MÓL, Lucas Alvares da Silva, Universidade Federal de Viçosa, march, 2004. **Study of Low Dimensional Magnetic Materials Doped with non Magnetic Impurities.** Adviser: Afranio Rodrigues Pereira. Committee members: Marcelo Lobato Martins and Ricardo Reis Cordeiro.

The presence of non-magnetic impurities in low-dimensional magnetic materials can drastically change their properties. For example, when Cu^{2+} ions was substituted by non-magnetic ones, antiferromagnetic correlations are enhanced in high- T_c cuprate superconductors. In this work, we deal with the interactions between non-magnetic impurities and topological excitations and also investigate some of their effects on the properties of the system. We found the characteristics frequencies of possible oscillatory motions of solitons around non-magnetic impurities in isotropic antiferromagnets. The impurity-vortex interaction, in planar ferromagnets, was found to be attractive, what led to a reduction of the Kosterlitz-Thouless phase transition temperature.

Capítulo 1

Introdução

Sistemas físicos em baixas dimensões despertam grande interesse da comunidade científica. Muitos destes sistemas apresentam características inesperadas tais como transições de fase de ordem topológica. A baixa dimensionalidade, em alguns destes, pode facilitar um tratamento teórico exato, o que permite estabelecer uma relação mais concisa com as experiências realizadas. Porém, mesmo com a redução da dimensionalidade, resultados exatos dificilmente são obtidos, levando-nos muitas vezes a utilizar métodos aproximados e/ou numéricos. Atualmente há uma grande variedade de sistemas que apresentam comportamento quase uni ou bidimensionais. Como exemplos podemos citar os supercondutores, filmes superfluidos de He^4 , cristais líquidos, materiais magnéticos etc. Entre estes, o magnetismo desperta grande interesse devido à variedade de materiais com características de baixa dimensionalidade e às possíveis aplicações tecnológicas em armazenagem e transmissão de dados.

Geralmente pode haver diferenças entre resultados teóricos e experimentais. Esta reside, muitas vezes, no fato de que a maioria dos modelos teóricos não incluem em sua formulação termos que levem em conta impurezas contidas nas amostras utilizadas pelos experimentais. A presença de impurezas deve-se principalmente às dificuldades encontradas na fabricação de amostras. Nos processos de crescimento de cristais por exemplo, a presença, algumas vezes indesejada, de átomos ou moléculas de elementos que não estão na constituição original deste cristal é constante. Os efeitos na estrutura e nas propriedades dos cristais causados por estes "defeitos" muitas vezes

não podem ser previstos pela teoria.

Por exemplo, qual seria o efeito causado em um ferromagneto de plano-fácil com uma determinada concentração de átomos não magnéticos? Será que este material vai apresentar uma transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless? Se apresentar, a temperatura crítica será afetada pela concentração destas impurezas? Estas perguntas devem ser respondidas e explicadas. Para tanto, a construção de modelos que possam prever este comportamento é de grande importância. A intenção deste trabalho reside exatamente em tentar responder algumas destas.

Os trabalhos que serão aqui discutidos, resultaram em quatro publicações em revistas científicas internacionais [1, 2, 3, 4]. Nestes trabalhos houve a colaboração dos professores Afranio Rodrigues Pereira [1, 2, 3, 4], Winder A. Moura-Melo [1], Antônio S. T. Pires [2], Sidiney A. Leonel [3, 4], Pablo Z. Coura [3, 4] e Bismarck Vaz da Costa [3, 4]. O ponto principal nestes trabalhos foi a consideração da presença de impurezas não magnéticas em modelos do tipo Heisenberg, com uma atenção especial na interação entre estas e excitações topológicas como vórtices e sólitons. Na Ref. [1], tratamos das possíveis oscilações de sólitons em torno de uma impureza não magnética em antiferromagnetos isotrópicos. Já nas Refs. [2, 3] as interações entre vórtices e impurezas no modelo XY foram consideradas. E na Ref. [4] foi considerada a influência de uma certa concentração de impurezas na transição de Kosterlitz-Thouless do modelo do Rotor Planar. O texto a seguir será basicamente uma releitura destes trabalhos, porém, de uma forma mais didática e completa. Ao leitor interessado em se aprofundar no assunto aconselhamos, além deste trabalho, a leitura das Ref. [1, 2, 3, 4].

O texto está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 iremos fazer uma revisão sobre sistemas magnéticos em baixas dimensões e das técnicas utilizadas no seu estudo. No capítulo 3 trataremos as interações entre sólitons e impurezas e algumas de suas conseqüências na dinâmica destes em antiferromagnetos isotrópicos [1]. No capítulo 4 o tema será as interações entre vórtices e impurezas [2, 3] no modelo XY ferromagnético, e a transição de Kosterlitz-Thouless [4] no modelo do Rotor Planar, também ferromagnético, com impurezas. E finalmente no capítulo 5 apresentamos as conclusões.

Capítulo 2

Considerações Gerais

2.1 Sistemas de Baixa Dimensionalidade

As propriedades magnéticas de materiais com momentos magnéticos localizados deve-se principalmente à interação de troca. Ao contrário do que se esperava, foi verificado que a interação dipolar não é suficiente para produzir ordenamento magnético à temperatura ambiente. Esta seria capaz de causar ordenamento apenas a baixíssimas temperaturas (poucos graus Kelvin), sendo então responsável pela formação de domínios magnéticos [5]. A interação de troca origina-se de efeitos quânticos, mais especificamente, à superposição de funções de onda e à repulsão coulombiana [5]. Sendo assim, esperamos que esta interação seja relevante apenas a pequenas distâncias, ou seja, que em uma rede cristalina apenas os íons magnéticos mais próximos contribuam significativamente para os efeitos magnéticos observados. Sabemos que, além da interação de troca, campos magnéticos internos, produzidos pela própria formação da rede cristalina, e externos podem fazer com que os spins tenham uma direção preferencial para apontarem, ou seja, o cristal passa a ter uma anisotropia. A existência de materiais com comportamento de baixa dimensionalidade deve-se então ao curto alcance da interação de troca. Este comportamento ocorre quando camadas ou cadeias de materiais magnéticos estão separadas por radicais orgânicos ou íons de metais alcalinos. Alguns exemplos de materiais com este comportamento serão dados e as características estruturais que levam a este será

analisada.

Como exemplos, podemos citar os compostos com estrutura ABX_3 que formam uma grande classe de magnetos unidimensionais, apresentando vários valores para a constante de acoplamento entre vizinhos próximos (interação de troca), para a constante de anisotropia interna e para o spin dos íons magnéticos. A figura 2.1 mostra

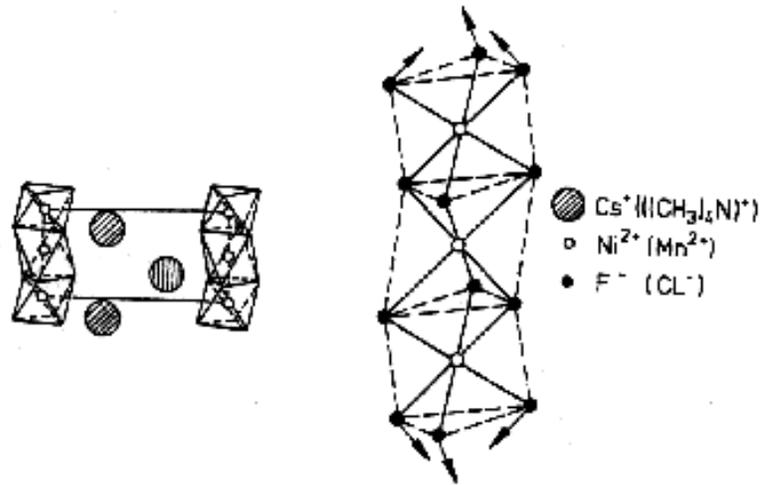


Figura 2.1: Exemplo de um material magnético 1D (TMMC). (M. Steiner and A. R. Bishop)

a estrutura geral desta classe de materiais. Nestes compostos, A representa Rb^+ , Cs^+ , $(\text{NH}_4)^+$ e $((\text{CH}_3)_4\text{H})^+$; B : (metais de transição) $^{2+}$; e X representa Cl^- , F^- e Br^- . A estrutura hexagonal destes compostos reflete suas características unidimensionais através das cadeias formadas pelo compartilhamento das faces dos octaedros (BX_6). A formação destas cadeias leva a uma interação de troca forte entre os íons metálicos (B). Como estas camadas estão relativamente distantes umas das outras, devido aos íons A , a interação intracadeias é mais forte que a interação intercadeias, o que leva estes materiais a exibirem características quase unidimensionais.

Podemos também aplicar as considerações acima a sistemas bidimensionais. Um exemplo de material com característica quase bidimensional é o *Tetrafluoreto de Níquel e Potássio* (K_2NiF_4), que está representado na figura 2.2. Neste material, os octaedros de (NiF_6) estão ligados em uma rede bidimensional dividindo vértices co-

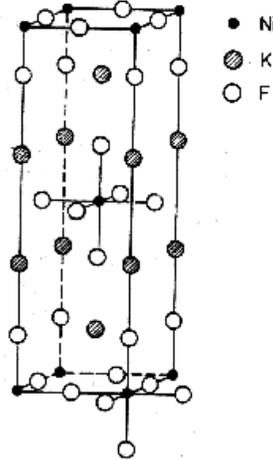


Figura 2.2: Exemplo de um material magnético 2D (K_2NiF_4). (M. Steiner and A. R. Bishop)

Cristais 1D		Cristais 2D	
Material	Spin(S)	Material	Spin(S)
$CuSO_4 \cdot 5H_2O$	1/2	K_2MnF_4	5/2
$CuCl_2 \cdot 2N \cdot C_5H_5$ (CPC)	1/2	K_2CuF_4	1/2
$\alpha - Cu.N.Sal$	1/2	K_2NiF_4	1
$CsNiCl_3$	1	Rb_2MnF_4	5/2
$CsNiF_3$	1	$BaCo_2(PO_4)_2$	1/2
$CsNiCl_3 \cdot 2H_2O$	5/2	$BaCo_2(AsO_4)_2$	1/2
$CH_3N.MnCl_3$ (TMMC)	5/2	$BaNi_2(PO_4)_2$	1

Tabela 2.1: Exemplos de materiais magnéticos uni e bidimensionais com seus respectivos valores de spin.

mun. Neste caso, dois efeitos diminuem a interação entre planos: primeiro, a camada de potássio (K) afasta as camadas magnéticas (Ni) umas das outras; e segundo, a camada que contém o íon de níquel no centro da célula está efetivamente desacoplada das camadas inferior e superior, porque, sendo as camadas antiferromagnéticas, elas se anulam em primeira ordem.

Na tabela 2.1 estão alguns exemplos de materiais magnéticos com comportamento quase uni ou bidimensionais com seus respectivos valores de spin.

2.2 Sistemas Magnéticos Bidimensionais: O Modelo de Heisenberg

As propriedades dos materiais magnéticos são completamente especificadas pelas leis da mecânica quântica. Porém, o tratamento de um sistema macroscópico real contendo milhões de partículas torna-se inviável através destas. Assim, simplificações se tornam essenciais no estudo destes sistemas. Pode-se mostrar que a interação de troca, a principal responsável pelas propriedades magnéticas dos materiais com momentos magnéticos localizados, leva a uma interação do tipo $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, onde \vec{S}_i é o spin do íon localizado no sítio i . Como uma extensão desta interação temos o modelo de Heisenberg, que é definido pela seguinte hamiltoniana:

$$H = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.1)$$

onde o somatório é tomado sobre os vizinhos mais próximos, $J > 0$ é a constante de acoplamento entre vizinhos próximos e impomos o vínculo não linear $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 1$. Argumentos para a forma da interação e do modelo podem ser obtidos nas Refs. [5, 6]. O sinal positivo na hamiltoniana representa um acoplamento antiferromagnético, uma vez que a energia mínima do estado fundamental é atingida quando os spins se alinham antiparalelamente ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$). Pelo mesmo raciocínio percebemos que, com o sinal negativo, temos um acoplamento ferromagnético.

Podemos introduzir neste modelo um termo para levar em consideração a presença de anisotropias (existência de uma direção preferencial para os spins apontarem). Neste caso, a hamiltoniana 2.1 para um ferromagneto fica da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z). \quad (2.2)$$

Através da Eq. (2.2) os seguintes modelos são definidos:

- Quando $\lambda = 0$ temos o modelo de Heisenberg isotrópico, definido pela hamiltoniana 2.1 que é caracterizado por não haver neste nenhuma direção preferencial

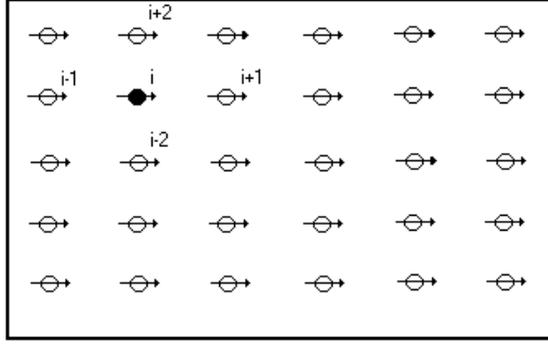


Figura 2.3: Rede quadrada 2D ferromagnética com interação entre primeiros vizinhos.

para os spins apontarem.

- Quando $\lambda = 1$ a hamiltoniana é a seguinte:

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

Neste caso pode-se obter dois modelos distintos. No modelo XY o vínculo é $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 1$, ou seja, há as três componentes de spin. Já no modelo do Rotor Planar o vínculo é $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 = 1$, ou seja, não há a terceira componente de spin e portanto os spins estão confinados no plano.

- Para $0 < \lambda < 1$, temos o modelo de Heisenberg de plano-fácil, que é caracterizado pela preferência dos spins se alinharem paralelamente ao plano como esquematizado na figura 2.3. A hamiltoniana neste caso é dada pela Eq. (2.2).
- Para $\lambda < 0$, temos o modelo de Heisenberg de eixo-fácil, que é caracterizado pela preferência dos spins se alinharem perpendicularmente ao plano (direção z) como esquematizado na figura 2.4. Novamente a hamiltoniana é a da Eq. (2.2).

Nestes modelos a interação com um campo magnético externo pode ser introduzida através de um termo proporcional a $\sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i$. Vale ressaltar que a dinâmica dos spins é obtida através da equação quântica de movimento:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\vec{S}, H], \quad (2.4)$$

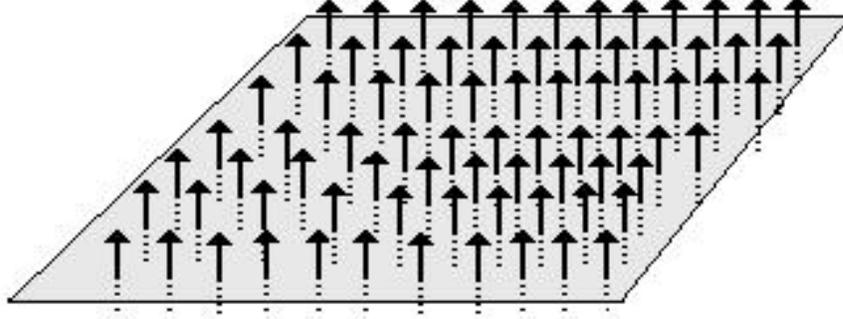


Figura 2.4: Representação de um sistema ferromagnético de eixo-fácil.

onde H é o hamiltoniano do modelo em questão, \hbar é a constante de Planck e $[\vec{S}, H] = \vec{S}H - H\vec{S}$ é o comutador de \vec{S} e H . Lembrando que a relação de comutação entre os operadores de spin S^x , S^y e S^z é dada por $[S^\alpha, S^\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}S^\gamma$, onde $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}$ é igual a 1 se α , β e γ forem cíclicos e -1 caso contrário. Percebemos então que no modelo do Rotor Planar não há dinâmica, uma vez que como não existe a componente S^z , $\frac{d\vec{S}}{dt} = 0$ ($[S^x, S^y] = 0$).

Sistemas macroscópicos são geralmente constituídos por cerca de 10^{23} partículas. Sendo assim, seu tratamento matemático, mesmo através dos modelos propostos acima, não é fácil. Geralmente, recorre-se ao tratamento destes e outros modelos através de técnicas aproximadas, como a aproximação de campo médio [7], aproximação harmônica auto-consistente (SCHA) [8, 9, 10, 11], métodos computacionais como o método de Monte Carlo [3, 4, 8, 12], entre outras. Podemos também tratar estes modelos de uma forma analítica através de uma teoria de campo que os reproduza [13, 14, 15]. O uso de uma teoria de campo justifica-se, já que esta descreve um sistema com infinitos graus de liberdade, e em um sistema composto por cerca de 10^{23} partículas podemos considerar infinitos graus de liberdade em uma primeira aproximação. Outra aproximação possível é tratar os modelos considerando-se que os sítios da rede são compostos por spins com elevados números quânticos ($5/2$ por exemplo). Desta forma podemos desconsiderar o princípio da incerteza, ou seja, assumimos que podemos conhecer as três componentes de spin simultaneamente. Os sistemas onde esta última aproximação se aplica são comumente referidos como sistemas clássicos

de spin, e serão estes o foco deste trabalho.

Uma forma de se obter uma teoria de campo correspondente a estes modelos é considerar o limite contínuo. Isto é feito assumindo-se que o espaçamento de rede (distância entre dois sítios em uma rede quadrada) é desprezível, e considerar que a direção de spins vizinhos varia lentamente. Isto corresponde a analisar a região de grandes comprimentos de onda e baixas energias destes sistemas, sendo aplicados portanto à faixa de baixas temperaturas. Vamos agora obter o limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico. Partindo de sua hamiltoniana, Eq. (2.1), vamos considerar o spin no sítio i interagindo com os spins $i + 1$, no sítio à direita, $i - 1$ no sítio à esquerda, $i + 2$ no sítio acima e $i - 2$ no sítio abaixo, em uma rede quadrada, como representado na figura 2.3. Definindo

$$T^\alpha = S_i^\alpha(S_{i+1}^\alpha + S_{i-1}^\alpha) + S_i^\alpha(S_{i+2}^\alpha + S_{i-2}^\alpha), \quad (2.5)$$

onde $\alpha = x, y, z$, podemos, em uma aproximação contínua, escrever:

$$S_{i+1}^\alpha = S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \dots, \quad (2.6)$$

$$S_{i-1}^\alpha = S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} - \dots, \quad (2.7)$$

$$S_{i+2}^\alpha = S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} + \dots, \quad (2.8)$$

$$S_{i-2}^\alpha = S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} - \dots, \quad (2.9)$$

onde a é o espaçamento de rede. Temos então que:

$$T^\alpha = 2S_i^\alpha S_i^\alpha + a^2 \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} S_i^\alpha + 2S_i^\alpha S_i^\alpha + a^2 \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} S_i^\alpha + \dots \quad (2.10)$$

$$\frac{T^\alpha}{2} = 2(S_i^\alpha)^2 + \frac{a^2}{2} \left[\frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} \right] S_i^\alpha. \quad (2.11)$$

Agora, considerando as três componentes de spin, (T^x , T^y e T^z) e substituindo a soma

na Eq. (2.1) por $\int \int \frac{dxdy}{a^2} = \int \frac{d^2r}{a^2}$, temos:

$$\begin{aligned} H &= -2J \int ((S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2) \frac{d^2r}{a^2} - \frac{Ja^2}{2} \int \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial y^2} \right] S^\alpha \frac{d^2r}{a^2} \\ &= -2J \int \vec{S}^2 \frac{d^2r}{a^2} - \frac{Ja^2}{2} \int \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial y^2} \right] S^\alpha \frac{d^2r}{a^2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde $S^1 = S^x$, $S^2 = S^y$ e $S^3 = S^z$. O índice i foi omitido pois qualquer sítio pode agora ser considerado, e sendo assim, dividimos o resultado acima por 2, já que cada par de sítios ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$) foi contado duas vezes. Integrando os termos da última integral por partes, temos:

$$\int dy \frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial y^2} S^\alpha = - \int \left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial y} \right)^2 dy. \quad (2.13)$$

O termo $-2J \int \vec{S}^2 \frac{d^2r}{a^2}$, que é a energia do estado fundamental do sistema, é infinito para uma rede infinita, uma vez que estamos impondo o vínculo não linear $\vec{S}^2 = |\vec{S}| = 1$, e deve ser subtraído da hamiltoniana original. Assim, obtemos:

$$H = \frac{J}{2} \int \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial y} \right)^2 \right] d^2r, \quad (2.14)$$

que pode ser reescrito da seguinte forma:

$$H = \frac{J}{2} \int (\partial_\mu \vec{S}) \cdot (\partial^\mu \vec{S}) d^2r, \quad \mu = 1, 2, \quad (2.15)$$

onde $\partial_1 = \frac{\partial}{\partial x}$ e $\partial_2 = \frac{\partial}{\partial y}$. Este é um conhecido modelo de teoria de campos, o modelo $O(3)$ não linear, ou modelo σ não linear. Este modelo desperta grande interesse nos teóricos de partículas devido à sua grande analogia à teoria de Yang-Mills em quatro dimensões.

Do mesmo modo feito anteriormente, podemos obter o limite contínuo dos outros modelos citados. Em especial para o modelo XY, chegamos a:

$$H_{XY} = \frac{J}{2} \int \left\{ \sum_{\alpha=1}^2 \left[\left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{4}{a^2} (S^z)^2 \right\} d^2r. \quad (2.16)$$

Agora, parametrizando o spin por dois campos escalares, m e ϕ , como $\vec{S} = (\sqrt{1 - m^2} \cos \phi, \sqrt{1 - m^2} \sin \phi, m^2)$, obtemos:

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

onde $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y}$.

Para obtermos as equações de movimento para os campos m e ϕ , partimos da equação de movimento quântica

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

onde h é a densidade hamiltoniana dada por:

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

Tomando o limite clássico, ou seja, fazendo $\vec{S} \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$ e $\hbar\vec{S} \rightarrow cte$, temos[16]:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = -\vec{S} \times \frac{\delta h}{\delta \vec{S}}, \quad (2.20)$$

onde $\frac{\delta h}{\delta \vec{S}}$ é a derivada funcional de h . Assim, as equações de movimento se reduzem a[16]:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} = -\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla}\phi} \right] + \frac{\partial h}{\partial \phi}, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta h}{\delta m} = \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla}m} \right] - \frac{\partial h}{\partial m}, \quad (2.22)$$

onde as variáveis m e ϕ constituem um par de variáveis canonicamente conjugadas. Podemos agora escrever as equações de movimento para estes campos escalares (vide apêndice A.1):

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1 - m^2)\nabla^2\phi - 2m\vec{\nabla}m \cdot \vec{\nabla}\phi, \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\nabla^2 m}{(1 - m^2)} - \nabla^2 m + \frac{m(\vec{\nabla}\theta)^2}{(1 - m^2)^2} + m(\vec{\nabla}\phi)^2 + \frac{4m}{a^2}. \quad (2.24)$$

Estas equações, juntamente com a hamiltoniana 2.17 constituem uma teoria de campos escalares (m, ϕ) correspondente ao modelo XY.

Este desenvolvimeto foi realizado considerando-se o caso ferromagnético. Para tratarmos o caso antiferromagnético, devemos substituir o campo de spins \vec{S} pelo vetor de Néel definido como $\vec{n} = \frac{1}{2}(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$, onde os sub-índices referem-se a sub-redes diferentes. Este vetor representa a magnetização de sub-rede, que no limite de baixas temperaturas e campos externos fracos representa o campo de spins [17].

2.3 Excitações não Lineares

Alguns dos modelos descritos anteriormente, apresentam como soluções devido a sua baixa dimensionalidade e não linearidade, excitações topológicas não lineares. Algumas destas comportam-se como pseudo-partículas, e têm grande relevância nas propriedades dinâmicas e estáticas dos sistemas [19, 20, 21]. Como exemplo, podemos citar o modelo de Heisenberg isotrópico descrito pela hamiltoniana 2.1. Neste modelo, Belavin e Polyakov em um trabalho muito interessante [18], obtiveram usando argumentos topológicos, soluções estáticas de energia finita denominadas *Sólitons*. A idéia central utilizada para obter este tipo de excitação foi procurar por configurações nas quais os spins estejam alinhados no infinito. Isto foi conseguido através do mapeamento estereográfico do espaço interno dos spins (esfera de spins) no espaço físico real (plano bidimensional), como representado na figura 2.5. Neste caso, teríamos

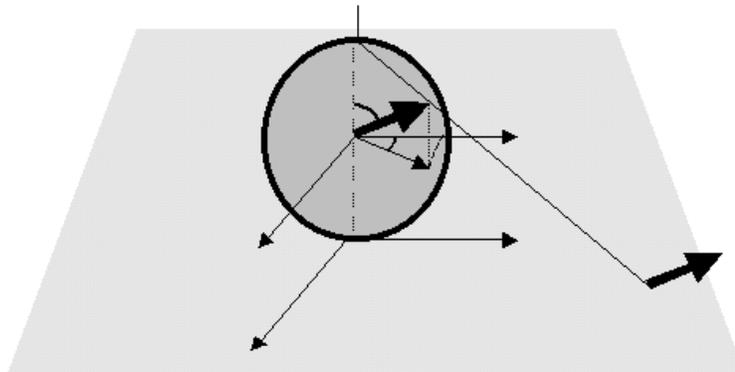


Figura 2.5: Mapeamento do espaço dos spins (esfera de spins) no espaço físico (plano 2D).

uma configuração na qual os spins no infinito apontam para cima enquanto o spin localizado na origem aponta para baixo, como representado na figura 2.6. O mapea-

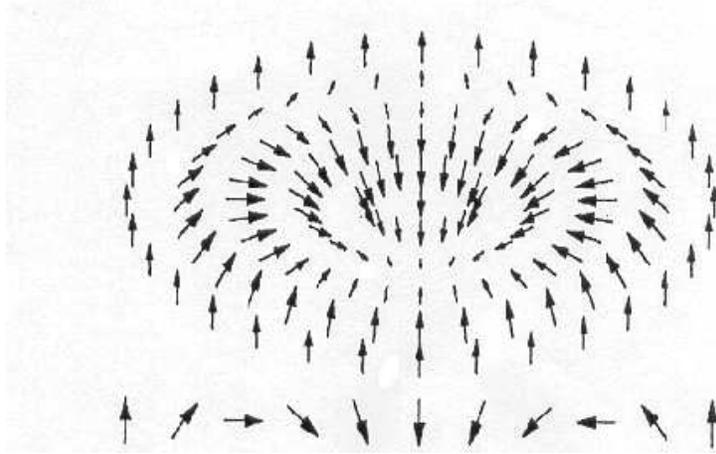


Figura 2.6: Sóliton com carga topológica $Q = 1$.

mento caracteriza uma carga topológica Q que indica quantas vezes a esfera de spins é coberta pelo plano físico. Já a distância ao centro do sóliton na qual os spins estão paralelos ao plano, caracteriza o seu tamanho (R). Matematicamente, um sóliton com carga topológica $Q = 1$ na origem do plano é representado, quando os spins são parametrizados pelos campos m e ϕ , por:

$$m = \frac{r^2 - R^2}{r^2 + R^2}, \quad \phi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad (2.25)$$

onde R é o tamanho do sóliton e $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a distância de um ponto qualquer do plano ao centro do sóliton. Pode-se mostrar que esta estrutura tem energia finita, igual a $4\pi JS^2$, que não depende do tamanho do sóliton devido à invariância de escala do modelo.

Nos modelos de plano-fácil, as excitações topológicas que surgem são denominadas *vórtices*. Os vórtices, apesar de não terem energia finita como os sólitons, contribuem significativamente para as propriedades dos sistemas, sendo inclusive responsáveis por uma transição de fase, a transição de fase de Kosterlitz-Thouless [22]. Além disso acredita-se que estes são responsáveis pelo pico central na função correlação dinâmica [19, 13, 23, 24], observado em simulações de Monte Carlo [25, 26]

e experimentos [27]. Iremos agora obter as soluções vórtice e suas principais propriedades.

Os vórtices representam um mínimo local da energia do sistema. Configurações do tipo vórtice mais simples possíveis são os vórtices planares. Tais estruturas surgem no sistema quando a anisotropia é grande suficiente para provocar um confinamento dos spins ao plano [28, 29]. Por simplicidade, para obter as soluções vórtices planares, consideraremos o modelo do Rotor Planar, definido pela hamiltoniana 2.3. Considerando uma rede quadrada bidimensional, podemos perceber que um mínimo da energia pode ser obtido se em alguns sítios da rede, pelo menos parte dos vizinhos mais próximos estejam perpendiculares ao spin do sítio em questão, e que a partir deste sítio, os spins vizinhos passem a variar lentamente de forma a minimizar a energia do sistema. Pensaremos então na configuração mostrada na figura 2.7. Esta

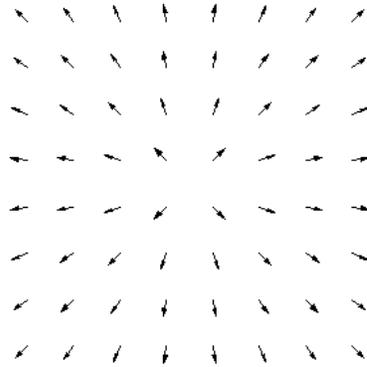


Figura 2.7: Vórtice com carga topológica $Q = 1$.

é a configuração de um vórtice com carga topológica $Q = 1$ centrado no ponto O . Uma forma de definir um vórtice é através de uma configuração na qual a soma da diferença entre os ângulos formados pelos spins vizinhos (a uma mesma distância do centro do vórtice) com um eixo arbitrário, seja um múltiplo inteiro de 2π . Em um modelo contínuo poderíamos sintetizar a definição acima escrevendo:

$$\oint \vec{\nabla} \phi \cdot d\vec{l} = 2\pi Q, \quad (Q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (2.26)$$

onde o campo escalar ϕ representa o ângulo que o spin faz com um eixo arbitrário e

Q é a carga topológica do vórtice. Podemos obter, da mesma forma que foi feito para o modelo XY, a versão contínua do modelo do Rotor Planar. Neste caso obtemos:

$$H = \frac{J}{2} \int (\vec{\nabla}\phi)^2 d^2r, \quad (2.27)$$

com a respectiva equação de movimento:

$$\nabla^2\phi = 0. \quad (2.28)$$

Foi mostrado por Kosterlitz-Thouless [22] que a equação 2.26 é solução da equação de movimento do modelo do Rotor Planar (Eq. (2.28)). Podemos mostrar que a configuração $\phi = \arctan(y/x)$ satisfaz as equações 2.28 e 2.26 com $Q = 1$, sendo esta, uma forma de representarmos um vórtice com carga topológica $Q = 1$ na origem do sistema de coordenadas. Um vórtice com carga topológica $Q = -1$ é representado por $\phi = -\arctan(y/x)$, e usualmente chamado de antivórtice. A configuração de um antivórtice está representada na figura 2.8.

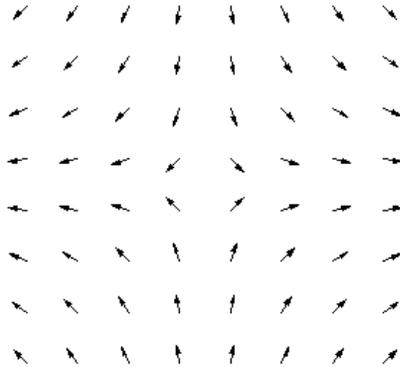


Figura 2.8: Antivórtice (vórtice com carga topológica $Q = -1$).

A energia de um vórtice planar pode ser facilmente obtida, no limite contínuo, através da equação 2.27, com $\phi = \arctan(y/x) = \varphi$, e é a mesma para o antivórtice, sendo dada por:

$$E \simeq \pi J \ln(d/a_0), \quad (2.29)$$

onde d é a dimensão linear do sistema (tamanho da rede), e $a_0 = 0.24a$ é um corte

introduzido na rede, já que no limite contínuo o vórtice é uma solução singular da equação de Laplace (a é o espaçamento de rede). Este valor mais apropriado ¹ para o corte na rede foi obtido numericamente na Ref. [30].

Kosterlitz e Thouless [22] mostraram também que os sistemas descritos pela mesma classe de universalidade do modelo do Rotor Planar apresentam ordem topológica, de forma que a carga topológica do sistema deve se conservar. Sendo assim, os vórtices surgem no sistema em pares vórtice-antivórtice. A configuração do par vórtice-antivórtice está esquematizada na figura 2.9, e no limite contínuo é representada por:

$$\phi = \arctan\left(\frac{y - y_0}{x - x_0}\right) - \arctan\left(\frac{y + y_0}{x + x_0}\right), \quad (2.30)$$

onde o vórtice está centrado no ponto (x_0, y_0) , e o antivórtice no ponto $(-x_0, -y_0)$. Apesar do par vórtice ser a soma de duas soluções distintas da equação de movimento, esta configuração também representa uma solução da equação de movimento.

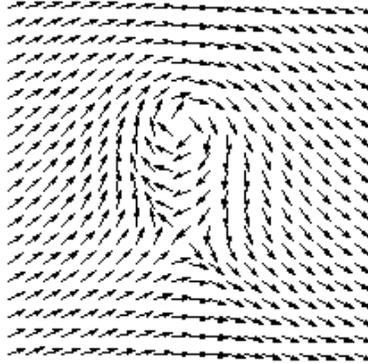


Figura 2.9: Par vórtice-antivórtice com carga topológica total $Q = 0$.

Pode-se, da mesma maneira que é feita para um vórtice, calcular a energia correspondente a um par vórtice-antivórtice. Neste caso, obtêm-se:

$$E = \pi^2 J + 2\pi J \ln(R/a_0), \quad (2.31)$$

onde R é a distância entre o centro do vórtice e o centro do antivórtice. Ao contrário

¹Geralmente utiliza-se o próprio espaçamento de rede a como corte no cálculo da energia do vórtice

dos vórtices livres, percebemos que os pares vórtice-antivórtice têm energia finita, uma vez que a distância entre o vórtice e o antivórtice (R) é finita, e geralmente corresponde a poucos espaçamentos de rede.

2.4 A Transição de Fase de Kosterlitz-Thouless

Vamos agora fazer uma breve discussão sobre as características das transições de fase em sistemas bidimensionais de plano-fácil. É sabido, que sistemas com este tipo de anisotropia, ao contrário de sistemas de eixo-fácil, não apresentam ordem de longo alcance (OLA). A quebra da ordem de longo alcance do sistema deve-se à presença de ondas de spin. Além disso, em um teorema rigoroso, Mermin e Wagner em 1966 [31] mostraram que simetrias globais contínuas (como a apresentada pelos modelos de plano-fácil) não se quebram espontaneamente. Por estes fatos esperamos que estes sistemas não apresentem uma transição de fase de segunda ordem convencional, entre uma fase magnetizada e uma não magnetizada, com esta ocorrendo em uma temperatura crítica T_c .

Apesar dos fatos expostos acima, certas evidências mostravam que deveria haver algum tipo de transição de fase nestes sistemas. Para evidenciar isso iremos analisar o modelo do Rotor Planar. Vamos verificar o comportamento da função correlação spin-spin para este modelo, que é dada por:

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(n) \rangle = \langle \exp[i(\phi_0 - \phi_n)] \rangle. \quad (2.32)$$

Primeiramente, iremos estimar a função correlação spin-spin, utilizando uma expansão em temperaturas altas (ver Ref. [32]). Pode-se mostrar que o primeiro termo diferente de zero contribuindo para a expansão de alta-temperatura da função correlação é da ordem de $(J/k_B T)^{|n|}$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Sendo assim:

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(n) \rangle \simeq (J/k_B T)^{|n|} = \exp[-|n| \ln(k_B T/J)]. \quad (2.33)$$

Percebemos, da equação anterior, que a função correlação spin-spin cai exponencial-

mente com a distância entre os spins, n , no regime de altas temperaturas.

Para analisarmos o regime de baixas temperaturas, ressaltamos a seguinte característica nesta faixa de temperaturas: na falta de grandes flutuações térmicas, esperamos que ϕ varie lenta e suavemente. Desta forma, apenas configurações nas quais os spins adjacentes estejam aproximadamente alinhados contribuirão significativamente para a função de partição do sistema. Portanto, para fazermos uma estimativa da função correlação spin-spin, consideraremos a hamiltoniana do modelo Rotor Planar escrita da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j). \quad (2.34)$$

A partir desta hamiltoniana, consideraremos uma expansão do co-seno apenas em segunda ordem, considerando assim apenas as pequenas variações na direção dos spins:

$$H \approx \frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2, \quad (2.35)$$

e desta forma a função correlação pode ser facilmente analisada, uma vez que envolve apenas integrais Gaussianas. Obtem-se, desta forma, o seguinte resultado:

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(n) \rangle \simeq \left(\frac{1}{|n|} \right)^{K_B T / 2\pi J}. \quad (2.36)$$

Sendo a magnetização espontânea dada por $M = [\lim_{|n| \rightarrow \infty} \langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(n) \rangle]^{1/2}$, percebemos que este sistema não apresenta magnetização espontânea em nenhuma temperatura diferente de zero. Além disso, vemos que a função correlação comporta-se de maneiras diferentes nos regimes de baixas e altas temperaturas. Isto nos indica que deve haver uma transição de fase. De fato, para T suficientemente pequeno, a Eq. (2.36) nos mostra que a teoria tem uma linha de pontos críticos. Para ver isto, lembramos que na temperatura crítica de um sistema a função correlação spin-spin deve se comportar como

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(n) \rangle \sim \left(\frac{1}{|n|} \right)^\eta, \quad (2.37)$$

onde η é um expoente crítico padrão. Esta linha de pontos críticos implica em uma violação do mais simples critério de universalidade.

Neste ponto, esperamos que o modelo do Rotor Planar apresente duas fases. Porém, sabemos que não há uma fase magnetizada, não podendo assim haver uma transição entre uma fase magnetizada e outra não magnetizada. Uma interessante proposta para a transição de fase que ocorre neste sistema foi dada por Kosterlitz e Thouless em um trabalho de grande relevância [22]. Neste trabalho, os autores argumentam que vórtices só aparecem ligados em pares. Como já foi discutido na seção anterior, os pares vórtices têm energia finita, e como a carga topológica deve se manter, essa é a maneira encontrada para que eles apareçam no sistema. Eles são criados devido a flutuações térmicas, sendo $R \approx a$, e portanto a energia de criação da ordem de $\pi^2 J$. Porém com o aumento da temperatura, os pares começam a crescer, sendo que em uma temperatura crítica (T_{KT}) eles se separam. A transição de fase é caracterizada, portanto, pela separação dos pares vórtice em vórtices livres. Para argumentar esta transição verifiquemos a energia livre da configuração vórtice dada por:

$$F = E - Ts, \quad (2.38)$$

onde s é a entropia do vórtice livre. Como um vórtice é completamente especificado pela localização do seu centro, a entropia é exatamente o logaritmo da multiplicidade da configuração, ou seja, o logaritmo do número de sítios da rede,

$$s = k_B \ln \left(\frac{d}{a} \right)^2 = 2k_B \ln \left(\frac{d}{a} \right). \quad (2.39)$$

Ao lembrarmos da energia de um vórtice livre (Eq. (2.29)), percebemos que a entropia varia da mesma forma. Há portanto uma temperatura na qual a energia livre muda de sinal. Esta temperatura caracteriza a transição de fase do sistema. Em baixas temperaturas a probabilidade de um vórtice livre aparecer é pequena, uma vez que o termo de energia, ou melhor, a ordem do sistema, domina a energia livre. Porém com o aumento da temperatura o termo de entropia, ou desordem, passa a dominar, possibilitando assim a presença de vórtices livres. A temperatura na qual ocorre esta

mudança de comportamento pode ser estimada como sendo:

$$T_{KT} = \frac{\pi J}{2k_B}. \quad (2.40)$$

2.5 O Método de Monte Carlo

Iremos agora fazer uma breve revisão do método de Monte Carlo. Este é talvez o método numérico mais utilizado em física estatística e física da matéria condensada. Sua aplicabilidade se estende desde o estudo de decaimentos radioativos à simulação de sistemas biológicos, passando por inúmeras áreas da física. Simulações utilizando o método de Monte Carlo servem, atualmente, como uma espécie de laboratório para testar métodos analíticos aproximados quando não há uma experiência real para tal fim. A idéia básica deste método é a de percorrer o espaço amostral do sistema considerando-se apenas as configurações mais relevantes. Geralmente, recorre-se à utilização de números aleatórios para escolher tais configurações, daí o nome Monte Carlo (em referência ao cassino de Monte Carlo). Nos sistemas estudados por este método, o caminho percorrido pelo sistema no espaço de fase não é o mesmo em duas simulações distintas, porém os resultados obtidos, os valores esperados das grandezas físicas, são os mesmos. Há vários algoritmos que podemos considerar [33, 34]. Entre estes destaca-se o de Metropolis [33]. Iremos por razões didáticas explicar o método para o modelo de Ising em duas dimensões e posteriormente iremos generaliza-lo para considerar modelos clássicos de spin como o modelo de Heisenberg.

O modelo de Ising geralmente é utilizado como modelo introdutório ao método de Monte Carlo pois apresenta solução exata em duas dimensões, e é um modelo relativamente simples. Este modelo é definido pela seguinte hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.41)$$

onde a soma é feita sobre vizinhos próximos e $\sigma_i = \pm 1$. Quando estudamos este modelo, estamos interessados em propriedades termodinâmicas como magnetização, susceptibilidade, calor específico, etc. Em mecânica estatística a forma de se obter

estas informações é através dos valores esperados. Para uma grandeza A qualquer, o valor esperado pode ser calculado da seguinte forma [7]:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_c A(c) \exp[-\beta H(c)]}{Z}, \quad (2.42)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, H é a hamiltoniana do sistema em questão, Z é a função de partição definida por $Z = \sum_c \exp[-\beta H]$, e as somas são realizadas sobre todas as configurações microscópicas possíveis do sistema. Em cálculos analíticos, o que devemos fazer é calcular a função de partição. Porém na maioria dos casos este cálculo não pode ser feito. Já para um tratamento numérico, devemos conhecer todos os 2^N estados do sistema (no caso do modelo de Ising em uma rede quadrada com N sítios). Para N grande este cálculo torna-se inviável. A idéia central do método de Monte Carlo reside, exatamente, em ao invés de utilizar todas as configurações possíveis para o sistema, utilizar apenas as mais relevantes em cada temperatura, e calcular as médias através de uma média aritmética simples, ou seja:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^M A_i}{M}, \quad (2.43)$$

onde são usadas M configurações diferentes. Obviamente, para que o processo acima leve a resultados satisfatórios, devemos fazer uma escolha adequada das configurações a serem utilizadas. Isto é conseguido quando geramos uma cadeia de Markov, onde novos estados são gerados diretamente dos estados anteriores obedecendo às regras de balanceamento detalhado. O papel do algoritmo de Metropolis é exatamente gerar esta cadeia. Este algoritmo, aplicado ao modelo de Ising, pode ser sintetizado nos seguintes passos:

1. Escolher uma configuração inicial para o sistema (aleatória, por exemplo).
2. Escolher um sítio.
3. Calcular a diferença de energia do sistema (ΔE) se o spin do sítio escolhido tiver seu sinal trocado ($\Delta E = E(-\sigma_i) - E(\sigma_i)$).

4. Gerar um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1.
5. Calcular $\exp(-\Delta E/k_B T)$ e comparar com o número aleatório escolhido.
 - (a) Se o número aleatório for menor que $\exp(-\Delta E/k_B T)$ deve-se trocar o sinal do spin.
 - (b) Caso contrário manter a configuração inalterada.
6. Escolher um novo sítio e repetir o procedimento.

Geralmente o que se faz é percorrer todos os sítios da rede, em sequência, aplicando o procedimento descrito acima. Isto corresponde a 1 passo de Monte Carlo (MCS). Após vários passos, o sistema que inicialmente não se encontrava em uma configuração de equilíbrio, atinge uma e é a partir desta que as médias começam a ser calculadas. Para verificarmos quando o sistema atingiu o equilíbrio acompanhamos a evolução de algumas grandezas como energia e magnetização em função do número de passos de Monte Carlo, e somente após estas grandezas atingirem um valor médio praticamente constante que começamos a calcular as médias termodinâmicas de acordo com a Eq. (2.43).

O algoritmo de Metropolis, como exposto acima, aplica-se ao modelo de Ising. Porém, neste trabalho, estamos interessados em modelos clássicos de spin como o modelo de Heisenberg. Para que possamos utilizar o método para este tipo de sistema, o que devemos fazer é: ao invés de mudarmos o sinal do spin do sítio escolhido (passo 3), devemos escolher uma nova direção para este (uma direção aleatória), e no passo 5, ao invés de trocar o sinal do spin do sítio, devemos mudar a direção deste para a escolhida no passo 3. Por exemplo, para modelos onde o spin têm três componentes, a escolha da nova direção do spin é feita da seguinte forma:

1. Escolha $S_z = 1.0 - 2.0 * r$,
2. calcule $\phi = 2\pi * r$ e então $S_x = \sqrt{1 - S_z^2} \cos \phi$ e $S_y = \sqrt{1 - S_z^2} \sin \phi$,

onde os r 's são números aleatórios no intervalo entre 0 e 1.

2.6 A Importância da Inclusão de Impurezas e/ou Defeitos nos Modelos Magnéticos

Muitos sistemas estão relacionados ao modelo XY e ao modelo do Rotor Planar. Como exemplos podemos citar os cristais 2D, superfluidos e supercondutores. A relação com estes modelos está na descrição destes. Geralmente a descrição é feita pela função de onda complexa $\psi = \rho e^{i\phi}$, que tem dois graus de liberdade (ρ e ϕ), e assim, em duas dimensões, não possuem ordem de longo alcance. Mas, estes sistemas possuem ordem topológica, e assim como foi exposto para o modelo do Rotor Planar, apresentam uma transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless.

Vamos considerar supercondutores granulares que se baseiam no conhecido efeito Josephson [35]. Josephson mostrou em seu trabalho [35] que se dois pedaços supercondutores estiverem separados por um isolante muito fino, pares de Cooper tunelariam entre estes supercondutores. Esta é a conhecida Junção Josephson. Nesta junção, o tunelamento implica em um grande correlacionamento entre as fases das funções de onda dos dois supercondutores. O correlacionamento se deve à densidade de corrente entre a junção que é dada por:

$$J = J_1 \sin(\phi_2 - \phi_1), \quad (2.44)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as fases das funções de onda ψ_1 e ψ_2 dos supercondutores 1 e 2 respectivamente.

Para obtermos um sistema supercondutor granular bidimensional, a idéia central é que grãos supercondutores devem ser dispostos sobre um substrato isolante, formando uma rede bidimensional onde cada grão ocupa um sítio da rede. Esta rede pode ter várias geometrias, formando redes quadradas, triangulares, hexagonais, etc. O que nos leva a fazer uma analogia entre este sistema e o modelo do Rotor Planar é que o número de pares de Cooper contidos em um grão (N) e a fase da função de onda deste (ϕ) constituem um par de variáveis canonicamente conjugadas. Neste sentido,

obedecem à relação de incerteza

$$\Delta N \Delta \phi \geq 1. \quad (2.45)$$

Como em um grão o número de pares de Cooper é muito grande, e como espera-se que neste sistema seja estabelecida uma corrente, pares de Cooper tunelariam entre grãos vizinhos. Desta forma, a incerteza no número de pares de Cooper em um grão é muito grande, levando a uma incerteza pequena na fase da função de onda. Assim, podemos considerar que a fase da função de onda é uma variável semi-clássica. Como a fase pode ser representada por uma seta, assim como um spin clássico, a analogia entre este sistema e o modelo do Rotor Planar é imediata. Portanto, este sistema contém vórtices na fase da função de onda, apresentando uma transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless em uma temperatura menor que a transição de fase entre uma fase supercondutora e outra não supercondutora, que ocorre em cada grão da rede.

Existem várias técnicas para a produção de supercondutores granulares. Porém, a precisão destas técnicas não é muito grande, o que provoca vários tipos de defeitos na rede. Os defeitos mais comuns são a falta de grãos supercondutores em determinados sítios e diferenças no espaçamento de rede. A importância de estudarmos os efeitos destes defeitos, é a de podermos tecer previsões sobre as suas influências nas propriedades do sistema, desde a corrente que atravessa o sistema a transições de fase.

Geralmente os materiais magnéticos com comportamento de baixa dimensionalidade são produzidos através de técnicas de crescimento de cristais. Desta forma, a substituição acidental de um íon magnético por um não magnético é freqüente. Esta substituição pode causar deformações na geometria da rede cristalina, além de afetar as propriedades magnéticas do material. Como exemplo, podemos citar medidas recentes de ressonância magnética nuclear em cupratos supercondutores a altas temperaturas (high- T_c). Estas medidas mostraram que a substituição de átomos de Cu^{2+} (Spin 1/2) nos planos $Cu - O$ por impurezas não magnéticas como Zn^{2+} (Spin 0) aumentam as correlações magnéticas em torno das impurezas [36].

Até agora fizemos uma revisão sobre os modelos teóricos que descrevem o magnetismo em baixas dimensões, suas principais propriedades e os principais métodos utilizados no estudo destes. Discutimos também a importância de estudarmos modificações nestes modelos para que possamos levar em conta a presença de impurezas nos materiais. Nos próximos capítulos iremos explorar alguns efeitos causados pela presença de impurezas não magnéticas nestes modelos.

Capítulo 3

Interações Sóliton-Impureza em Antiferromagnetos 2D Isotrópicos

3.1 Interações Estáticas

Como sabemos, os sólitons desempenham um papel de grande importância nas propriedades dinâmicas e estáticas de sistemas magnéticos bidimensionais [19, 20, 21], por isso, o estudo das interações entre estes e impurezas merecem grande destaque. A presença de impurezas não magnéticas e/ou outros defeitos, que por ventura possam ocorrer na formação de um material magnético, deve ser considerada, assim como as possíveis modificações que este defeito pode provocar nas propriedades do material devem ser previstas. Neste sentido alguns trabalhos consideraram este efeito. Recentemente, Zaspel, Subbaraman e Drumheller [37, 38] investigaram os efeitos provocados pela presença de impurezas não magnéticas em antiferromagnetos isotrópicos de camadas. Nestes trabalhos, os autores utilizando um tratamento na rede discreta, mostraram que a presença destas impurezas no centro dos sólitons tipo Belavin-Polyakov causam deformações nestes, levando a dois tipos de sóliton, sólitons-I e sólitons-P. Estas estruturas foram detectadas experimentalmente no composto $(C_3H_7NH_3)_2M_xMn_{1-x}Cl_4$ através de um comportamento do tipo Arrhenius ($\exp(-E/T)$) em medidas da largura de linha de ressonância eletrônica paramagnética (EPR) dependente da temperatura [37, 38]. A modificação na dependência da largura

de linha deve-se à alteração da energia do sóliton quando este encontra-se centrado em uma impureza não magnética. Estas estruturas também foram obtidas no limite contínuo, com expressões analíticas exatas em um trabalho de Pereira e Pires [14]. Nesta seção iremos reproduzir a solução obtida por Pereira e Pires para que na próxima possamos explorar movimentos oscilatórios dos sólitons devido à presença da impureza não magnética.

Como foi exposto no capítulo anterior, um material magnético bidimensional isotrópico é representado pela hamiltoniana de Heisenberg isotrópica. No limite contínuo temos (2.15):

$$H = \frac{J}{2} \int (\partial_\mu \vec{S}) \cdot (\partial^\mu \vec{S}) d^2r, \quad \mu = 1, 2. \quad (3.1)$$

Como nosso interesse é um antiferromagneto, devemos substituir o campo de spins \vec{S} pela magnetização de subrede (vetor de Néel) \vec{n} , que representa o campo de spins para um antiferromagneto no regime de baixas temperaturas. Parametrizando o vetor de Néel como $\vec{n} = (\sqrt{1-m^2} \cos \phi, \sqrt{1-m^2} \sin \phi, m)$, com $\vec{n}^2 = 1$, pode-se reescrever a hamiltoniana da seguinte forma:

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r \left[\frac{(\vec{\nabla} m)^2}{(1-m^2)} + (1-m^2)(\vec{\nabla} \phi)^2 \right]. \quad (3.2)$$

Para considerar a presença de impurezas não magnéticas no limite contínuo deve-se modificar a hamiltoniana 3.2. A modificação é feita retirando as interações magnéticas em uma região do espaço da ordem de tamanho do espaçamento de rede a . Como as interações são dadas pela hamiltoniana 3.2, o que se faz é multiplica-la por uma função que seja igual a 1 em todo espaço, exceto em uma região circular de raio a onde deve ser 0. Desta forma obtêm-se a seguinte hamiltoniana:

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r V(\vec{r}) \left[\frac{(\vec{\nabla} m)^2}{(1-m^2)} + (1-m^2)(\vec{\nabla} \phi)^2 \right], \quad (3.3)$$

onde

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{se } |\vec{r} - \vec{r}_0| \geq b, \\ 0 & \text{se } |\vec{r} - \vec{r}_0| < b. \end{cases} \quad (3.4)$$

Este potencial é mostrado na figura 3.1 e representa uma única impureza não magnética,

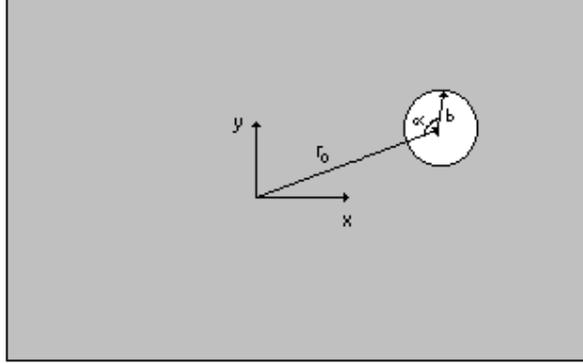


Figura 3.1: Nesta figura, a parte cinza representa a parte do plano que participa da interação magnética, enquanto a parte em branco representa a porção do plano que não têm magnetismo.

como um átomo ou molécula, localizada no ponto \vec{r}_0 .

As equações de movimento correspondentes a este novo modelo são obtidas partindo-se da Lagrangeana correspondente:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}J \int \left[\frac{(1-m^2)}{c^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{c^2(1-m^2)} \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^2 - (1-m^2)(\vec{\nabla} \phi)^2 - \frac{(\vec{\nabla} m)^2}{(1-m^2)} \right] V(\vec{r}) d^2r, \quad (3.5)$$

onde c é a velocidade das ondas de spin, e das seguintes equações:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)} \right) - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0 \quad (3.6)$$

e

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{1}{c} \frac{\partial m}{\partial t} \right)} \right) - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} m)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial m} = 0, \quad (3.7)$$

uma vez que esta é uma teoria invariante de Lorentz. Desta forma, ao considerarmos que a impureza é estática, ou seja, que $V(\vec{r})$ não varia no tempo, obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{(1-m^2)V(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{2mV(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial m}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ &= (1-m^2)\vec{\nabla}\phi \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r}) + (1-m^2)V(\vec{r})\nabla^2\phi - 2mV(\vec{r})\vec{\nabla}\phi \cdot \vec{\nabla}m, \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} & \frac{V(\vec{r})}{c^2(1-m^2)} \frac{\partial^2 m}{\partial t^2} + \frac{mV(\vec{r})}{c^2(1-m^2)^2} \left(\frac{\partial m}{\partial t}\right)^2 + \frac{mV(\vec{r})}{c^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 = \\ & \frac{\nabla^2 m V(\vec{r}) + \vec{\nabla}m \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r})}{1-m^2} + \frac{mV(\vec{r})(\vec{\nabla}m)^2}{(1-m^2)^2} + mV(\vec{r})(\vec{\nabla}\phi)^2. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Pelas equações acima fica claro que devemos conhecer $\vec{\nabla}V(\vec{r})$. Este gradiente pode ser facilmente calculado em coordenadas cilíndricas (r, φ) levando a:

$$\vec{\nabla}V(\vec{r}) = a[\hat{r} \cos(\alpha - |\varphi - \varphi_0|) + \hat{\varphi} \sin(\alpha - |\varphi - \varphi_0|)]\delta(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{b}), \quad (3.10)$$

onde a impureza está localizada em (\vec{r}_0, φ_0) , δ é a função delta de Dirac e α é o ângulo que o vetor \vec{b} , com origem no ponto \vec{r}_0 e fim em um ponto da circunferência, faz com o vetor \vec{r}_0 (vide Fig. (3.1)). Ao considerar impurezas locais (como a falta de um único íon magnético), deve-se fazer $\vec{b} \rightarrow 0$, ou mais precisamente $\vec{b} \rightarrow a$, e conseqüentemente $\vec{r} \rightarrow \vec{r}_0$ e $\varphi \rightarrow \varphi_0$, de onde:

$$\vec{\nabla}V(\vec{r}) \approx a[\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)]\delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (3.11)$$

Na equação acima $\cos(\alpha)$ e $\sin(\alpha)$ são interpretados como sendo constantes de acoplamento anisotrópicas que dependem da direção que se considera quando estamos centrados no ponto \vec{r}_0 .

Agora será considerada a presença de um sólon do tipo Belavin-Polyakov centrado na origem. Em coordenadas polares, escreve-se:

$$m_0 = \frac{r^2 - R^2}{r^2 + R^2}, \quad \phi_0 = \varphi, \quad (3.12)$$

onde R é o tamanho do s3l3iton, que caracteriza a dist3ncia ao centro deste at3 as posi33es onde as componentes de spins est3o paralelas ao plano ($m_0 = 0$). Analisaremos agora o caso em que $\vec{r}_0 \neq 0$. Assumindo que a impureza causa pequenas deforma33es na estrutura do s3l3iton, ou seja, admitindo $\vec{\nabla}m \approx \vec{\nabla}m_0$ e $\vec{\nabla}\phi \approx \vec{\nabla}\phi_0$, obt3m-se, ao considerar solu33es est3ticas ($\partial m/\partial t = \partial\phi/\partial t = 0$):

$$V(\vec{r}) \left[\frac{(\vec{\nabla}m)^2}{1-m^2} + (1-m^2)(\vec{\nabla}\phi)^2 \right] = -V(\vec{r}) \frac{\nabla^2 m}{m} - \frac{\vec{\nabla}m_0 \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r})}{m}, \quad (3.13)$$

$$V(\vec{r}) \left[\nabla^2\phi - \frac{2m\vec{\nabla}m \cdot \vec{\nabla}\phi}{1-m^2} \right] = -\vec{\nabla}\phi_0 \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r}). \quad (3.14)$$

Vemos na Eq.(3.13) que o primeiro termo 3 exatamente a densidade hamiltoniana. Desta forma, para calcular a energia de um s3l3iton na presen3a de uma impureza n3o magn3tica, quando esta n3o est3 localizada na origem, pode-se multiplicar a Eq.(3.13) por $J/2$ e integrar ambos os lados. Desta forma, chega-se a:

$$E_i = -\frac{J}{2} \left[\int V(\vec{r}) \frac{\nabla^2 m}{m} d^2r - \int \frac{\vec{\nabla}m_0 \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r})}{m} d^2r \right]. \quad (3.15)$$

Aproximando $m \approx m_0$ nas integrais acima, e usando $\vec{\nabla}m_0 = 4R^2\vec{r}/(r^2+R^2)^2$ podemos estimar a energia desta configura33o atrav3s da seguinte equa33o:

$$E_i = E_s + \frac{J}{2} \int \left[\frac{\nabla^2 m_0}{m_0} \right]_{\vec{r} \cong \vec{r}_0} dA_I - 2R^2 J \int \frac{ra}{(r^4 - R^4)} \cos(\alpha) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) d^2r, \quad (3.16)$$

onde a integra33o em dA_I 3 feita em um c3rculo, com raio da ordem do espa3amento de rede a , em torno da impureza n3o magn3tica e $E_s = 4\pi J$ 3 a energia do s3l3iton na aus3ncia de impurezas. Na segunda integral, apenas os pontos em torno da circunfer3ncia de raio a , centrada em \vec{r}_0 , contribuir3o devido a fun33o delta de Dirac. Levando em conta a discreteza da rede, considera-se apenas quatro pontos (os quatro vizinhos mais pr3ximos) neste c3lculo. Ent3o, para \vec{r}_0 n3o muito perto do centro do

sóliton, obtêm-se a seguinte expressão para a energia deste:

$$E_i \cong E_s \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{Ra}{r_0^2 + R^2} \right)^2 + F_-(r_0, R) - F_+(r_0, R) \right], \quad (3.17)$$

onde

$$F_{\pm}(r_0, R) = \frac{R^2 a (r_0 \pm a)^2}{[(r_0 \pm a)^2 + r_0^2]^{1/2} [(r_0 \pm a)^4 - R^4]}. \quad (3.18)$$

O potencial efetivo de interação entre o sóliton e a impureza é dado por $U_{ef} = E_i - E_s$ e está representado na figura 3.2. Analisando este gráfico podemos concluir que para

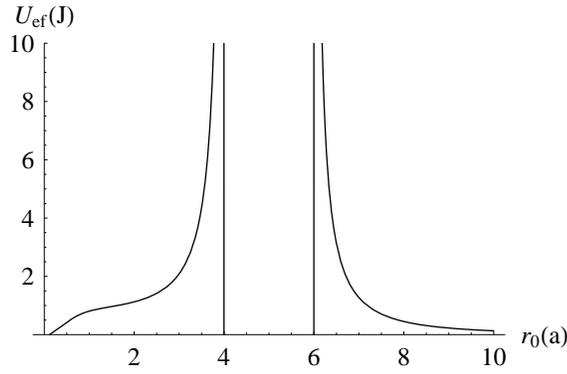


Figura 3.2: Potencial efetivo em função de r_0 . Neste gráfico o sóliton tem tamanho $R = 5a$. (Ref. [14])

$r_0 \gg R$, $E_i \rightarrow E_s$, mostrando que quando a impureza está distante do centro do sóliton, esta praticamente não o afeta. Além disso, para $r_0 > R$, vemos que quando $r_0 \rightarrow R+a$, $U_{ef} \rightarrow \infty$, indicando um potencial repulsivo. Porém, para $r_0 < R$, o efeito é contrário, ou seja, há um potencial atrativo entre os dois defeitos, que forma um estado ligado quando $r_0 < R-a$, uma vez que $U_{ef} \rightarrow \infty$ quando $r_0 \rightarrow R-a$. Quando $r_0 = R$, o potencial apresenta um máximo local, o que leva a uma instabilidade e a um provável colapso.

O potencial efetivo de interação sugere que a energia mínima para o sóliton é obtida quando $r_0 = 0$. Iremos agora estudar esta situação com mais detalhes.

Considerando as equações de movimento estáticas,

$$V(\vec{r}) \left[\nabla^2 m + \frac{m(\vec{\nabla} m)^2}{1 - m^2} + m(1 - m^2)(\vec{\nabla} \phi)^2 \right] = -\vec{\nabla} m \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}), \quad (3.19)$$

$$V(\vec{r}) \left[\nabla^2 \phi - \frac{2m\vec{\nabla} m \cdot \vec{\nabla} \phi}{1 - m^2} \right] = -\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}), \quad (3.20)$$

e substituindo $m = m_0 + m_1$ e $\phi = \phi_0 + \phi_1$, onde m_1 e ϕ_1 são pequenas deformações na estrutura do sóliton pode-se aproximar $\vec{\nabla}(m_0 + m_1) \cong \vec{\nabla} m_0$ e $\vec{\nabla}(\phi_0 + \phi_1) \cong \vec{\nabla} \phi_0$ próximo ao ponto \vec{r}_0 . Substituindo estas aproximações nas equações de movimento e calculando nos pontos onde $V(\vec{r}) = 1$, que inclui todo plano exceto uma pequena região em torno de \vec{r}_0 , têm-se:

$$\begin{aligned} \nabla^2 m_1 + 2 \left[\frac{(\vec{\nabla} m_0)^2 + m_0 \vec{\nabla} m_0 \cdot \vec{\nabla}}{(1 - m_0^2)} \right] m_1 + 2m_0(1 - m_0^2) \vec{\nabla} \phi_0 \cdot \vec{\nabla} \phi_1 = \\ - \frac{4R^2 r_0 a}{(r_0^2 + R^2)^2} \cos(\alpha) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\nabla^2 \phi_1 - 2 \frac{m_0 \vec{\nabla} m_0}{(1 - m_0^2)} \cdot \vec{\nabla} \phi_1 = - \frac{a}{r_0} \sin(\alpha) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (3.22)$$

Ao considerar $\vec{r}_0 = (0, 0)$, $\sin(\alpha) = 0$, sendo assim, a Eq. (2.21) tem como solução, em coordenadas cilíndricas, $\phi_1 = \text{cte}$. Assim, a Eq. (2.20) fica:

$$\nabla^2 m_1 + 2 \left[\frac{(\vec{\nabla} m_0)^2 + m_0 \vec{\nabla} m_0 \cdot \vec{\nabla}}{(1 - m_0^2)} \right] m_1 = 0. \quad (3.23)$$

A equação acima têm duas soluções, o que leva a dois tipos de sólitons diferentes. Para a solução trivial $m_1 = 0$, têm-se o sóliton-P. A configuração deste é a mesma dos sólitons tipo Belavin-Polyakov em todo espaço, exceto na origem, já que não há spin. Isto corresponde, no mapeamento do espaço interno de spins no espaço físico real, a deixar um pedaço do espaço interno de fora do mapeamento, na região em torno de $m_0 = -1$. Isto leva a uma singularidade tipo vórtice no centro do sóliton. A outra

solução possível é:

$$m_1 = b(R)(1 - m_0^2) + d(R)[m_0 + (1 - m_0^2) \ln(r/R)], \quad (3.24)$$

onde as funções $b(R)$ e $d(R)$ devem ser ajustadas para manter as características do sóliton e levar em conta a presença da impureza não magnética em seu centro. Primeiramente, exige-se na solução acima que $m_1 \rightarrow 0$ para $r \rightarrow \infty$ para que o sóliton mantenha uma das suas características ($m \rightarrow 1$ para $r \rightarrow \infty$). Para tanto, faremos $d(R) = 0$, o que satisfaz a condição acima e mantém a tendência $m \cong -1$ perto da origem. Devemos exigir também que $m = m_0 + m_1 \leq 1$, o que implica em $b(R) \leq 0.5$. Esta solução é o sóliton-I que pode ser expresso por:

$$m_I = m_0 + b(R)(1 - m_0^2), \quad \phi_I = \varphi. \quad (3.25)$$

Os valores corretos para $b(R)$ são obtidos ao minimizar a energia para cada valor de R .

A energia do sóliton-P pode ser facilmente calculada através da hamiltoniana 3.2 e é dada por:

$$E_P = E_s \frac{R^2}{(R^2 + a^2)}. \quad (3.26)$$

Já para o sóliton-I, o que deve-se fazer é usar a hamiltoniana 3.2, com $m = m_I$ para calcular a energia do sóliton para cada valor de R , e minimizar em relação a b . Nas figuras 3.3 e 3.4 estão plotados os valores de b que minimizam a energia e os valores da energia em função do tamanho do sóliton. Esta teoria também nos permite comparar o tamanho dos sólitons. Para o sóliton-I, $R_I = [(1 + 4b^2)^{1/2} - 2b]^{1/2}R$, e como $0 < b \leq 0.5$, $R_I < R_P$ já que $R_P = R$. Estes resultados, que foram obtidos por Pereira e Pires [14], estão em pleno acordo qualitativo com os obtidos por Subbaraman, Zaspel e Drumheller [37] através de outras técnicas. A pequena discrepância quantitativa entre os resultados já era esperada devido ao contraste entre o limite contínuo e as considerações na rede discreta. Porém, os resultados obtidos na rede discreta não nos dão expressões analíticas para a configuração dos sólitons, mas

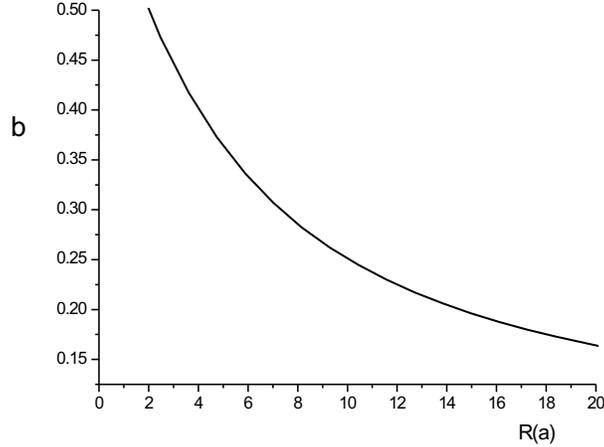


Figura 3.3: Valores da função $b(R)$ que minimizam a energia do sóliton-I em função do tamanho do sóliton R . (Ref. [14])

apenas expressões numéricas. No trabalho de Subbaraman, Zaspel e Drumheller [37] os resultados obtidos mostram uma pequena redução da energia e do tamanho dos sólitons quando comparados com os resultados aqui expostos.

Em resumo, nesta seção consideramos as interações entre uma impureza não magnética e um sóliton em um antiferromagneto 2D. Os resultados obtidos por Pereira e Pires [14] mostraram que há uma interação atrativa quando a distância entre o centro do sóliton e a impureza é menor que R , e repulsiva para distâncias maiores. No caso em que a impureza está localizada no centro do sóliton temos dois tipos diferentes de sólitons, os sólitons-P e os sólitons-I. Em ambos os casos a energia destes é menor que a energia de um sóliton quando não há impurezas, indicando uma tendência dos sólitons se nuclearem nas impurezas.

3.2 Sólitons Oscilantes

Nesta seção consideraremos possíveis efeitos na dinâmica dos sólitons na presença de impurezas. Mais especificamente consideraremos as impurezas localizadas no centro do sóliton. Como há um potencial atrativo entre o sóliton e a impureza para separações menores que o tamanho deste, e sendo energeticamente favorável

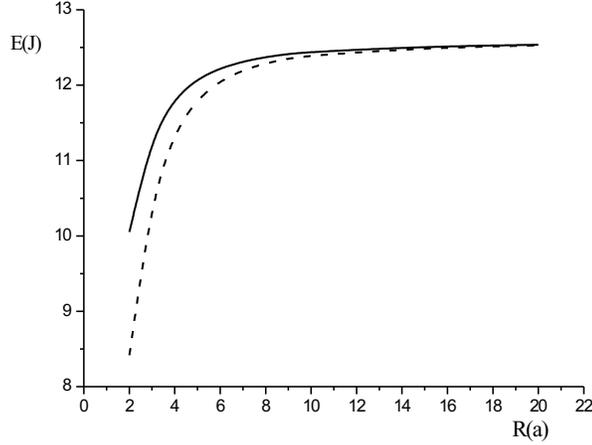


Figura 3.4: Energia dos sólitons-P (linha sólida) e dos sólitons-I (linha pontilhada) em função do tamanho destes. Estes resultados estão em acordo qualitativo com os obtidos nas Ref. [37, 38]. (Ref. [14])

que estes apareçam no sistema como sólitons-P ou I, uma vez que a energia é menor que a dos sólitons de Belavin-Polyakov, esperamos que parte dos sólitons em um material fiquem confinados em uma região da ordem do seu tamanho R . A quantidade de sólitons "presos" sendo então proporcional à concentração de impurezas não magnéticas. Por estes sólitons estarem confinados nesta região (a barreira energética tende a infinito para uma separação igual a R), esperamos que flutuações térmicas façam com que os sólitons entrem em um tipo de movimento oscilatório. O caso de uma oscilação em geral, de qualquer amplitude, é difícil de ser tratado, uma vez que envolve efeitos da discreteza da rede e além disso, a transformação dos sólitons-P ou I em sólitons tipo Belavin-Polyakov na presença de impurezas parece não ser de fácil tratamento. Iremos então nos restringir a pequenas oscilações.

Como já ficou claro, se a impureza estiver localizada exatamente no centro do sóliton, teremos os sólitos-P ou I, com energia E_P ou E_I dependendo do tipo de sóliton. No limite em que $r_0 \rightarrow 0$, consideraremos uma expansão da energia da seguinte forma:

$$E_{r_0 \rightarrow 0}(r_0, R) \cong E_\alpha(R) + \frac{1}{2!} r_0^2 \left(\frac{d^2 E}{dr_0^2} \right)_{r_0=0} + \frac{1}{3!} r_0^3 \left(\frac{d^3 E}{dr_0^3} \right)_{r_0=0} + \dots, \quad (3.27)$$

onde $\alpha = P$ ou I representa um dos dois tipos de s3liton. Esta expans3o 3 interpretada da seguinte forma: o primeiro termo 3 a massa de repouso do s3liton-P ou I, enquanto os demais s3o atribuidos 3s intera33es entre os s3litons e a impureza ($U_{ef}(r_0)$) em fun33o da separa33o entre eles. Para separa33es pequenas, podemos desprezar termos de ordem mais alta na expans3o. A fun33o completa para a energia, $E(r_0, R)$, dever3 ser uma interpola33o suave entre a expans3o Eq. (3.27) e a energia do s3liton para $r_0 > a$, Eq. (3.17), com a transi33o ocorrendo em $r_0 \approx a$. Se mantivermos a expans3o at3 o termo harm3nico (segunda ordem), teremos:

$$\left(\frac{d^2 E}{dr_0^2}\right)_{r_0=0} = K = 2\frac{E_s - E_\alpha(R)}{a^2} + 2E_s \left[\frac{R^2}{\sqrt{5}[R^4 - (2a)^4]} - \frac{R^2}{4(R^2 + a^2)^2} \right], \quad (3.28)$$

onde $R > 2a$. O potencial atrativo, quando consideramos pequenos deslocamentos, sugere um tipo de intera33o onde os s3litons n3o ficariam est3ticos. As impurezas poderiam, al3m de deformar a estrutura do s3liton, exercer neste algum tipo de for3a causando assim acelera33es. Se considerarmos a for3a sendo proporcional a massa vezes a acelera33o, concluir3amos que o movimento deveria ser oscilat3rio pela forma do potencial Eq. (3.27). Este comportamento Newtoniano de fato ocorre quando considera-se excita33es topol3gicas. Wysin, em alguns trabalhos [30, 39], mostrou que v3rtices, em sistemas de plano-f3cil, movimentam-se da forma predita por uma din3mica Newtoniana convencional. Isto 3, os movimentos do centro do v3rtice envolvem uma for3a \vec{F} e uma massa efetiva M obedecendo a seguinte rela33o:

$$\vec{F} = M \frac{d\vec{v}}{dt}, \quad (3.29)$$

onde \vec{v} 3 a velocidade do centro do v3rtice. No caso dos v3rtices, como j3 foi mostrado, a energia depende do tamanho do sistema. Por3m, no caso de v3rtices fora do plano (out-of-plane), em antiferromagnetos com baixas anisotropias o valor da energia pode tender a um valor finito para sistemas muito grandes. Tamb3m foi mostrado por Wysin [30, 39] que para movimentos ham3nicos simples, a massa 3 dada por:

$$M = \frac{K}{\omega_0^2}, \quad (3.30)$$

onde ω_0 é o modo de frequência translacional e K é a constante elástica. O que faremos aqui é considerar que estes resultados podem ser extrapolados para o caso antiferromagnético isotrópico, com as devidas modificações uma vez que este é invariante de Lorentz. Já que o sóliton é uma estrutura localizada, sua massa deve ser expressa por [15] $M = E(R)/c^2$, onde $c = 2\pi Ja/\hbar$ é a velocidade das ondas de spin com grandes comprimentos de onda. A modificação na massa que devemos fazer é considerar, no caso do sóliton estar centrado na impureza, a energia E_P ou E_I , dependendo do tipo de sóliton, levando à massa M_P ou M_I .

Pela Eq. (3.27) concluímos que pequenos deslocamentos do centro dos sólitons-P ou I, levam a um acréscimo na energia. De fato, este acréscimo de energia cria estados ligados entre os dois defeitos. Qualquer perturbação neste sistema, levaria então a um deslocamento do centro do sóliton. Para deslocamentos muito menores que o espaçamento de rede, o potencial é aproximadamente harmônico, com a constante elástica $K = (d^2E/dr_o^2)_{r_o=0}$ sendo dada pela Eq. (3.28). Como a constante elástica é escrita em função da energia E_P ou E_I , seria interessante obter uma única expressão que incluísse ambas. Na Ref. [37] foi mostrado que podemos escrever a energia dos dois tipos de sólitons através da seguinte expressão: $E_\alpha = E_s R^2 / (r^2 + a_\alpha^2)$, onde $a_\alpha = a_P$ ou a_I ($a_P = 0.23a$, sóliton-P e $a_I = 1.01a$, sóliton-I). Podemos agora escrever, a partir da Eq. (3.30), as frequências das pequenas oscilações ($r_0 \ll a$) do centro dos sólitons, estimadas como:

$$\omega_\alpha = \sqrt{2} \frac{c}{a} \left[\frac{a_\alpha^2}{R^2} + (R^2 + a_\alpha^2) \left(\frac{a^2}{\sqrt{5}[R^4 - (2a)^4]} - \frac{a^2}{4(R^2 + a^2)^2} \right) \right]^{1/2}. \quad (3.31)$$

Na figura 3.5 estão plotadas as frequências para os dois tipos de sóliton em função do tamanho destes. Obviamente, sólitons maiores oscilam mais lentamente. Como consequência, em geral, os sólitons-P oscilam mais lentamente que os sólitons-I.

A análise do espectro de pequenas perturbações (os mésons ou mágnons da teoria) em uma excitação não linear exhibe modos de frequência zero ($\omega = 0$) sempre que a teoria exhibe simetria contínua. Mesmo sendo as energias dos sólitons invariantes sob rotações em torno do eixo z , o mesmo não acontece para translações no plano x - y .

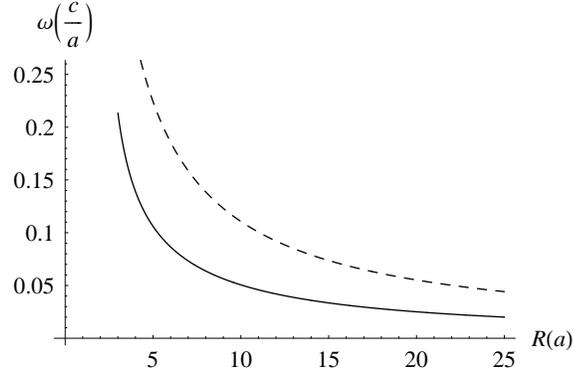


Figura 3.5: Frequências de oscilações em função do tamanho dos sólitons. A linha cheia representa os sólitons-P e a pontilhada os sólitons-I.

Isto se deve à quebra da simetria translacional imposta pela presença da impureza (não há como o sóliton se mover sem modificar sua energia, já que esta depende da distância do centro do sóliton à impureza). Sendo assim, não há mais modos de frequência zero no plano $x-y$. Os modos oscilatórios dados pela Eq. (3.31) podem ser considerados como sendo causados pela força exercida pela impureza, podendo assim serem calculados independentemente do espectro de ondas de spin. Veremos isto através do comportamento da terceira componente do vetor de Néel ($n_3 = m$) quando o centro do sóliton se desloca do centro da impureza por uma pequena quantidade $r_0 \ll a$. Sendo esta uma oscilação em torno da impureza, podemos escrever: $r_0 = A \sin(\omega_\alpha t)$, onde A é a amplitude de oscilação, a qual assumimos ser pequena. A mudança da componente fora do plano (n_3) do vetor de Néel quando o sóliton oscila, pode ser obtida da seguinte diferença dependente do tempo $\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = n_{3\alpha}(r_0) - n_{3\alpha}(0)$. Esta diferença pode ser facilmente obtida, e após uma linearização leva a:

$$\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) \approx \text{Im}[A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t)]. \quad (3.32)$$

Esta expressão mostra que se ω_α for zero, a função $n_{3\alpha}(A^\mu) = n_{3\alpha}(0) + A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha}$ deve descrever um sóliton que foi uniformemente transladado por uma pequena distância no plano $A^\mu = (A^1, A^2)$ (modo translacional). Porém, nossos resultados apresentam modos de frequência não nulos (ω_α), o que implica em $n_{3\alpha}(A^\mu) = n_{3\alpha}(0) +$

$A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t)$ levando a um movimento oscilatório do sóliton. Podemos dar outra interpretação aos resultados obtidos. Ao invés de interpretarmos um movimento oscilatório do sóliton, podemos pensar no movimento dos spins, ou seja, em uma auto-função das ondas de spins adicionada à solução sóliton. Sendo assim, a pequena perturbação $\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t)$ pode ser vista como ondas de spin fora do plano, com frequências e momentos angulares bem definidos, em torno da solução estática do sóliton $n_{3\alpha}$, quando este está centrado na impureza. Resumindo, nesta interpretação teríamos um sóliton parado envolto por ondas de spin (magnons). De fato, supondo $A^\mu = (0, A)$ e usando coordenadas cilíndricas (r, φ) , temos:

$$\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = \text{Im} \left(\frac{\partial n_{3\alpha}}{\partial y} e^{-i\omega_\alpha t} \right) = \text{Im} \left(\frac{4AR^2 r}{(r^2 + R^2)^2} e^{i(m\phi - \omega_\alpha t)} \right), \quad (3.33)$$

onde $m = \pm 1$ é o canal de momento angular. Nesta interpretação, a equação acima nos dá a deformação do sóliton em função do tempo. Em particular, se observarmos o movimento dos spins em torno da impureza (ou do centro do sóliton), a direção destes podem ser usadas para estimar a posição do centro do sóliton. A Eq. (3.33) mostra que a amplitude das oscilações vai a zero quando $r \rightarrow \infty$, descrevendo assim modos de magnons que estão localizados no sóliton. As interações sóliton-impureza podem induzir modos locais de magnons em torno das impurezas. As frequências destes modos locais dependem somente do tipo de sóliton (P ou I) e do tamanho. Em uma rede discreta podemos escrever os possíveis tamanhos dos sólitons como $R = la$ (l positivo e inteiro). Obtemos assim um espectro discreto de frequências dados por:

$$\omega_{\alpha, l} = \sqrt{2} \frac{c}{a} \left[\frac{\delta_\alpha^2}{l^2} + (l^2 + \delta_\alpha^2) \left(\frac{1}{\sqrt{5}(l^4 - 16)} - \frac{1}{4(l^2 + 1)^2} \right) \right]^{1/2}, \quad (3.34)$$

onde δ_α pode assumir os valores $\delta_P = 0.23$ para o sóliton-P e $\delta_I = 1.01$ para o sóliton-I. Note que na equação acima $l \geq 3$, uma vez que a presença da impureza impede a formação de sólitons menores que $3a$. Para $l = 3$, $\omega_{P,3} = 0.302c/a$ e $\omega_{I,3} = 0.561c/a$, enquanto para $l = 4$, $\omega_{P,4} = 0.197c/a$ e $\omega_{I,4} = 0.402c/a$, que geralmente apresenta valores entre $(10^{11} - 10^{13})s^{-1}$. É esperado que modos locais com frequências bem definidas sejam induzidos em torno de impurezas não magnéticas

via sólitons. Ressonâncias nas frequências características podem ser, em princípio, detectadas em experimentos de ressonância de spin eletrônico ou de espalhamento inelástico de neutrons.

A equação 3.31 mantém certas similaridades com os resultados obtidos por Wysin [30, 39] para vórtices em sistemas de plano-fácil. A configuração de spins de um vórtice estende-se aos limites do sistema, fazendo com que sua inércia dependa do tamanho deste. Conseqüentemente, a massa efetiva dos vórtices depende do quadrado do raio do sistema, sendo assim, os modos de frequência translacional diminuem com o tamanho do sistema [30, 39]. No nosso caso, a massa depende do tamanho do sólito, e conseqüentemente a frequência diminui com o tamanho do sólito.

Os resultados aqui obtidos são válidos apenas para pequenos deslocamentos ($r_0 \ll a$). Para considerarmos deslocamentos maiores, onde o centro do sólito se move por mais de um espaçamento de rede, $r_0 > a$, devemos incluir termos não lineares na força que atua no sólito, além de efeitos de discreteza. Estes cálculos estão fora das nossas intenções. Materiais magnéticos de camadas, como o composto $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2MX_4$, onde M é um metal de transição e X é Cl ou Br , são sistemas quase clássicos de spins para $M = Mn^{2+}$ e $X = Cl$ (o íon Mn tem spin 5/2), sendo então um bom candidato para a detecção destes modos de vibração quando dopados com íons não magnéticos como Mg ou Cd .

Capítulo 4

Interações Vórtice-Impureza e sua Influência na Transição de Kosterlitz-Thouless em Ferromagnetos de Plano-Fácil

4.1 Resultados Analíticos

Neste capítulo iremos descrever as interações entre vórtices planares e impurezas não magnéticas em sistemas de plano-fácil e suas influências na transição de Kosterlitz-Thouless. Os resultados para a interação serão obtidos para o modelo XY, mas como trataremos vórtices planares, poderão se estender imediatamente para o modelo do Rotor Planar e para o modelo de Heisenberg de plano-fácil ¹. Já os resultados para a transição de fase foram obtidos para o Rotor Planar, mas esperamos que qualitativamente estes se estendam aos outros modelos planares. Nesta seção iremos expor resultados analíticos da interação entre um vórtice planar e uma única impureza não magnética no modelo XY. Na próxima, compararemos os resultados analíticos com simulações feitas através de dinâmica molecular e do método de Monte Carlo.

¹Os vórtices planares são estáveis para uma certa faixa de anisotropias em ferromagnetos de plano-fácil [28, 29], porém, com a inclusão de impurezas, esta faixa de valores pode ser aumentada devido à menor energia deste tipo de excitação [40, 41].

Finalmente, na última seção aplicaremos o método de Monte Carlo para o modelo do Rotor Planar com uma certa concentração de impurezas não magnéticas para verificar os efeitos destas na transição de Kosterlitz-Thouless.

Para verificarmos como é a interação entre um vórtice planar e uma única impureza não magnética, utilizaremos o mesmo método do capítulo anterior para a interação entre sólitons e impurezas. Partindo da hamiltoniana do modelo XY, já com o potencial que representa a impureza [2], temos:

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r \left[\frac{m^2(\vec{\nabla}m)^2}{1-m^2} + (1-m^2)(\vec{\nabla}\phi)^2 + \frac{4}{a^2}m^2 \right] V(\vec{r}), \quad (4.1)$$

onde novamente o potencial $V(\vec{r})$ é dado por:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{se } |\vec{r} - \vec{r}_0| \geq b, \\ 0 & \text{se } |\vec{r} - \vec{r}_0| < b. \end{cases} \quad (4.2)$$

As equações de movimento, obtidas após a inclusão do potencial devido à impureza ficam da seguinte forma [2]:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1-m^2)V(\vec{r})\nabla^2\phi - 2mV(\vec{r})\vec{\nabla}m \cdot \vec{\nabla}\phi + (1-m^2)\vec{\nabla}V(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}\phi, \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{2m^2}{(1-m^2)} & \left[\vec{\nabla}m \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r}) + V(\vec{r})\nabla^2m + \frac{V(\vec{r})(\vec{\nabla}m)^2}{m} + \frac{mV(\vec{r})(\vec{\nabla}m)^2}{(1-m^2)} \right] \\ & + 2mV(\vec{r}) \left[\frac{4}{a^2} - (\vec{\nabla}\phi)^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Estamos interessados em soluções estáticas e planares destas equações, desta forma faremos

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial m}{\partial t} = 0 \quad (4.5)$$

e $m = 0$ nas equações de movimento. Assim, chegamos a apenas uma equação, mais

simples e compacta que as anteriores:

$$V(\vec{r})\nabla^2\phi = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}\phi. \quad (4.6)$$

Aqui usaremos a mesma expressão, já com as devidas aproximações, para $\vec{\nabla}V(\vec{r})$ do capítulo anterior:

$$\vec{\nabla}V(\vec{r}) \approx a[\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)]\delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (4.7)$$

Agora, consideraremos a Eq.(4.6) com $V(\vec{r}) = 1$ no lado esquerdo. Isto é válido em todo plano exceto em uma pequena região em torno do ponto \vec{r}_0 . Além disso, vamos supor que devido à quebra de simetria imposta pela presença da impureza, a estrutura do vórtice sofre uma pequena deformação² ϕ_1 . Desta forma, substituiremos $\phi = \phi_0 + \phi_1$, onde $\phi_0 = \arctan(y/x)$ é a solução para um vórtice centrado na origem, na Eq.(4.6). Assim:

$$\nabla^2(\phi_0 + \phi_1) = -a\vec{\nabla}(\phi_0 + \phi_1) \cdot [\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)]\delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (4.8)$$

Usando o fato que $\nabla^2\phi_0 = 0$ e tomando $\vec{\nabla}(\phi_0 + \phi_1) \cong \vec{\nabla}\phi_0 = (1/r)\hat{\varphi}$, podemos aproximar a equação acima da seguinte forma [2]:

$$\nabla^2\phi_1 = -\frac{a}{r_0} \sin(\alpha)\delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (4.9)$$

ou

$$\nabla^2 \left[\frac{-2\pi r_0 \phi_1}{a \sin(\alpha)} \right] = 2\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (4.10)$$

Esta equação é facilmente resolvida se lembrarmos que em duas dimensões $\nabla^2 \ln(r) = 2\pi\delta(\vec{r})$. Desta forma chegamos a:

$$\phi_1(\vec{r}) = -\frac{a \sin(\alpha)}{2\pi r_0} \ln \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|}{a} \right). \quad (4.11)$$

²A suposição que a presença da impureza causa deformações na estrutura do vórtice não é essencial. Mais adiante iremos tratar o mesmo problema porém sem leva-las em conta.

Reescrevendo $\sin(\alpha)$ em termos de r , ϕ , r_0 e ϕ_0 , chegamos à solução para um vórtice centrado na origem na presença de uma impureza não magnética localizada em \vec{r}_0 :

$$\phi = \arctan(y/x) - \frac{a}{2\pi r_0} \frac{r \sin(\phi - \phi_0)}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \ln \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|}{a} \right). \quad (4.12)$$

Podemos obter o potencial de interação do vórtice com a impureza através de:

$$V_{ef}(r_0) = E_I - E_\nu, \quad (4.13)$$

onde $E_I = \int (\vec{\nabla}\phi)^2 V(\vec{r}) d^2r$ é a energia do vórtice na presença da impureza e $E_\nu = \pi J \ln(d/a_0)$ é a energia deste quando não há impurezas³. Após algumas aproximações e tomando apenas o termo dominante, chegamos ao seguinte potencial de interação:

$$V_{ef}(r_0) \cong \frac{a^2 E_\nu^3}{24\pi^4 J^2} \frac{1}{r_0^2}. \quad (4.14)$$

Os resultados até aqui obtidos [2] aplicam-se quando a impureza se encontra a uma distância \vec{r}_0 do centro do vórtice. No caso da impureza estar localizada exatamente no centro do vórtice, continuamos com simetria cilíndrica, e desta forma, apenas as interações em torno do núcleo do vórtice devem ser retiradas. Isto implica em uma redução da energia uma vez que não há deformações na estrutura do vórtice. Em resumo, o que encontramos é que ao considerarmos deformações no vórtice a interação é repulsiva. Porém, a energia mínima do sistema é atingida quando o vórtice está centrado na impureza. Nas figuras 4.1 e 4.2 estão representadas as configurações do vórtice deformado para $r_0 = 1$ e 5 respectivamente. Apesar do limite contínuo não ser válido em regiões tão próximas ao centro do vórtice, ponto (1,0), utilizamos este para enfatizar a deformação. Vemos que esta só é significativa quando r_0 é muito pequeno, e além disso, que a deformação é global, incluindo todo o sistema. É justamente nesta região, próxima ao centro do vórtice, que o limite contínuo apresenta divergências e falhas, sendo assim, consideraremos agora o caso em que o vórtice não é deformado.

³Lembramos que o corte introduzido no cálculo da energia do vórtice quando não há impurezas é $a_0 = 0.24a$.

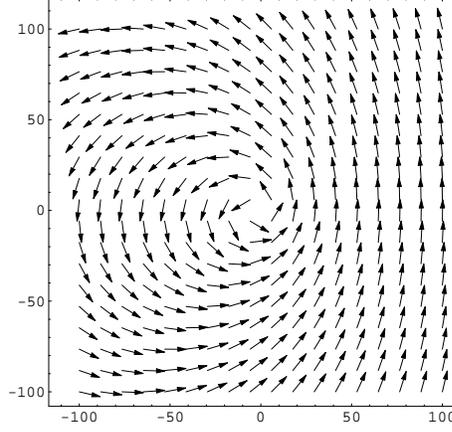


Figura 4.1: Vórtice deformado localizado na origem $(0,0)$ na presença de uma impureza localizada em $(1,0)$.

Para calcularmos o potencial de interação quando o vórtice não é deformado, o que faremos é calcular a seguinte energia [3]:

$$E_I = \frac{J}{2} \left[\int (\vec{\nabla} \phi_0)^2 d^2 r - \int_{A(\vec{r}_0)} (\vec{\nabla} \phi_0)^2 dA(\vec{r}_0) \right], \quad (4.15)$$

onde $A(\vec{r}_0)$ é a área de um círculo de raio a em torno do ponto \vec{r}_0 que representa a presença da impureza não magnética. Estas integrais são facilmente resolvidas (vide apêndice A.2) levando a:

$$E_I = E_\nu + \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2} \right), \quad (4.16)$$

e conseqüentemente a um potencial efetivo atrativo dado por:

$$V_{ef}(r_0) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2} \right) \quad (4.17)$$

para $r_0 > a$. Se considerarmos grandes separações ($r_0 \gg a$), podemos aproximar o potencial atrativo por $V_{ef} \approx -(\pi J a^2 / 2)(1/r_0^2)$. Para a região próxima ao centro do vórtice ($r_0 \leq a$), devemos considerar a impureza localizada exatamente no centro do vórtice, assim, a energia é $E_I(0) = \pi J \ln(d/a)$, levando a um potencial efetivo que "prende" o vórtice à impureza $V_{ef} = E_I(0) - E_\nu = \pi J \ln(0.24) = -4.48J$ [3].

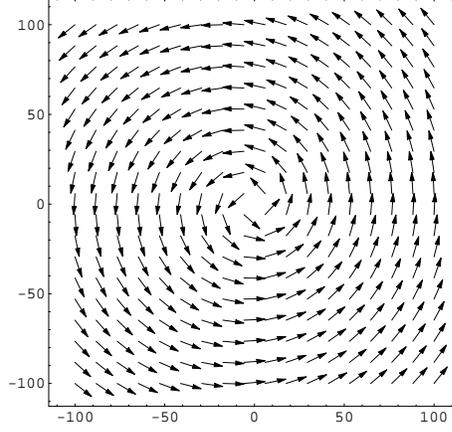


Figura 4.2: Vórtice deformado localizado na origem (0,0) na presença de uma impureza localizada em (5,0).

Esperamos que a função completa do potencial de interação seja uma interpolação entre o valor para o potencial quando a impureza está exatamente no centro do vórtice e a Eq. (4.17). Para obtermos esta função completa, o que faremos é modificar a Eq. (4.17) introduzindo uma constante b da seguinte forma:

$$V_{ef}(r_0) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2 + b^2} \right), \quad (4.18)$$

com a condição de que

$$V_{ef}(0) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{b^2} \right) = \pi J \ln(0.24). \quad (4.19)$$

Isto nos leva a uma equação válida para qualquer valor de r_0 que satisfaz os valores limites com $b = 1.03a$. Chegamos portanto ao seguinte potencial para uma impureza a uma distância X do centro do vórtice:

$$V(X) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{X^2 + b^2} \right). \quad (4.20)$$

Este potencial apresenta um mínimo para $X = 0$ e cai rapidamente a zero pra $X > 2a$ como indica a figura 4.3.

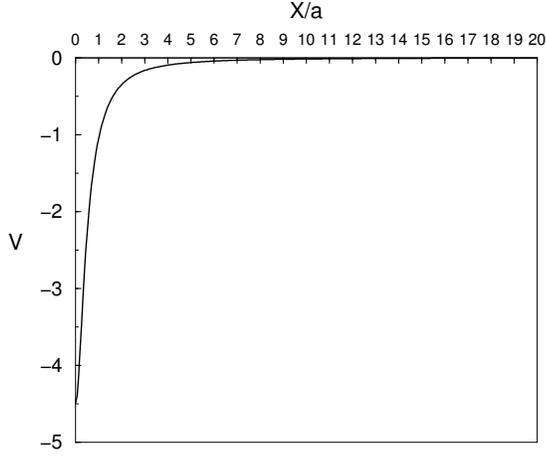


Figura 4.3: Potencial efetivo de atração entre um vórtice e uma impureza.

4.2 Simulações da Interação Vórtice-Impureza

Para verificarmos se realmente o vórtice sofre deformações globais ou não, simulações se fazem necessárias. Geralmente as simulações servem como um tipo de laboratório onde as teorias são testadas. Neste caso, simulações da dinâmica de um vórtice na presença de uma impureza não magnética serão úteis não só para verificar as aproximações feitas, mas também servirão como um guia para indicar se há ou não deformações na estrutura.

As simulações foram feitas em uma rede quadrada de lado $L=20$ com um vórtice planar inicialmente localizado no centro do sistema e uma impureza distante dois sítios deste. Para que o vórtice permaneça estável nas simulações, utilizamos condições de contorno diagonais antiperiódicas [42]

$$\begin{aligned}
 \vec{S}_{L+1,y} &= -\vec{S}_{1,L-y+1}, & \vec{S}_{0,y} &= -\vec{S}_{L,L-y+1}, \\
 \vec{S}_{x,L+1} &= -\vec{S}_{L-x+1,1}, & \vec{S}_{x,0} &= -\vec{S}_{L-x+1,L},
 \end{aligned}
 \tag{4.21}$$

para todo $1 \leq x, y \leq L$. Estas condições de contorno implicam em considerar que o vizinho de um sítio localizado na borda da rede seja o sítio diagonalmente oposto a ele, mas com um acoplamento antiferromagnético. A equação discreta de movimento

para cada spin é dada por [12]:

$$\frac{d\vec{S}_m}{dt} = \vec{S}_m \times \vec{H}_{ef}, \quad (4.22)$$

onde

$$\vec{H}_{ef} = -J \sum_n (S_n^x \hat{e}_x + S_n^y \hat{e}_y) \quad (4.23)$$

e \hat{e}_x e \hat{e}_y são vetores unitários nas direções x e y respectivamente. As equações de movimento foram integradas numericamente utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem vetorizado com um passo de tempo de $0.04J^{-1}$. A configuração inicial utilizada está representada na figura 4.4. Nossos resultados mostram que a estrutura

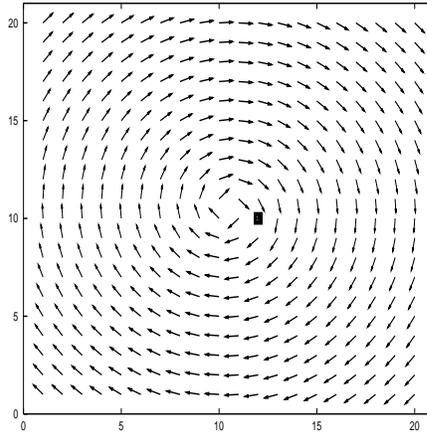


Figura 4.4: Configuração inicial típica utilizada. O quadrado representa a impureza não magnética.

do vórtice não sofre grandes modificações próximo à impureza. O centro do vórtice se move em direção à impureza, indicando um potencial efetivo atrativo como pode ser visto nas figuras 4.5 e 4.6. Na figura 4.5 está representada a configuração após 70 passos de tempo e na figura 4.6 após 150. Devemos salientar que após 150 passos de tempo o vórtice atinge o equilíbrio com o seu centro localizado na vacância. O ponto chave desta simulação é que os resultados indicam que não há deformações significativas na estrutura do vórtice. Também calculamos a energia que ”prende” (*pinning*) o vórtice à impureza ($V_{ef}(0)$) à temperatura zero para vários tamanhos da rede. Este resultado está plotado na figura 4.7. Vemos da figura que esta barreira de potencial

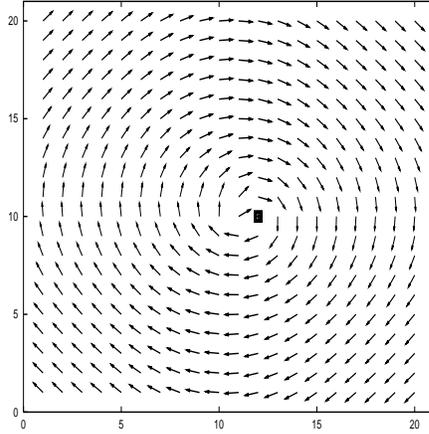


Figura 4.5: Configuração após 70 passos de tempo.

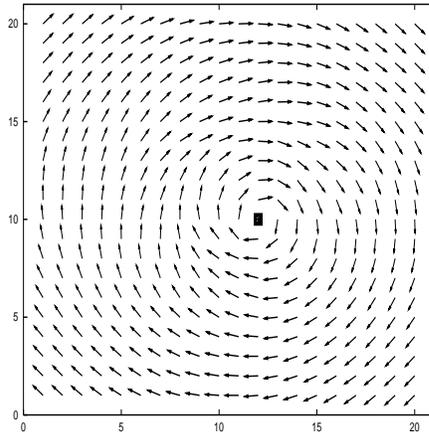


Figura 4.6: Configuração após 150 passos de tempo.

tende a $-3.54J$ no limite termodinâmico, o que está em razoável acordo com os resultados analíticos obtidos ($-4.48J$). Utilizando técnicas diferentes Wysin [40] encontrou os valores aproximados -3.178 , -1.937 e $-5.174 J$ para redes quadradas, hexagonais e triangulares respectivamente.

Para verificarmos as configurações de menor energia a baixas temperaturas neste tipo de sistemas, utilizamos o método de Monte Carlo (MC). As simulações foram feitas em uma rede quadrada de lado $L=20$ à temperatura $T = 0.1J/k_B$ (k_B é a constante de Boltzmann) usando o algoritmo de Metropolis [33] usual com condições de contorno diagonais antiperiódicas [42, 3]. As condições iniciais utilizadas foram aleatórias, e devido às condições de contorno utilizadas, a baixas temperaturas, as

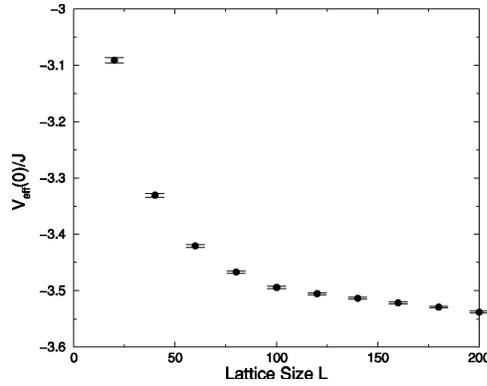


Figura 4.7: Energia que "prende" o vórtice (*pinning*) em função do tamanho da rede.

configurações de equilíbrio obtidas são vórtices ou antivórtices. Observamos que após 10^5 passos de MC estas configurações são atingidas. A figura 4.8 mostra a configuração

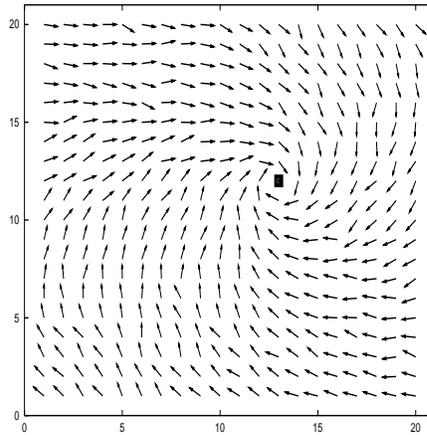


Figura 4.8: Configuração de um vórtice obtida após 2×10^5 passos de MC. A impureza está localizada em (13,12).

de equilíbrio de um vórtice obtida após 2×10^5 passos de MC com a impureza localizada no sítio (13,12). Na figura 4.9 está a configuração de equilíbrio de um antivórtice após o mesmo número de passos mas com a impureza localizada em (12,10). Observamos que em ambos os casos as configurações de menor energia são com o vórtice ou o antivórtice centrados na impureza, o que está em pleno acordo com as previsões feitas anteriormente.

Esperamos que a barreira de potencial que deve ser vencida para que o centro do vórtice se desloque da impureza (*pinning*) não seja afetado por flutuações térmicas,

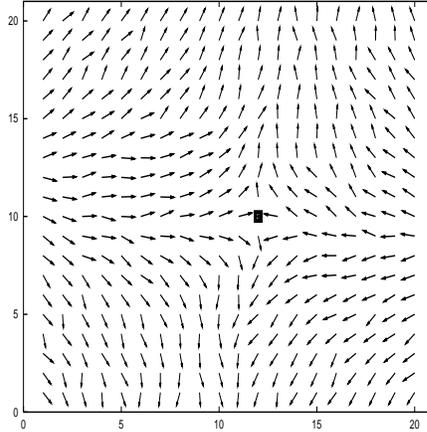


Figura 4.9: Configuração de um antivórtice obtida após 2×10^5 passos de MC. A impureza está localizada em (12,10).

uma vez que depende apenas de interações magnéticas. As flutuações aumentam a energia do sistema o que deve favorecer condições que induzam o vórtice a "escapar" da impureza.

Em resumo, nestas duas seções calculamos analítica e numericamente as interações entre vórtices e impurezas. Ao considerarmos deformações na estrutura do vórtice, verificamos que havia um potencial de interação repulsivo. Porém, ao desconiderarmos esta deformação, o potencial passa a ser atrativo. Simulações numéricas, através de Dinâmica Molecular, mostraram que o potencial é atrativo, e que aparentemente não há grandes deformações na estrutura do vórtice. Já as simulações por Monte Carlo mostraram que, como esperávamos, o estado de menor energia é quando o vórtice ou antivórtice está centrado na impureza.

4.3 Simulações de Monte Carlo para o Modelo do Rotor Planar

Para considerarmos o modelo do Rotor Planar com a presença de impurezas não magnéticas, incluiremos em sua descrição uma nova variável σ_i . Esta variável têm a seguinte propriedade: ela é 0 se o sítio i for uma impureza e 1 caso contrário. Desta

forma, obtemos a seguinte hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \cos(\phi_i - \phi_j). \quad (4.24)$$

A determinação precisa da temperatura de transição de fase de Kosterlitz-Thouless, T_{KT} , não é uma tarefa fácil, uma vez que neste tipo de transição as propriedades termodinâmicas não apresentam picos pronunciados. Além disso, por exemplo, o pico do calor específico encontra-se a uma temperatura cerca de 20% acima de T_{KT} . Uma forma de se extrair a temperatura crítica correta foi proposta por Weber e Minnhagen [43, 44] através do cálculo do módulo da helicidade (stiffness ou densidade superfluida) definida como:

$$\Upsilon = \frac{\partial^2 F}{\partial \Delta^2}, \quad (4.25)$$

onde $F = -1/\beta \ln Z$ é a energia livre do sistema (Z é a função de partição) e Δ é um pequeno giro em uma direção. Desenvolvendo a Eq. (4.25), chegamos a:

$$\Upsilon = \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Delta^2} \right\rangle - \beta \left\langle \left(\frac{\partial H}{\partial \Delta} \right)^2 \right\rangle - \beta \left(\left\langle \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right\rangle \right)^2, \quad (4.26)$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$. Introduzindo o giro na hamiltoniana da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \cos(\phi_i - \phi_j + \Delta), \quad (4.27)$$

temos no limite em que $\Delta \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \Upsilon = & -\frac{1}{2(N-n)} \langle H \rangle - \frac{1}{k_B T(N-n)} \left\langle \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \sin(\phi_i - \phi_j) \hat{e}_{i,j} \cdot \hat{x} \right]^2 \right\rangle \\ & - \frac{1}{k_B T(N-n)} \left\langle \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \sin(\phi_i - \phi_j) \hat{e}_{i,j} \cdot \hat{x} \right] \right\rangle^2, \end{aligned} \quad (4.28)$$

onde N é o número de sítios da rede, n é o número de impurezas não magnéticas, $\hat{e}_{i,j}$ é um vetor unitário que aponta do sítio j ao sítio i e \hat{x} é um vetor unitário na direção

x. Sendo

$$-\frac{1}{k_B T(N-n)} \left\langle \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \sin(\phi_i - \phi_j) \hat{e}_{i,j} \cdot \hat{x} \right]^2 \right\rangle \approx 0, \quad (4.29)$$

verificamos que a inclusão deste termo da Eq. (4.28) é desnecessária, uma vez que o erro introduzido ao desconsiderarmos este é muito pequeno e o tempo computacional gasto muito menor. Desta forma, utilizamos a seguinte expressão para o cálculo do módulo da helicidade:

$$\Upsilon = -\frac{1}{2(N-n)} \langle H \rangle - \frac{1}{k_B T(N-n)} \left\langle \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \sin(\phi_i - \phi_j) \hat{e}_{i,j} \cdot \hat{x} \right]^2 \right\rangle. \quad (4.30)$$

As equações do grupo de renormalização de Kosterlitz [45] predizem que Υ apresenta um salto do valor $(2/\pi)T_c$ a zero na temperatura crítica, ou seja:

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \frac{\Upsilon}{k_B T} = \frac{2}{\pi}. \quad (4.31)$$

Embora a Eq. (4.25) tenha sido obtida considerando-se o caso em que não há impurezas, esperamos que sua extensão ao caso impuro seja válida. Argumentos baseados na aproximação harmônica auto-consistente (SCHA) mostram que o módulo da helicidade em T_{KT} deve ser independente da concentração de impurezas (vide Ref. [46]). Para calcularmos Υ utilizamos o algoritmo de Metropolis usual como descrito na seção 2.5 em uma rede quadrada de lado L com condições de contorno periódicas:

$$\phi_{L+1,y} = \phi_{1,y}, \quad \phi_{0,y} = \phi_{L,y} \quad (4.32)$$

$$\phi_{x,L+1} = \phi_{x,1}, \quad \phi_{x,0} = \phi_{x,L}. \quad (4.33)$$

Ou seja, o sítio em uma das bordas têm como vizinho o sítio na borda oposta. Utilizamos $100 \times L \times L$ passos de MC para equilibrar o sistema, ou seja, para uma rede com $L = 60$, cada spin foi visitado 3.6×10^4 vezes. Nestas simulações variamos a temperatura em passos de $\Delta T = 0.1J/k_B$, e cada ponto mostrado nos gráficos representa a média sobre 2×10^5 configurações independentes. Em cada gráfico, quando não representadas, as barras de erro são menores que o símbolo usado.

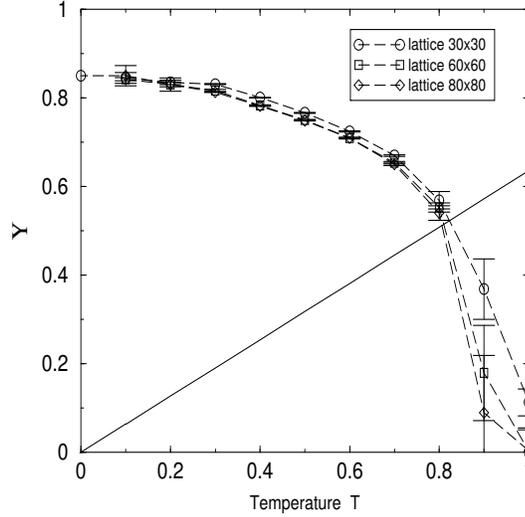


Figura 4.10: Módulo da helicidade Υ em função da temperatura T para redes com $L = 30$, 60 e 80 e 5% de impurezas. A linha sólida representa a curva $(2/\pi)T$ e a curva pontilhada são apenas guias para os olhos.

Na figura 4.10 estão os resultados das simulações de MC para Υ em redes com 5% de impurezas e $L = 30$, 60 e 80. A linha sólida representa a reta $(2/\pi)T$. O ponto em que esta linha cruza a curva de Υ nos dá a estimativa da temperatura crítica. É claro que quanto maior a rede mais preciso será o resultado obtido. Porém, ao analisarmos a figura 4.10 verificamos que a rede com $L = 60$ já nos fornece resultados satisfatórios, muito próximos aos obtidos para a rede com $L = 80$. Deste ponto em diante utilizaremos os seguintes símbolos: $\rho = n/N$ representará a concentração de impurezas não magnéticas, $T_c(\rho)$ é a temperatura crítica para uma determinada concentração e T_{KT} será reservado para $T_c(\rho = 0)$.

Inicialmente distribuimos as impurezas aleatoriamente pelos sítios da rede. Na figura 4.11 estão os valores de Υ em função da temperatura para várias concentrações de impurezas. Como podemos verificar pela intersecção da reta $(2/\pi)T$ com Υ (que nos dá a temperatura crítica), que $T_c(\rho)$ diminui à medida que aumentamos ρ . Sabemos também, que o módulo da helicidade é uma medida das correlações de fase do sistema [44], e como era de se esperar a inclusão das impurezas diminuiu estas correlações. Isto se deve ao fato de que as impurezas diminuem o número de vizinhos de um sítio (um sítio vizinho de uma impureza passa a ter 3 interações ao invés de 4), e

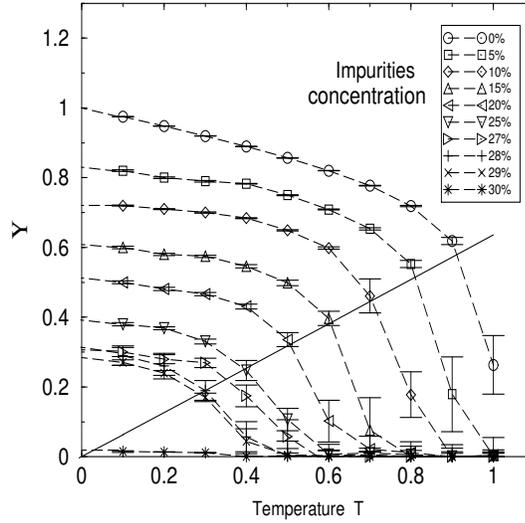


Figura 4.11: Módulo da helicidade Υ em função da temperatura T para redes com $L = 60$ com 0%, 5%, 10%, 15%, 20%, 25%, 27%, 28%, 29% e 30% de impurezas aleatoriamente distribuídas. A linha sólida representa a curva $(2/\pi)T$ e a curva pontilhada são apenas guias para os olhos.

dessa forma, os spins próximos às vacâncias passam a ter flutuações maiores, diminuindo assim as correlações do sistema. Esperamos então que o aumento das flutuações desordenem o sistema consideravelmente, diminuindo as correlações e implicando em uma concentração crítica de impurezas que leve a temperatura crítica a zero. Na figura 4.12 mostramos os resultados obtidos para a temperatura crítica em função da concentração de impurezas. Cada ponto neste gráfico representa a média sobre quatro diferentes distribuições das impurezas para uma mesma concentração. Também foram realizadas simulações com as impurezas agrupadas em um aglomerado para $\rho = 0.2$ e 0.3 (vide Fig. (4.13)). Neste caso, a temperatura crítica praticamente não sofre alterações com o aumento da concentração. Isto já era esperado, uma vez que as impurezas estão confinadas em uma região da ordem de $\rho \times L^2$ e a fronteira entre a região com impurezas e a região sem cresce com $\rho \times L$. O que ocorre é que apenas os spins próximos à fronteira entre as duas regiões irão ser influenciados pela presença das impurezas. Isto não afeta as correlações entre os spins no resto do sistema, devendo assim a transição ocorrer normalmente em regiões longe do aglomerado, com esta persistindo para valores maiores de ρ comparados com os valores no caso de as im-

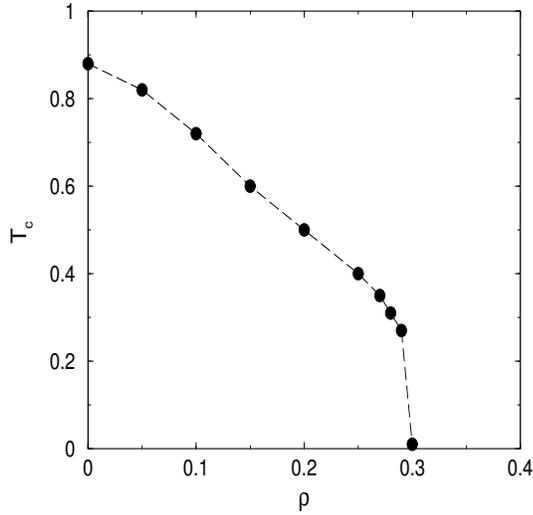


Figura 4.12: Temperatura crítica T_c em função da concentração de impurezas ρ para redes 60×60 . Estes dados foram obtidos dos resultados das simulações mostradas na Fig. (4.11).

purezas estarem uniformemente distribuídas. De fato, é como se apenas uma pequena região em torno do aglomerado sofresse influência da presença das impurezas devido ao curto alcance da interação, enquanto o resto do sistema não sente seus efeitos. Como vimos anteriormente, a interação entre vórtices e impurezas caem rapidamente a zero com a distância, e sendo os vórtices os responsáveis pela transição, a influência das impurezas sobre a transição é pequena quando estas estão aglomeradas já que seu efeito deverá atingir poucos vórtices.

Era de se esperar que a concentração crítica de impurezas para a qual a temperatura crítica vai a zero correspondesse ao limiar de percolação do sistema, que corresponde a uma concentração $\rho_c = 0.41$. A partir desta concentração não há transições de fase no sistema já que não há mais aglomerados percolados de spins. O método aqui utilizado mostrou que a temperatura crítica vai a zero antes de atingirmos o limiar de percolação. Porém em um trabalho recente Berche *et. al.* [47], utilizando o critério de Harris em simulações de MC, obtiveram em seus resultados que a temperatura crítica vai a zero próximo ao limiar de percolação. Neste trabalho, porém, não foi feito um estudo detalhado na faixa de concentrações de impurezas próxima à concentração crítica. Investigações mais detalhadas da transição de fase se

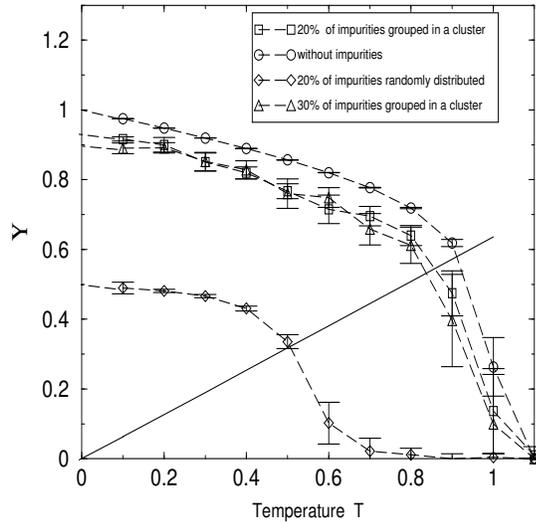


Figura 4.13: Módulo da helicidade em função da temperatura para redes com 20% e 30% de impurezas formando um aglomerado comparados com os resultados com 20% de impurezas aleatoriamente distribuídas e para o sistema sem impurezas.

fazem necessárias para podermos confirmar se a temperatura crítica realmente vai a zero antes da percolação do sistema.

Estas simulações [3, 4] foram realizadas no Laboratório de Computação e Simulação do Departamento de Física da UFJF. Gostaria de agradecer a colaboração dos professores Sidiney, Pablo e Bismarck que colaboraram com grande parte dos cálculos Monte Carlo apresentados neste capítulo. No período que estive em Juiz de Fora pude aprender tais métodos, os quais estou aplicando em recente trabalho sobre o modelo XY-Generalizado que está para ser submetido. Os resultados obtidos por MC [48] vêm confirmando nossas previsões, feitas através da aproximação harmônica auto-consistente, em um trabalho recentemente publicado [9].

Capítulo 5

Conclusões

No capítulo 3 estudamos as interações entre sólitons e impurezas não magnéticas em sistemas antiferromagnéticos isotrópicos. As frequências das possíveis oscilações destes em torno das impurezas foram obtidas considerando-se pequenos deslocamentos. Os compostos de camadas $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2 MX_4$, onde M é um metal de transição, X é Cl ou Br, são sistemas quase clássicos de spin para $M = Mn^{2+}$ e $X = Cl$ (o íon Mn têm spin 5/2). Acreditamos que este composto, quando dopado com íons não magnéticos (como Mg ou Cd), sejam bons candidatos para detecção experimental dos modos de vibração e testar nossa teoria. Pretendemos em trabalhos futuros, através de um modelo fenomenológico que considere os modos vibracionais, calcular as influências destes na função correlação dinâmica. Esta teoria pode ser também relevante em sistemas quânticos de spin [36, 49, 50]. De fato, a conhecida técnica de estados coerentes de spin efetivamente substitui os operadores de spin por vetores clássicos $\vec{S} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ e incorpora as propriedades quânticas através da integral de caminho sobre todas as configurações espaço-temporais de (θ, ϕ) . Importantes sistemas 2D que exibem magnetismo quântico são os supercondutores cupratos a alta temperatura. Em particular, medidas recentes de ressonância magnética nuclear nestes compostos mostraram que a substituição de átomos de Cu^{2+} (Spin 1/2), nos planos $Cu - O$, por impurezas não magnéticas como Zn^{2+} (Spin 0), aumentam as correlações magnéticas em torno das impurezas [36]. Também sugerimos que estes resultados podem ter alguma relevância no efeito Hall quântico, onde texturas de

spins chamadas skyrmions desempenham um papel importante no gás de elétrons bidimensional [50, 51].

No capítulo 4 estudamos as interações vórtice-impureza em sistemas planares ferromagnéticos. Através de métodos analíticos e numéricos, verificamos que há um potencial de interação atrativo entre estes dois "defeitos". Também estudamos através do método de Monte Carlo a influência da presença de impurezas na transição de Kosterlitz-Thouless. Verificamos que com o aumento da concentração de impurezas a temperatura crítica diminui. Porém estudos mais detalhados se fazem necessários, uma vez que os resultados aqui obtidos mostraram que a temperatura crítica vai a zero antes do limiar de percolação, o que está em contradição com os resultados obtidos na Ref. [47]. Nesta referência, não houve um estudo detalhado da transição nesta faixa de concentração de impurezas. Outro ponto de grande importância que merece um estudo detalhado é a origem do pico central na função correlação dinâmica [19, 13, 23, 24], onde a presença de impurezas pode ser decisiva na verificação do real papel desempenhado pelos vórtices. Outra forma possível de verificarmos a influências de vórtices no pico central pode ser através do modelo XY-Generalizado [9]. Neste modelo, cálculos preliminares através do método de Monte-Carlo [48], mostraram que com a variação de um parâmetro de generalização a densidade de vórtices aumenta abruptamente, o que pode modificar a forma do pico central.

Apêndice A

Desenvolvimento de Algumas Equações

A.1 Equações de Movimento

Partindo da densidade hamiltoniana

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

e das equações

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} = -\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla}\phi} \right] + \frac{\partial h}{\partial \phi}, \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta h}{\delta m} = \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla}m} \right] - \frac{\partial h}{\partial m}, \quad (\text{A.3})$$

calculamos:

$$\frac{\partial h}{\partial \phi} = 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial h}{\partial m} = \frac{J}{2} \left[\frac{2m(1-m^2)(\vec{\nabla}m)^2 + 2m^3(\vec{\nabla}m)^2}{(1-m^2)^2} - 2m(\vec{\nabla}\phi)^2 \frac{8}{a^2}m \right], \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla}\phi} = \frac{J}{2} \left[2(1-m^2)(\vec{\nabla}\phi) \right], \quad (\text{A.6})$$

e

$$\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} m} = \frac{J}{2} \left[\frac{2m^2(\vec{\nabla} m)}{1 - m^2} \right]. \quad (\text{A.7})$$

Assim, temos que:

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} \phi} \right] = J \left[(1 - m^2) \nabla^2 \phi - 2m(\vec{\nabla} m) \cdot (\vec{\nabla} \phi) \right] \quad (\text{A.8})$$

e

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} m} \right] = J \left[\frac{2m(1 - m^2)(\vec{\nabla} m)^2 + m^2(1 - m^2)(\nabla^2 m) + 2m^3(\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)^2} \right]. \quad (\text{A.9})$$

Combinando as equações acima, chegamos a:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1 - m^2) \nabla^2 \phi - 2m \vec{\nabla} m \cdot \vec{\nabla} \phi, \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\nabla^2 m}{(1 - m^2)} - \nabla^2 m + \frac{m(\vec{\nabla} \theta)^2}{(1 - m^2)^2} + m(\vec{\nabla} \phi)^2 + \frac{4m}{a^2}. \quad (\text{A.11})$$

Para as demais equações de movimento obtidas no texto o procedimento é basicamente o mesmo, inclusive quando as equações de movimento são obtidas da densidade Lagrangeana. Nos demais casos, também há a presença do potencial devido à impureza, que assim como as demais funções deve ser derivado (nos passos correspondentes as Eqs. A.8 e A.9).

A.2 Energia de um vórtice não deformado

Para calcularmos

$$E_I = \frac{J}{2} \left[\int (\vec{\nabla} \phi_0)^2 d^2 r - \int_{A(\vec{r}_0)} (\vec{\nabla} \phi_0)^2 dA(\vec{r}_0) \right], \quad (\text{A.12})$$

onde $\phi_0 = \arctan(y/x) = \varphi$ representa um vórtice não deformado e $A(\vec{r}_0)$ é a área de um círculo de raio a em torno do ponto \vec{r}_0 , que representa a presença da impureza

não magnética, fizemos o seguinte: em coordenadas cilíndricas (r, φ) , calculamos

$$\vec{\nabla}\phi_0 = \hat{\varphi}\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial\varphi} + \hat{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r} = \frac{1}{r}\hat{\varphi}. \quad (\text{A.13})$$

A partir do resultado acima a primeira integral em A.12 é feita em todo o plano, levando a:

$$\int_{a_0}^d \int_0^{2\pi} (\vec{\nabla}\phi_0)^2 d\varphi r dr = 2\pi \int_{a_0}^d \frac{1}{r} dr = 2\pi \ln\left(\frac{d}{a_0}\right). \quad (\text{A.14})$$

Na integral acima foi introduzido um corte a_0 devido à singularidade da solução vórtice no limite contínuo. Este resultado, quando multiplicado por $J/2$, é exatamente a energia de um vórtice no sistema sem impurezas (E_ν). Para calcularmos a segunda integral em A.12, devemos escrever $|\vec{r}|$ em termos de r_0 , r' e φ' , onde r' e φ' são as coordenadas (cilíndricas) do referencial localizado em \vec{r}_0 . Utilizando as coordenadas descritas acima, podemos escrever $r = \sqrt{r_0^2 + r'^2 - 2r_0r' \cos(\pi - \varphi')} = \sqrt{r_0^2 + r'^2 + 2r_0r' \cos(\varphi')}$, assim temos:

$$\int_{A(\vec{r}_0)} (\vec{\nabla}\phi_0)^2 dA(\vec{r}_0) = \int_0^a \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{r_0^2 + r'^2 + 2r_0r' \cos(\varphi')}} d\varphi' r' dr', \quad (\text{A.15})$$

$$= 2\pi \int_0^a \frac{1}{\sqrt{(r_0^2 + r'^2)^2 - (2r_0r')^2}} r' dr' = \pi \ln\left(1 - \frac{a^2}{r_0^2}\right). \quad (\text{A.16})$$

Finalmente, a energia do vórtice não deformado na presença de uma impureza não magnética, que não está localizada no centro deste é dada por:

$$E_I = E_\nu + \frac{\pi J}{2} \ln\left(1 - \frac{a^2}{r_0^2}\right). \quad (\text{A.17})$$

Referências Bibliográficas

- [1] L.A.S Mól, A.R. Pereira, W.A. Moura-Melo, Phys. Rev. B **67**, 132403 (2003).
- [2] L.A.S. Mól, A.R. Pereira, A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **66**, 052415 (2002).
- [3] A.R. Pereira, L.A.S. Mól, S.A. Leonel, P.A. Coura, B.V. Costa, Phys. Rev. B **68**, 132409 (2003).
- [4] S.A. Leonel, P.Z. Coura, A.R. Pereira, L.A.S. Mól and B.V. Costa, Phys. Rev. B **20**, 104426 (2003).
- [5] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, "Solid State Physics, International Edition", ed. D.G. Crane (Saunders College Publishing, 1976) p. 674,679.
- [6] A. Aharoni, "Introduction to the Theory of Ferromagnetism", (Oxford Science Publications, 1996) p. 36.
- [7] S.R.A. Salinas, "Introdução à Física Estatística", (EDUSP, São Paulo, 1999).
- [8] B.V. Costa, A.R. Pereira, A.S.T. Pires, Phys. Rev. B, **54**, 3019 (1996).
- [9] L.A.S. Mól, A.R. Pereira, W.A. Moura-Melo, Phys Lett. A **319**, 114 (2003).
- [10] S.L. Menezes, M.E. Gouvêa, A.S.T. Pires, Phys. Lett. A **166**, 320 (1992).
- [11] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E. Gouvêa, Phys. Rev. B **51** 16413 (1995).
- [12] H.G. Evertz and D.P. Landau, Phys. Rev. B **54**, 12302 (1996).
- [13] M.E. Gouvêa, G.M. Wysin, A.R. Bishop e F.G. Mertens, Phys. Rev. B **39**, 11840 (1989).
- [14] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, J. Mag. Mag. Mat. **257**, 290 (2003).
- [15] A.R. Prereira, A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **51**, 996 (1995).
- [16] T. Schneider e E. Stoll, in Solitons 129, editado por V. M. Agranovich and A. A. Maradudin (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- [17] F.D.M. Haldane, J. Appl. Phys. **57**, 359 (1985); I. Affleck, Nucl. Phys. B **257**, 397 (1985).

- [18] A.A. Belavin e A.M. Polyakov, JETP Lett. **22**, 245 (1975).
- [19] F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin e Kawabata, Phys. Rev. Lett. **59**, 117 (1987); Phys. Rev. B **39**, 591 (1989).
- [20] B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk, G.M. Wysin, Phys. Rev. Lett., **76** 511 (1996).
- [21] B.A. Ivanov, D.D. Sheka, Phys. Rev. Lett., **72** 404 (1994).
- [22] J.M. Kosterlitz e D.J. Thouless, J. Phys. C, **6**, 1181, (1973).
- [23] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E. Gouvêa, B.V. Costa, Z. Phys. B **89**, 109 (1992).
- [24] A.R. Pereira e J.E.R. Costa, J. Magn. Magn. Mat. **162**, 219 (1996).
- [25] D.P. Landau e R.W. Gerling, J. Magn. Magn. Mat. **104-107**, 843 (1992).
- [26] D.P. Landau e M. Krech, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 179 (1999).
- [27] D.G. Wisler, H. Zabel e S.M. Shapiro, Z. Phys. B **93**, 277 (1994).
- [28] G.M. Wysin e A.R. Völkel, Phys. Rev. B **52**, 7412 (1995).
- [29] G.M. Wysin e A.R. Völkel, Phys. Rev. B **54**, 12921 (1996).
- [30] G.M. Wysin, Phys Rev. B **54**, 15156 (1996).
- [31] N.D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [32] J.M. Kosterlitz e D.J. Thouless, "Progress in Low Temperature Physics", Vol. VII b, ed. D. F. Brewer (North-Holland, Amsterdam, 1977) p. 371.
- [33] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [34] Para uma revisão do método de Monte Carlo veja: D.P. Landau and K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", (Cambridge University Press, New York, 2000); e K. Binder, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", (Springer, New York, 1979).
- [35] B. D. Josephson, Phys. Lett. **1**, 251 (1962).
- [36] J. Bobroff *et al.* Phys. Rev. Lett. **86**, 4116 (2001).
- [37] K. Subbaraman, C.E. Zaspel, J.E. Drumheller, Phys. Rev. Lett. **80**, 2201 (1998).
- [38] C.E. Zaspel, J.E. Drumheller, K. Subbaraman, Phys. Stat. Sol. A **189**, 1029 (2002).
- [39] G.M. Wysin, Phys Rev. B **63**, 094402 (2001).
- [40] G.M. Wysin, Phys. Rev. B **68**, 18441 (2003).

- [41] C.E. Zaspel, C.M. McKennan, S.R. Snarick, Phys. Rev. B **53**, 11317 (1996).
- [42] H. Kawamura, M. Kikuchi, Phys. Rev. B **47**, 1134 (1993).
- [43] H. Weber, P. Minnhagen, Phys. Rev. B **37**, 5986 (1988).
- [44] P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
- [45] J.M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).
- [46] L.M. Castro, A.S.T. Pires, J.A. Plascak, J. Mag. Mag. Mat. **248**, 62 (2002).
- [47] B. Berche, A.I. Fariñas-Sánchez, Yu. Holovatch, R. Paredes V., Eur. Phys. J. B **36**, 91 (2003).
- [48] L.A.S. Mól, A.R. Pereira, trabalho em andamento.
- [49] S.I. Belov, B.I. Kochelaev, Solid State Commun. **103**, 249 (1997).
- [50] A.V. Ferrer, A.O. Caldeira, Phys. Rev. Lett. **86**, 4116 (2001).
- [51] S.L. Sondhi, A. Karlhede, S.A. Kivelson, E.H. Rezayi, Phys. Rev. B **47**, 16419 (1993).

Anexo

Trabalhos Publicados

Oscillating solitons pinned to a nonmagnetic impurity in layered antiferromagnets

L. A. S. Mól and A. R. Pereira*

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 36571-000 Minas Gerais, Brazil

W. A. Moura-Melo

Departamento de Ciências Básicas, Faculdades Federais Integradas de Diamantina, Diamantina, 39100-000 Minas Gerais, Brazil

(Received 9 December 2002; published 3 April 2003)

We argue that an oscillatory motion of impurity-pinned solitons may occur in layered antiferromagnetic compounds. The characteristic frequencies of these modes, that may be detected by resonance or inelastic neutron scattering, are estimated analytically and depend on the soliton sizes and types.

DOI: 10.1103/PhysRevB.67.132403

PACS number(s): 75.10.Hk, 75.50.Ee

In recent years, there has been much interest in the static and dynamic properties of layered compounds. These materials are well known to exhibit quasi-two-dimensional (2D) magnetism at low temperatures and, in addition to the possibilities in technological applications, they have been useful in testing theories pertinent to low-dimensional systems. The 2D behavior of these structures arises because the ratio of the interlayer coupling J_z to intralayer coupling J is of the order $J_z/J \approx 10^{-3} - 10^{-5}$. The 2D effects can be experimentally observed in a narrow temperature interval just above the ordering temperature. The theory of these systems is contained in the Heisenberg Hamiltonians (isotropic and anisotropic). The isotropic Heisenberg magnets in two dimensions are described by the Hamiltonian $H = \pm J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, where \vec{S}_i is the spin located at site i , the summation is taken over the nearest-neighbor sites on a square lattice, and the $-$ and $+$ signals represent ferromagnetic and antiferromagnetic coupling constants respectively. The continuum version of this Hamiltonian is given by the 2D $O(3)$ nonlinear σ model, which has long been of interest also to particle theorists because of its strong analogy with four-dimensional Yang-Mills theory. For Heisenberg antiferromagnet (AFM), the nonlinear σ model is described in terms of the Néel state and gives the antiferromagnetic long-wavelength fluctuations in the limit of zero temperature. It is represented by the following Hamiltonian

$$H_\sigma = \frac{1}{2} J \int [(\partial_\mu \vec{n}) \cdot (\partial^\mu \vec{n})] d^2x, \quad \mu = 1, 2, \quad (1)$$

where \vec{n} denotes the Néel unit vector ($n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$) characterizing the direction of the sublattice magnetization of the antiferromagnet. It is also well known that this model supports interesting solitonlike solutions, obtained by Belavin and Polyakov¹ using topological considerations. In terms of the conformal representation $w = (n_1 + in_2)/(1 - n_3)$, which is simply the stereographic projection of the Néel vector onto the complex plane, the Belavin-Polyakov soliton (BV-soliton) located at the origin and with unitary topological charge is expressed as $w_s = z/R$, where $z = x + iy$ and R is the soliton size. It implies that the third Néel vector component n_3 is given by

$$n_3 = \frac{|z|^2 - R^2}{|z|^2 + R^2}. \quad (2)$$

Furthermore, it is useful to change variables from (x, y) to $[n_3, \phi = \tan^{-1}(y/x)]$, in terms of which we can express the ratio $n_2/n_1 = \tan \phi$. Qualitatively, the configuration is radial, pointing down at the origin and up at infinity. The energy of these excitations is found to be independent of the soliton size due to the scale invariance of the nonlinear σ model and it is given by $E_s = 4\pi J$. The significance of these nonlinear excitations for 2D magnets was recognized early in connection with the critical properties of these systems. For example, it was shown that the existence of large localized excitations will cause the correlation length to remain finite at any nonzero temperature.¹ Considering the dynamical properties, the translation motion of this structure may be responsible for a central peak in the out-of-plane dynamic correlation function.^{2,3} Recently, Zaspel *et al.*^{4,5} have shown that the Belavin-Polyakov solitons dominate the thermodynamics in the fluctuation region, immediately above the Néel temperature of a large class of nearly classical 2D antiferromagnets. Besides, these authors^{6,7} have also shown that the introduction of a very small amount of nonmagnetic impurities into the magnetic sites of a classical 2D antiferromagnet creates a new type of static (impurity-pinned) soliton that affects the Arrhenius, $e^{-E_s/T}$, temperature-dependent EPR linewidth by drastically changing the parameter E_s . Using an approach on a discrete lattice, they considered the spin vacancy located at the soliton center and obtained two different impurity solitons (the P -soliton and the I -soliton), which were detected in the layered antiferromagnet $(C_3H_7NH_3)_2M_xMn_{1-x}Cl_4$ through EPR measurements.^{6,7} The P -soliton has the same structure of the BV-soliton but without a spin at its center, which results in a vortex singularity at the center. The I -soliton has smaller size and energy than the P -soliton, so it also has a configuration slightly different from the P -soliton. In this paper, we argue that these solitons oscillate on the static spin vacancy and estimate the frequencies of these oscillatory modes of solitons analytically. It is suggested that this effect may be observed in electron-spin-resonance or inelastic neutron-scattering experiments.

In a recent paper, Pereira and Pires⁸ considered the problem of a soliton interacting with a nonmagnetic impurity in the continuum limit by modifying Hamiltonian (1) introducing a nonmagnetic impurity potential as follows:

$$H_I = \frac{1}{2} J \int [(\partial_\mu \vec{n}) \cdot (\partial^\mu \vec{n})] V(\vec{r}) d^2x, \quad \mu = 1, 2, \quad (3)$$

where $V(\vec{r})=1$ if $|\vec{r}-\vec{d}|\geq a$, and $V(\vec{r})=0$ if $|\vec{r}-\vec{d}|<a$. Here, the impurity is localized at position \vec{d} from the origin, and a is the lattice constant. This lack of magnetic interaction inside the circle of radius a , means that a spin located at \vec{d} was removed from the lattice. From now, we will consider the nonmagnetic impurity localized at the origin $\vec{d}=(0,0)$. If the soliton center coincides with the impurity center, this field theory reproduces the two soliton solutions of Refs. 6, 7 and still gives the sizes, energies, and configurations of these solitons in an analytical way. For the P -soliton, almost entire space is mapped onto the plane, but part of the spin space sphere around the origin is not included in the mapping. It means that the stereographic projection of the Néel vector onto the complex plane is perfect for $r=|z|\geq a$, so we can write the P -soliton configuration as

$$\frac{n_{2P}}{n_{1P}} = \tan \phi; \quad n_{3P} = \begin{cases} 0 & \text{for } r < a, \\ n_3 & \text{for } r \geq a. \end{cases} \quad (4)$$

For the I -soliton, the mapping is smoothly deformed, leading to the following configuration:

$$\frac{n_{2I}}{n_{1I}} = \tan \phi; \quad n_{3I} = \begin{cases} 0 & \text{for } r < a, \\ n_3 + b(R)(1 - n_3^2) & \text{for } r \geq a, \end{cases} \quad (5)$$

where the function $b(R)$ was obtained minimizing the energy of excitation (5) for each value of the soliton size and it is given in the interval⁸ $0 < b(R) \leq 1/2$. The subscript P and I refer to the topological and impurity-centered solitons (P - and I -solitons), respectively. The energy of these two solitons depends on R with the I -soliton energy smaller than the P -soliton energy, but as $R \rightarrow \infty$, $E_I \rightarrow E_P \rightarrow 4\pi J$. This continuum theory permits also to compare the solitons size ($R_I = [(1 + 4b^2)^{1/2} - 2b]R$, $R_P = R$) showing that the I -soliton is smaller than the P -soliton.⁸

The field theory given by Eq. (3) still shows that, if the soliton center is displaced in relation to the nonmagnetic impurity center, an effective interaction between the soliton and impurity that is attractive at short range is induced. If the soliton center and the spin vacancy center are separated by a distance r_0 , the system energy can be approximated by⁸

$$E_{r_0 > a} \cong E_s \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{Ra}{r_0^2 + R^2} \right)^2 + F_-(r_0, R) - F_+(r_0, R) \right], \quad (6)$$

where

$$F_{\pm}(r_0, R) = \frac{R^2 a (r_0 \pm a)^2}{[(r_0 \pm a)^2 + r_0^2]^{1/2} [(r_0 \pm a)^4 - R^4]}. \quad (7)$$

Equation (6) shows that, for $r_0 < R$, the soliton energy decreases as the soliton center approximates to the impurity. It indicates that there is a short-range attractive well with length scale on the order of R . On the other hand, if the soliton center is localized at distance $r_0 > R$ from the spin vacancy, the effective potential between the soliton and the nonmagnetic impurity is repulsive. However, although ex-

pression (6) correctly suggests that it is energetically favorable for the soliton to nucleate about the spin vacancy, this equation is valid only for separations larger than one lattice spacing⁸ ($r_0 > a$). In fact, in the limit that the separation vanishes ($r_0 \rightarrow 0$), the soliton configuration changes to either the P -soliton or I -soliton configuration, which are radially symmetric and represent local minima of energy.⁸ Then, if there is a spin vacancy exactly at the soliton center, Eq. (6) should give the values $E_I(R)$ or $E_P(R)$, depending on which soliton was formed (the I - or P -soliton). Hence, in the limit $r_0 \rightarrow 0$, we use an expansion of the energy around the bottom of the well as follows

$$E_{r_0 \rightarrow 0}(r_0, R) \cong E_{\alpha}(R) + \frac{1}{2} r_0^2 \left(\frac{d^2 E}{dr_0^2} \right)_{r_0=0} + \frac{1}{3} r_0^3 \left(\frac{d^3 E}{dr_0^3} \right)_{r_0=0} + \dots, \quad (8)$$

where $\alpha = P$ or I represents one of the two possible solitons. For small displacements, we can neglect the high-order terms in the expansion. The complete function $E(r_0, R)$ is likely to be a smooth interpolation between the limit (8) and Eq. (6), with the transition between these expressions occurring at $r_0 \approx a$. Keeping only the harmonic term in Eq. (8), we get

$$\left(\frac{d^2 E}{dr_0^2} \right)_{r_0=0} = K = 2 \frac{E_s - E_{\alpha}(R)}{a^2} + 2E_s \left[\frac{R^2}{\sqrt{5[R^4 - (2a)^4]}} - \frac{R^2}{4(R^2 + a^2)^2} \right], \quad (9)$$

where $R > 2a$. Equation (8) is interpreted as follows: the first term is just the rest mass of the P - or I -soliton and the remaining terms may be attributed to the interaction potential energy $U(r_0)$ of the impurity-soliton system, as a function of their separation r_0 . This attractive interaction at short-range suggests that, in general, soliton solutions near nonmagnetic impurities may not be static. Spinless atoms may exert some force on the magnetic solitons, in addition to distorting them, and cause them to accelerate. If the force obtained from a potential agrees with the mass times acceleration of the soliton, then, due to the form of the effective potential in Eq. (8), which is an attractive well, we expect that the soliton center may have an oscillatory motion on the impurity. This Newtonian behavior may really happen to magnetic nonlinear excitations. For example, in 2D easy-plane magnetic systems, Wysin^{9,10} has shown that vortex excitations have motions that are the same as those predicted from a simple Newtonian dynamical equation of motion for the vortex center, involving a force \vec{F} and effective mass M , i.e.,

$$\vec{F} = M \frac{d\vec{v}}{dt}, \quad (10)$$

where \vec{v} is the velocity of the vortex center. In this case, the mass depends on the system size since a vortex is not a

localized object. But, if the anisotropy is weak, the mass of the out-of-plane AFM vortices may actually reach a finite limit for large system size. Besides, it was shown that for a simple harmonic motion, the mass was found as

$$M = \frac{K}{\omega_0^2}, \quad (11)$$

where ω_0 is the translation mode frequency and K is the spring constant.^{9,10} Here, we assume that the results of Ref. 9 extrapolate, with appropriate modifications, to the isotropic case, i.e., to the Lorentz-invariant $O(3)$ nonlinear σ model, which represents the isotropic AFM. Thus, since the soliton is a localized structure, the rest mass would be expressed as¹¹ $M_\alpha = E_\alpha(R)/c^2$, where $c = 2JSa/\hbar$ is the velocity of the long-wavelength spin waves ($\alpha = P$ or I).

As it can be seen from Eq. (8), a small displacement r_0 of the P - or I -soliton center away from the exact impurity center (which is, in our model, the center of the circle of radius a) involves an energy increase. It is clear that these off-centered solutions are true bound states, because their energy is smaller than the free soliton mass. Any perturbation of the soliton will make it drift to the center of the well. The off-centered solutions are unstable. In fact, for displacements much less than the lattice spacing, the short-range potential well is close to harmonic, and can be described by an effective linear force acting on the soliton. The effective force constant $K = (d^2E/dr_0^2)_{r_0=0}$ can be approximated by Eq. (9). Then, the frequencies of the oscillations of the solitons in a trapped state may be estimated analytically. Since this elastic constant is a function of $E_\alpha(R)$, then, to determine the frequencies of the solitons oscillation modes, an analytical expression for the rest energy of the pinned-solitons would be useful. In Ref. 6, it was shown that the energies of the two solitons can be written through the same expression $E_\alpha(R) = E_s R^2 / (R^2 + a_\alpha^2)$, but with different a_α 's ($a_p = 0.23a$ for the P and $a_I = 1.01a$ for the I -soliton). Using these results, the solitons oscillation mode frequencies on a nonmagnetic impurity can be estimated as

$$\omega_\alpha = \sqrt{2} \frac{c}{a} \left[\frac{a_\alpha^2}{R^2} + (R^2 + a_\alpha^2) \left(\frac{a^2}{\sqrt{5[R^4 - (2a)^4]} - \frac{a^2}{4(R^2 + a^2)^2}} \right) \right]^{1/2}. \quad (12)$$

Figure 1 shows the frequencies for the two solitons as a function of their sizes. Of course, large solitons oscillate slower than small solitons. As a consequence, in general, P -solitons oscillate slower than I -solitons.

The analysis of the spectrum of small-disturbance (the mesons of the theory or magnons) on a nonlinear excitation always exhibits zero-frequency modes $\omega = 0$, whenever the theory possesses a continuum symmetry. Although the soliton's energies (6) [or (8)] are invariant under spatial rotations around the z axis (which for the hedgehog is equivalent to an isorotation around the internal three axis), they are not invariant under a translation in the x - y plane. In the presence

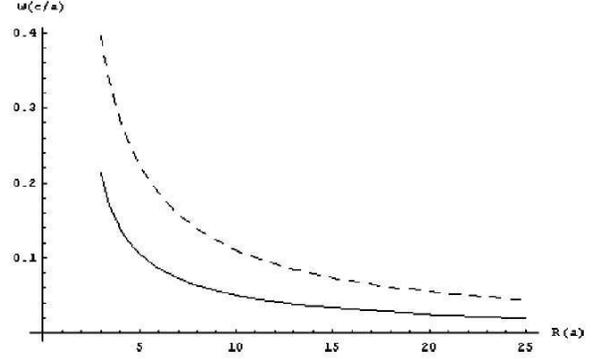


FIG. 1. Oscillation frequencies as a function of the soliton size. Solid curve is for P -solitons and dashed curve is for I -solitons.

of a nonmagnetic impurity, there is no possibility of a soliton to move away from a position by translations and keeping E unchanged. The impurity breaks the translational symmetry of the system, and thus, there are no zero-frequency modes associated to translations on the x - y plane (translation zero-modes). The oscillatory modes given by Eq. (12), can be considered to be driven by the force caused by the lattice defect (the spin vacancy), which can be evaluated independently of the spin-wave spectrum. To see this, we consider the change of the out-of-plane component of the Néel vector n_3 as the soliton center moves for a small displacement $r_0 \ll a$ from the impurity center. Since the soliton oscillates on the nonmagnetic impurity, we write $r_0 = A \sin(\omega_\alpha t)$, where A is the oscillation amplitude assumed to be small. Then, the time-dependent difference $\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = n_{3\alpha}(r_0) - n_{3\alpha}(0)$ gives the change of the out-of-plane component of the Néel vector as the soliton (P or I) oscillates. This difference can be easily evaluated. After linearizing in the small quantity, we obtain $\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) \approx \text{Im}[A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t)]$. This expression shows that, if ω_α were zero, the function $n_{3\alpha}(A^\mu) = n_{3\alpha}(0) + A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha}$ would describe a soliton that had been uniformly translated on the plane by a small amount $A^\mu = (A^1, A^2)$ (translational mode). However, our solution has a nonzero frequency ω_α , which implies in $n_{3\alpha}(A^\mu) = n_{3\alpha}(0) + A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t)$ leading to an oscillatory motion for the soliton. These results can have a different interpretation. Here, the translational modes can be identified by viewing the motions of the spins that result when a given spin-wave eigenfunction is added to the original soliton structure. Then, the small-disturbance wave form $\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = A^\mu \partial_\mu n_{3\alpha} \times \exp(-i\omega_\alpha t)$ may also be viewed as out-of-plane spin waves with well-defined frequency and angular momentum about the static soliton structure $n_{3\alpha}$, in which the center is localized exactly at the impurity center. It means that, instead of thinking about an oscillating soliton, we can imagine a stopped soliton surrounded by these magnons. In fact, using polar coordinates (r, ϕ) and supposing that $A^\mu = (0, A)$, we have

$$\epsilon_\alpha(\vec{r}, t) = \text{Im} \left(\frac{\partial n_{3\alpha}}{\partial y} e^{-i\omega_\alpha t} \right) = \text{Im} \left(\frac{4AR^2 r}{(r^2 + R^2)^2} e^{i(m\phi - \omega_\alpha t)} \right), \quad (13)$$

where $m = \pm 1$ is the angular momentum channel. In this interpretation, the above expression gives the time-dependent deformation of the static soliton. In particular, if one could observe the spin motions around the impurity (or in the central core of the soliton), their instantaneous directions could be used to estimate the position of the soliton center. Equation (13) shows that the small-disturbance amplitude goes to zero as $r \rightarrow \infty$ and hence, it describes magnon modes, which are localized at a soliton. The soliton-impurity interaction may induce magnon local modes around the spin vacancy. These magnon local modes on the nonmagnetic impurity have frequencies that depend on the soliton type (P or I) and size. In a discrete lattice, the possible sizes R are given by $R_l = la$ (l is a positive integer) and then, the possible modes have also a discrete spectrum, whose frequencies are

$$\omega_{\alpha,l} = \sqrt{2} \frac{c}{a} \left[\frac{\delta_\alpha^2}{l^2} + (l^2 + \delta_\alpha^2) \left(\frac{1}{\sqrt{5}(l^4 - 16)} - \frac{1}{4(l^2 + 1)^2} \right) \right]^{1/2}, \quad (14)$$

where δ_α is a number ($\delta_p = 0.23$ for the P -soliton and $\delta_I = 1.01$ for the I -soliton). Note that $l \geq 3$, since the vacancy at the soliton center forbids the formation of solitons with size smaller than $3a$ in a discrete lattice. For $l=3$, $\omega_{p,3} = 0.302c/a$ and $\omega_{I,3} = 0.561c/a$, while for $l=4$, $\omega_{p,4} = 0.197c/a$ and $\omega_{I,4} = 0.402c/a$, which typically have values (10^{11} – 10^{13}) s^{-1} . It is expected that local modes with well-defined frequencies are induced around nonmagnetic impurities via soliton. Resonances at the characteristic frequencies can be in principle observed in electron-spin-resonance or inelastic neutron-scattering experiments. Since these modes can occur only if P - or I - solitons are centered on the nonmagnetic impurity, resonance and neutron-scattering measurements provide some methods to experimentally detect this effect and consequently, these two pinned solitons.

Equation (12) keeps certain similarities with the results obtained by Wysin^{9,10} for vortices in easy-plane magnets. The spin configuration of a vortex (or the magnetization inhomogeneity) extends to the limits of the system, causing its inertia against motion inside the system to depend on the system size. Hence, the effective vortex mass increases as

the square of the system radius and the translational mode frequencies diminish as the reciprocal system size.^{9,10} In our case, since the magnetization inhomogeneity depends on the soliton radius, the translational frequencies diminish as the reciprocal soliton size.

The above results are valid only for small displacements satisfying $r_0 \ll a$. For large displacements, in which the soliton has to move for more than one lattice spacing, $r_0 > a$, nonlinear terms are present in the interaction force and besides, in real magnetic materials, discreteness effects must be considered. These effects can be described through a periodic pinning potential. These calculations are out of the scope of this paper.

Layered magnetic compounds of the form $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2MX_4$, where M is a transition metal ion and X is Cl or Br, are nearly-classical spin systems for $M = Mn^{2+}$ and $X = Cl$ (the Mn ion has a spin $\frac{5}{2}$). Hence, under nonmagnetic doping ions (such as Mg or Cd), these materials are good candidates to experimentally detect these modes and testing the theory. Finally, we would like to point out that our theory may also have some relevance to quantum spin systems.^{12–14} In fact, the well-known technique of spin coherent states effectively replaces spin operators by classical vectors $\vec{S} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ and incorporates the quantum features by means of the path integral over all space-time configurations of (θ, ϕ) . Important 2D systems exhibiting quantum magnetism are the high- T_c cuprate superconductors. In particular, concerning the problem of impurities, recent nuclear-magnetic-resonance measurements involving the high- T_c cuprate superconductors, have shown that a substitution of the spin- $\frac{1}{2}$ Cu^{2+} in the Cu-O plane by a strong nonmagnetic impurity, such as spin-0 Zn^{2+} , enhances the antiferromagnetic correlations around the impurity.¹³ We also suggest that these results have some relevance in the quantum Hall effect, where spin textures called skyrmions play important roles in the two-dimensional electron gas.^{14,15}

This work was partially supported by CNPq (Conselho Nacional para o Desenvolvimento da Pesquisa) Brazil.

*Corresponding author. Electronic address: apereira@mail.ufv.br

¹A.A. Belavin and A.M. Polyakov, Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **22**, 503 (1975) [JETP Lett. **22**, 245 (1975)].

²C.E. Zaspel, Phys. Rev. B **48**, 926 (1993).

³A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E. Gouva, and B.V. Costa, Z. Phys. B: Condens. Matter **89**, 109 (1992).

⁴C.E. Zaspel, T.E. Grigereit, and J.E. Drumheller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4539 (1995).

⁵C.E. Zaspel and J.E. Drumheller, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 3648 (1996).

⁶K. Subbaraman, C.E. Zaspel, and J.E. Drumheller, Phys. Rev. Lett. **80**, 2201 (1998).

⁷C.E. Zaspel, J.E. Drumheller, and K. Subbaraman, Phys. Status

Solidi A **189**, 1029 (2002).

⁸A.R. Pereira and A.S.T. Pires, J. Magn. Magn. Mater. **257**, 290 (2003).

⁹G.M. Wysin, Phys. Rev. B **54**, 15 156 (1996).

¹⁰G.M. Wysin, Phys. Rev. B **63**, 094402 (2001).

¹¹A.R. Pereira and A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **51**, 996 (1995).

¹²S.I. Belov and B.I. Kochelaev, Solid State Commun. **103**, 249 (1997).

¹³J. Bobroff *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4116 (2001).

¹⁴A.V. Ferrer and A.O. Caldeira, Phys. Rev. B **61**, 2755 (2000).

¹⁵S.L. Sondhi, A. Karlhede, S.A. Kivelson, and E.H. Rezayi, Phys. Rev. B **47**, 16 419 (1993).

Planar vortex in two-dimensional XY ferromagnets with a nonmagnetic impurity potential

L. A. S. Mól and A. R. Pereira

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36571-000 Viçosa, Minas Gerais, Brazil

A. S. T. Pires

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Caixa Postal 702, 30123-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

(Received 3 April 2002; published 16 August 2002)

Using a model of nonmagnetic impurity potential, we have examined the behavior of planar vortex solutions in the classical two-dimensional XY ferromagnets in the presence of a spin vacancy localized out of the vortex core. Our results show that a spinless atom impurity gives rise to an effective potential that repels the vortex structure.

DOI: 10.1103/PhysRevB.66.052415

PACS number(s): 75.10.Hk, 75.30.Hx

The easy-plane Heisenberg ferromagnet in two dimensions and continuum limit supports nonlinear pseudoparticles with a vortex structure. These excitations are of paramount importance in the understanding of the static and dynamical properties of magnetism. For example, the vortex unbinding is responsible for a phase transition known as the Kosterlitz–Thouless transition.¹ Besides, these may be responsible for a central peak in the dynamical correlation function^{2–5} observed in Monte Carlo simulations^{6,7} and experiments.⁸ The simplest vortex configuration, referred as the planar vortex, occurs when the anisotropy is large, resulting in spin confinement to the lattice plane.^{9,10}

The interaction of vortices with spatial inhomogeneities is of considerable importance from both the purely theoretical and applied points of view. Impurities and/or defects are present even in the purest of material samples and their effect on the motion or structure of nonlinear excitations must be considered when the dynamics or configurations of such solutions are important in the problem at hand. Recently, Zaspel, McKennan, and Snaric¹¹ investigated, using the discrete lattice, the instability of planar vortices and concluded that these will be stable at a larger range of anisotropies if there is a nonmagnetic impurity such as Cd or Zn at the center of the vortex. In this paper we study, using the continuum approximation, the interaction between a planar vortex and a nonmagnetic impurity localized out of the vortex center. To this end, we start defining the classical XY ferromagnetic model, which is given by the following Hamiltonian:

$$H = -J \sum_{m,n} (S_m^x S_n^x + S_m^y S_n^y), \quad (1)$$

where J is a coupling constant, the classical spin vector has three components $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$, and the summation is taken over the nearest-neighbor square lattice sites. This model is one of the most studied in statistical physics and has been found to describe a wide variety of systems with complex scalar order parameters, including superconducting films, Josephson junction arrays, and superfluid He⁴ films. The choice of the XY model is arbitrary for our purpose, since the results can be used, without modifications, to any other model with XY symmetry such as the classical easy-

plane ferromagnetic model. It is convenient to parametrize the spin field in terms of spherical coordinates as follows: $\mathbf{S} = S(\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, \sin \theta)$. By a straightforward generalization of arguments used to obtain the continuum limit of Heisenberg Hamiltonians in the case of one dimension,¹² we can write the continuum version for the Hamiltonian (1) as

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r \left[\frac{m^2 (\nabla \mathbf{m})^2}{1-m^2} + (1-m^2) (\nabla \phi)^2 + \frac{4}{a_0^2} m^2 \right], \quad (2)$$

where $m = \sin \theta$, a_0 is the lattice constant, and we have taken $S^2 = 1$. One can obtain the motion equations, $\dot{m} = \delta H / \delta \phi$, $\dot{\phi} = -\delta H / \delta m$, for this field theory in the usual way using the pair of canonically conjugated variables m and ϕ .

Now, consider that the system contains a nonmagnetic impurity concentration in the plane. For simplicity, we consider only one nonmagnetic atom present. If we remove a spin from the lattice, the nearest neighbors of that spin will have a coordination number of 3, instead of a bulk-spin coordination number of 4. Therefore, such boundary spins would have larger fluctuations than the bulk spins and it is conceivable that the nonlinear configurations such as a vortex, would preferentially nucleate around this vacancy. In fact, in this circumstance, the vortex energy is lowered, since the nonmagnetic impurity at the vortex center will remove the nearest-neighbor exchange bonds at the impurity in a radially symmetric way without modifying the symmetric configuration of the vortex, while its energy in the region without the impurity remains the same. However, the vortex energy increases logarithmically with the system size L , and in an infinitely extended system, this energy would diverge as $L \rightarrow \infty$ so that we should not expect that a single vortex could nucleate around the spin vacancy. In fact, vortices are always created in pairs of vortex-antivortex having finite energy and separated by a few lattice constants. Then, if one member of the pair nucleates around the impurity, the other member will be near it. Since a vortex pair does not have cylindrical symmetry, the energy of this system does not necessarily decrease, although there are less nearest-neighbor exchange bounds, because the spin vacancy may deform the pair configuration, increasing its energy. Nevertheless, the interest of this paper is to study the behavior of a vortex in

the system that is not nucleated at the position of the vacancy. In this case things must change considerably because the spin vacancy may also deform the single vortex configuration. To take into account the nonmagnetic impurities, we consider the following modified XY ferromagnetic Hamiltonian in the continuum limit:

$$H_I = \frac{J}{2} \int d^2r \left[\frac{m^2 (\nabla m)^2}{1-m^2} + (1-m^2) (\nabla \phi)^2 + \frac{4}{a_0^2} m^2 \right] V(\mathbf{r}), \quad (3)$$

where $V(\mathbf{r})$ is a nonmagnetic impurity potential given by

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{if } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \geq b \\ 0 & \text{if } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| < b \end{cases}. \quad (4)$$

Here, the impurity is centralized at the point \mathbf{r}_0 and has the form of a circle with diameter equal to $2b$. There is a circular region in the plane, around the point \mathbf{r}_0 , without any magnetic interaction. A related model was proposed to investigate the role played by vortex pinning in modifying the predictions of the Kosterlitz–Thouless theory for thin helium films.¹⁴

Substituting Eq. (3) into the equations of motion we get

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \cos \theta V(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi - 2 \sin \theta V(\mathbf{r}) \nabla \theta \cdot \nabla \phi \\ &\quad + \cos \theta \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \nabla \phi, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\tan \theta \sin \theta V(\mathbf{r}) \nabla^2 \theta - \sin \theta V(\mathbf{r}) (\nabla \theta)^2 + \sin \theta V(\mathbf{r}) \\ &\quad \times [4/a_0^2 - (\nabla \phi)^2] - \tan^2 \theta \sin \theta \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \nabla \theta. \end{aligned} \quad (6)$$

Our interest is in planar and static solutions in the presence of this nonmagnetic impurity potential. Hence, we take $\partial \theta / \partial t = \partial \phi / \partial t = 0$ and $m = \sin \theta = 0$ in Eqs. (5) and (6), obtaining only one and simpler equation to be solved

$$V(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi = -\nabla V(\mathbf{r}) \cdot \nabla \phi. \quad (7)$$

One point to note in this equation is its dependence on the spin field around the position of the impurity. If the vacancy is localized in a region where the spin configuration consists of aligned spins, like a domain with all spins aligned along the same direction ($|\nabla \phi| \approx 0$), the spin field practically does not feel the presence of the impurity. However, an impurity placed in a region where the spin directions vary considerably ($|\nabla \phi| \gg 1/a_0$) may have a strong coupling with the spin field and may modify the initial spin configuration for large distances.

In polar coordinates, the vectors \mathbf{r} and \mathbf{r}_0 are written as (r, φ) and (r_0, φ_0) , respectively. To solve Eq. (7), we note first that the gradient of the impurity potential can be expressed as

$$\begin{aligned} \nabla V(\mathbf{r}) &= a_0 [\hat{r} \cos(\alpha - |\varphi - \varphi_0|) \\ &\quad + \hat{\varphi} \sin(\alpha - |\varphi - \varphi_0|)] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \mathbf{b}), \end{aligned} \quad (8)$$

where δ is the Dirac delta function and α is the angle that the vector \mathbf{b} , with origin at the point \mathbf{r}_0 and end at a point on the circumference of the potential, makes with the vector \mathbf{r}_0 . As we are interested in a local impurity with atomic dimensions, we make $b \rightarrow 0$ in the continuum limit (to be more precise, we should make $b \rightarrow a_0$) indicating that the impurity is an atom (such as Zn, Mg, or Cd, for example). In this case, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_0$, $\varphi \rightarrow \varphi_0$ and we rewrite Eq. (8) as

$$\nabla V(\mathbf{r}) \approx a_0 [\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (9)$$

where we can interpret $\cos(\alpha)$ and $\sin(\alpha)$ as anisotropic coupling constants. This coupling depends on the direction one looks, if the observer center is placed on the impurity position.

Considering Eq. (7) with $V(\mathbf{r}) = 1$ at the left side (this fails only at the point \mathbf{r}_0 , since the impurity is local) and supposing that the vortex structure is modified by the presence of the nonmagnetic impurity, we write $\phi = \phi_0 + \phi_1$, where $\phi_0 = \arctan(y/x)$ is the traditional single vortex solution for a vortex with its center localized at the origin and ϕ_1 is the deformation caused by the spinless impurity localized at \mathbf{r}_0 . Thus, Eq. (7) with the above considerations can be written as

$$\begin{aligned} \nabla^2(\phi_0 + \phi_1) &= -a_0 \nabla(\phi_0 + \phi_1) \cdot [\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)] \delta(\mathbf{r} \\ &\quad - \mathbf{r}_0). \end{aligned} \quad (10)$$

Using the fact that $\nabla^2 \phi_0 = 0$ and taking $\nabla(\phi_0 + \phi_1) \equiv \nabla \phi_0 = (1/r) \hat{\varphi}$ near the point \mathbf{r}_0 , Eq. (10) can then be approximated by

$$\nabla^2 \phi_1 = -\frac{a_0}{r_0} \sin(\alpha) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (11)$$

or

$$\nabla^2 \left[\frac{-2\pi r_0 \phi_1}{a_0 \sin(\alpha)} \right] = 2\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (12)$$

This is easily solved using the fact that in two dimensions, $\nabla^2 \ln(r) = 2\pi \delta(\mathbf{r})$. We get

$$\phi_1(\mathbf{r}) = -\frac{a_0 \sin(\alpha)}{2\pi r_0} \ln \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a_0} \right). \quad (13)$$

Writing the anisotropic coupling constant along the α direction in terms of r and φ , the vortex structure with its center at the origin in the presence of a nonmagnetic impurity localized at \mathbf{r}_0 is given by

$$\phi = \arctan(y/x) - \frac{a_0}{2\pi r_0} \frac{r \sin(\varphi - \varphi_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \ln \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a_0} \right). \quad (14)$$

The configuration of this deformed vortex is shown in Figs. 1 and 2. Although the continuum theory cannot be applied near the vortex core, in Fig. 1 we have considered the impurity one lattice spacing from the vortex center just to emphasize the vortex deformation as the vortex core approaches the impurity. We notice that if r_0 is large (the vortex center is far

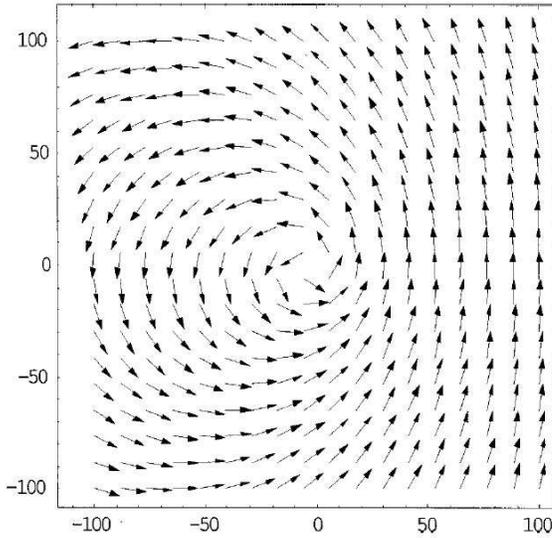


FIG. 1. Structure of a single vortex with center at (0,0) in the presence of a nonmagnetic impurity located at the site (1,0). Since the nonmagnetic impurity is near the vortex center, the vortex experiences a strong effect of the spinless atom impurity.

away from the spin vacancy) the vortex practically keeps the same original form, but for small r_0 the vortex configuration suffers a severe modification, mainly in the region in which the impurity is located. This is due to the fact that the gradient of the spin field is small in the region of the impurity if it is far away from the vortex center and large in the region of the impurity if it is near the vortex center. When an impurity is near the vortex core, Eq. (14) implies (as it can also be

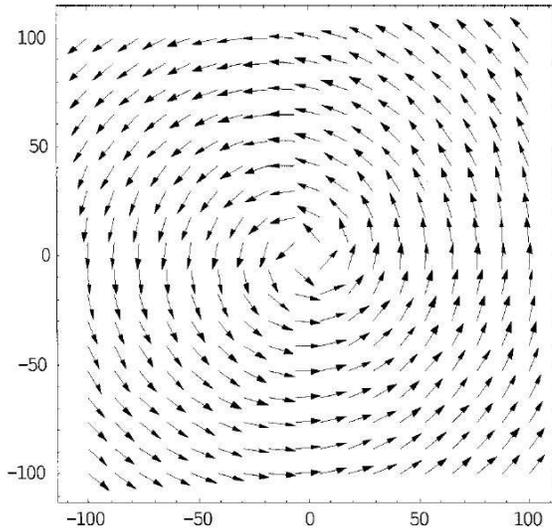


FIG. 2. Here, the impurity is located at (5,0). Note that the vortex structure is almost perfect, indicating that a vacancy put away from the vortex core has small influence on the vortex structure.

seen partially in Fig. 1) that a large domain with all spins aligned along the direction perpendicular to \mathbf{r}_0 will be formed in a region located after the impurity position \mathbf{r}_0 .

In order to calculate the energy of this planar solution we consider the Hamiltonian (3) with $m=0$, obtaining $E_1 = \int (\nabla\phi)^2 V(\mathbf{r}) d^2r$. As we have seen, the field ϕ describes a single vortex at the origin in the presence of one impurity at distance r_0 away. The effective potential experienced between the two defects (one defect in the spin field and the other in the lattice structure) is defined as

$$U_{\text{eff}}(r_0) = E_I - E_v, \quad (15)$$

where $E_v = \pi J \ln(L/a_0)$ is the energy of a single vortex in the absence of impurities. Making suitable approximations, we find that such an effective potential results in a repulsive central interaction with a dominant term given by

$$U_{\text{eff}}(r_0) \cong \frac{a_0^2 E_v^3}{24\pi^4 J^2} \frac{1}{r_0^2}. \quad (16)$$

We see, therefore, that the presence of a nonmagnetic impurity increases the vortex energy as the distance between the impurity and the vortex decreases. In a ferromagnet with a size of the order of $L \approx 10^8 a_0$ (a few centimeters), a spinless atom impurity situated about $2a_0$ from the vortex core would increase the vortex energy by about 36%. Note that the effective potential barrier becomes infinity as $r_0 \rightarrow 0$ and it is energetically favorable that vortices and impurities become far apart. But, if the calculations were taken considering that the spin vacancy is localized at the vortex center, we would have $\nabla V(\mathbf{r}) = a_0 \delta(\mathbf{r}) \hat{r}$ and near the vortex core $\nabla\phi \approx (1/a_0) \hat{\phi}$, leading to $V(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi = 0$. As a consequence, in the region without the spinless impurity, where $\nabla^2 \phi = 0$, one gets the same typical solutions and the vortex structure does not suffer any alteration. Hence, the only effect of a central nonmagnetic impurity, is to make the vortex energy decrease, because of the nonexistence of nearest-neighbor exchange bonds at the impurity. Nevertheless, as we suggested earlier, a single vortex with infinite energy may not nucleate by itself around the impurity, since these are created in pairs. Besides, Eq. (16) shows that an infinite potential barrier has to be exceeded by the vortex core in order that it might reach the nonmagnetic impurity and the minimum of energy. Then, one should not expect to find a single vortex with a spin vacancy localized in its center.

In summary, vortices prefer to stay far away from nonmagnetic impurities and hence, the spin dynamics must be affected by these lattice defects. Our calculations could also be taken for two-dimensional easy-plane antiferromagnets. It would be carried out in essentially the same way, leading to similar results. The structure and motion of vortices in two-dimensional magnets may be driven by the presence of spinless impurities due to the repulsive effective potential. Since the dynamical structure factor is the Fourier transform of the vortex spatial and temporal configuration, we expect that nonmagnetic impurities may cause changes in the central peak²⁻⁵ and also in the electron paramagnetic resonance linewidth,¹³ which must be seen in neutron scattering and resonance experiments. However, much work has to be done

in order to see these effects. Moreover, since the vortex energy is modified, the Kosterlitz–Thouless (KT) temperature may also be affected by the presence of impurities. In fact, this theory holds also for temperatures below the Kosterlitz–Thouless temperature T_{KT} , where vortices are bound in pairs. However, the problem of vortex pairs interacting with nonmagnetic impurities and its influence on T_{KT} will be treated in a future paper. We also suggest that the above calculations may have some relevance to high- T_c superconductors, because a common feature of all high-transition-temperature cuprates is the proximity between antiferromagnetic and d -wave superconducting phases controlled by the

doping. The effect of impurities on superconductors has been of theoretical and experimental interest even in its own right for a long time. Recent nuclear-magnetic-resonance measurements have shown that when a Cu^{2+} in the Cu-O plane is substituted by a strong nonmagnetic impurity, such as Zn^{2+} , an effective magnetic moment can be induced on the Cu sites around the impurity site.^{15,16} The physical picture implied by these experiments is that antiferromagnetic correlations are enhanced, not destroyed, around impurities in these cuprates.

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazil).

-
- ¹J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
²F. G. Mertens, A. R. Bishop, G. M. Wysin, and C. Kawabata, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 117 (1987); *Phys. Rev. B* **39**, 591 (1989).
³M. E. Gouvêa, G. M. Wysin, A. R. Bishop, and F. G. Mertens, *Phys. Rev. B* **39**, 11840 (1989).
⁴A. R. Pereira, A. S. T. Pires, M. E. Gouvêa, and B. V. Costa, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **89**, 109 (1992).
⁵A. R. Pereira and J. E. R. Costa, *J. Magn. Magn. Mater.* **162**, 219 (1996).
⁶D. P. Landau and R. W. Gerling, *J. Magn. Magn. Mater.* **104–107**, 843 (1992).
⁷D. P. Landau and M. Krech, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 179 (1999).
⁸D. G. Wisler, H. Zabel, and S. M. Shapiro, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **93**, 277 (1994).
⁹G. M. Wysin and A. R. Völkel, *Phys. Rev. B* **52**, 7412 (1995).
¹⁰G. M. Wysin and A. R. Völkel, *Phys. Rev. B* **54**, 12921 (1996).
¹¹C. E. Zaspel, C. M. McKenna, and S. R. Snares, *Phys. Rev. B* **53**, 11 317 (1996).
¹²T. Schneider and E. Stoll, in *Solitons*, edited by V. M. Agranovich and A. A. Maradudin (North-Holland, Amsterdam, 1986), and references therein.
¹³A. R. Pereira and A. S. T. Pires, *Phys. Rev. B* **60**, 6226 (1999).
¹⁴D. A. Browne and S. Doniach, *Phys. Rev. B* **25**, 136 (1982).
¹⁵M.-H. Julien *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3422 (2000).
¹⁶J. Bobroff *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4116 (2001).

Vortex behavior near a spin vacancy in two-dimensional XY magnets

A. R. Pereira and L. A. S. Mól

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36571-000, Viçosa, Minas Gerais, Brazil

S. A. Leonel and P. Z. Coura

Departamento de Física ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, CEP 36036-330, Minas Gerais, Brazil

B. V. Costa

Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Caixa Postal 702, CEP 30123-970, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

(Received 9 July 2003; published 16 October 2003)

The dynamical behavior of anisotropic two-dimensional Heisenberg models is still a matter of controversy. In order to contribute to this discussion we use Monte Carlo and spin dynamics simulations as well as analytical calculations to study the behavior of vortices in the presence of nonmagnetic impurities. Our simulations show that vortices are attracted and trapped by the impurities. Using this result we show that if we suppose that vortices are not very much disturbed by the presence of the impurities, then they work as an attractive potential to the vortices explaining the observed behavior in our simulations.

DOI: 10.1103/PhysRevB.68.132409

PACS number(s): 75.30.Hx, 75.40.Mg, 75.10.Hk, 74.78.-w

The anisotropic Heisenberg model (AHM) in two dimensions has received a lot of attention recently. This is because of the fact that a large variety of models may be mapped in the AHM. It is an interesting model because it can support topological excitations, such as solitons and vortices, which are present in several important phenomena. Topological defects are present in condensed matter systems such as superconductors, liquid crystals, superfluids, magnetic materials, and several others. The knowledge of how such structures behave is essential for technological applications and an important condition for the understanding of many physical questions. Of great importance is the dynamical behavior of vortices in ordered structures. Knowing how vortices are pinned in superconductors is essential for applications such as magnetic levitation, improving magnetic resonance imaging devised for medical diagnosis, and many others. Topological defects can be the signature left behind by the cosmological phase transitions, which occur while the universe expands and cools. In addition to all of that, the study of the dynamics of the AHM model is interesting by itself. There are several questions that have not yet been addressed about the model. For example, the origin of the central peak in the dynamical structure factor observed in experiments and simulations is the source of several controversial interpretations. In fact, there is so far no theory that can fully explain the central peaks observed in simulations and experiments. A qualitative agreement is achieved by a phenomenological vortex gas theory, but one of its assumptions, namely, ballistic vortex motion,¹⁻³ is questionable.^{4,5} Simulations have shown that a free vortex almost never travels more than one lattice spacing.^{4,5} Of course, the existence of some kind of impurity in the system may affect the vortex motion and possibly the dynamical correlation function. For example, solitons near a nonmagnetic impurity in 2D antiferromagnets cause observable effects in EPR experiments.^{6,7} Lattice defects such as impurities and dislocations play a crucial role in disrupting order in solids.

The main task of this paper is to consider the dynamical effects caused by impurities on topological defects. In this work we will consider the classical two-dimensional magnetic (XY) model, which is a special case of the anisotropic Heisenberg model, described by⁸ $H = -J \sum_{m,n} (S_m^x S_n^x + S_m^y S_n^y)$. Here J is a coupling constant, S^α ($\alpha = x, y, z$) are the components of the classical spin vector $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$, and the summation is over nearest neighbors in a square lattice. The spin field can be parametrized in terms of spherical angles as $\vec{S} = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, \sin \theta)$, where we took $|\vec{S}| = 1$. The continuum version of the XY Hamiltonian can be written as

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

where $m = \sin \theta$ and a is the lattice constant. The spin dynamics is given by the equations of motion $\dot{m} = \delta h / \delta \phi$, $\dot{\phi} = -\delta h / \delta m$, where h is the Hamiltonian density from Eq. (1). The introduction of nonmagnetic impurities modify the Hamiltonian in the following way.^{9,10} As the model considers only spin interactions up to nearest neighbors, to take into account the presence of a nonmagnetic impurity we introduce a circular hole with radius of the order of the lattice spacing, inside of which the Hamiltonian density vanishes. The Hamiltonian (1) becomes⁹

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

with $U(\vec{r}) = 1$ if $|\vec{r} - \vec{r}_0| \geq a$ and $U(\vec{r}) = 0$ if $|\vec{r} - \vec{r}_0| < a$, for a nonmagnetic impurity at \vec{r}_0 . Early works^{9,10} have found a repulsive force between the vortex and the nonmagnetic vacancy. The principal ingredient in the calculations was to suppose that the spin vacancy causes a small but global de-

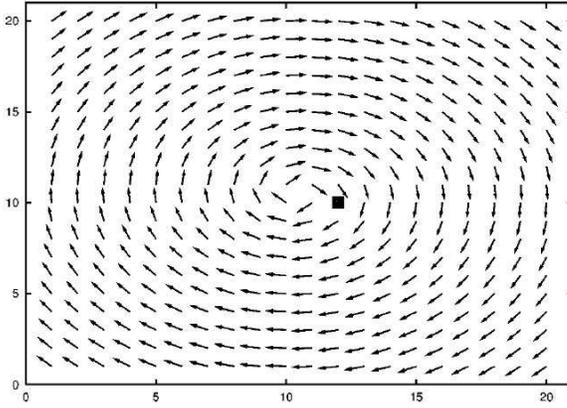


FIG. 1. A typical initial configuration. The square represents the spinless site.

formation on the vortex structure. However, although the assumption of vortex deformation near the impurity seems reasonable, it needs a convincing demonstration. We discuss this question by means of numerical simulations, which will be used not only to check the validity of the approximations done, but also as a guide to give us a clue on which assumptions can be made in a safe way. We have performed spin dynamical simulations on a $L=20$ square lattice to observe the behavior of a single vortex initially located at the center of the system, in the presence of a spin vacancy located two sites away from the center of the system. In order to introduce a single vortex into the system, we have imposed diagonally antiperiodic boundary conditions¹¹

$$\begin{aligned}\vec{S}_{L+1,y} &= -\vec{S}_{1,L-y+1}, & \vec{S}_{0,y} &= -\vec{S}_{L,L-y+1}, \\ \vec{S}_{x,L+1} &= -\vec{S}_{L-x+1,1}, & \vec{S}_{x,0} &= -\vec{S}_{L-x+1,L}\end{aligned}\quad (3)$$

for all $1 \leq x, y \leq L$. The discrete equation of motion for each spin is¹²

$$\frac{d\vec{S}_m}{dt} = \vec{S}_m \times \vec{H}_{ef}, \quad (4)$$

where

$$\vec{H}_{ef} = -J \sum_n (S_n^x \hat{e}_x + S_n^y \hat{e}_y) \quad (5)$$

and \hat{e}_x and \hat{e}_y are unit vectors in the x and y directions, respectively. The equations of motion were integrated numerically forward in time using a vectorized fourth-order Runge-Kutta scheme with a time step of $0.04J^{-1}$. The initial structure is shown in Fig. 1.

In contrast to the analytical results presented in Ref. 9, the simulation results show that the vortex structure does not change appreciably near the spin vacancy. The vortex center moves toward the spinless site, indicating an effective attractive potential of interaction between the vortex and the vacancy, as shown in Figs. 2 and 3. In Fig. 2 we show the configuration after 70 time steps and Fig. 3 after 150 time

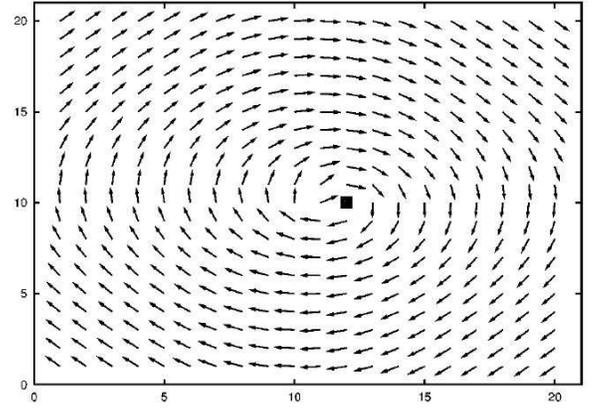


FIG. 2. Configuration after 70 time steps.

steps. We notice that after 150 time steps the position of the vortex center reaches the equilibrium with its center at the spinless site. The key point here is the property of nondeformation of the vortex configuration.

The attractive potential could also be obtained from our theoretical model Hamiltonian (2) by assuming that the vortex configuration is not deformed due to the presence of an impurity. Substituting both the nondeformed, static, and planar vortex solution $\phi_0 = \arctan(y/x)$ located at the origin and a nonmagnetic impurity placed at the site \vec{r}_0 in Hamiltonian (2) we obtain

$$\begin{aligned}H_I &= \frac{J}{2} \int (\nabla \phi_0)^2 U(\vec{r}) d^2x \\ &= \frac{J}{2} \left[\int (\nabla \phi_0)^2 d^2x - \int_{A(\vec{r}_0)} (\nabla \phi_0)^2 dA(\vec{r}_0) \right],\end{aligned}\quad (6)$$

where $A(\vec{r}_0)$ is the area of the hole with radius a around the point \vec{r}_0 that represents the spinless site. The integrals are easily calculated leading to

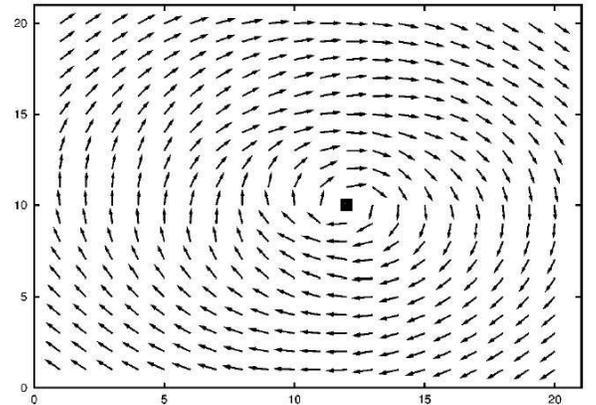


FIG. 3. Configuration after 150 time steps.

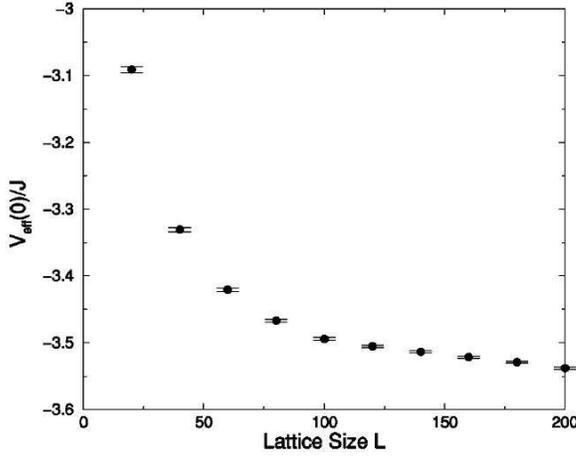


FIG. 4. Pinning energy $V_{\text{eff}}(0)/J$ for many sizes L of a square lattice. This energy tends to -3.54 J as L tends to infinity.

$$E_I = E_v + \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2} \right), \quad (7)$$

where $E_I(\vec{r}_0)$ and $E_v = \pi J \ln(L/a_0)$ are the vortex energies in the presence and absence of the nonmagnetic impurity, respectively, for a system of size L . The constant¹³ $a_0 = 0.24a$ present in E_v , is some suitable short-distance cutoff to avoid spurious divergences due to the fact that the vortex center is a singularity in the continuum limit. Its appropriated value for the square lattice was determined numerically in Ref. 13. Of course, Eq. (7) is not valid in the limit $r_0 \rightarrow 0$, where the continuum approximation breaks down. In this limit there will have an intersection between the circular hole of the impurity and the structure of the vortex core. A point of the circumference of the impurity circle would meet the center of the vortex core lowering the vortex energy as \vec{r}_0 decreases. Then, from Eq. (7) the effective potential experienced by the two defects can be written as

$$V_{\text{eff}}(r_0) = E_I(r_0) - E_v = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2} \right), \quad \text{for } r_0 > a, \quad (8)$$

which is attractive. For large distances of separation ($r_0 \gg a$), Eq. (8) can be approximated by $V_{\text{eff}}(r_0) \approx -(\pi J a^2/2)(1/r_0^2)$. To know the behavior of the potential in the region inside the core ($r_0 \leq a$), we first put the hole exactly at the vortex center, obtaining $E_I = \pi J \ln(L/a)$, which leads to $V_{\text{eff}}(0) = E_I(0) - E_v = \pi J \ln(0.24) = -4.48$ J. We also calculate this pinning energy numerically for the case of zero temperature and for several square lattice sizes as can be seen in Fig. 4. Note that $V_{\text{eff}}(0)$ tends to -3.54 J in the thermodynamic limit. Using a different approach, Wysin¹⁴ has found the approximated values -3.178 , -1.937 , and -5.174 J for square, hexagonal, and triangular lattices, respectively. We notice the reasonable agreement between the analytical result obtained using the continuum limit and the

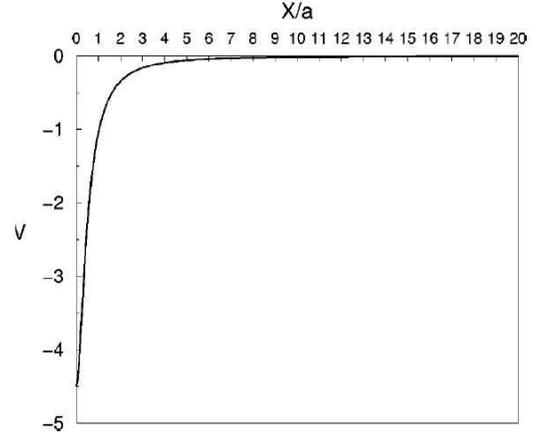


FIG. 5. Attractive potential as a function of X/a .

numerical results in a discrete lattice. Then, using the continuum approach, we modify Eq. (8) to get a complete function $V_{\text{eff}}(r_0)$, introducing a small constant b as follows:

$$V_{\text{eff}}(r_0) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_0^2 + b^2} \right), \quad (9)$$

with the condition

$$V_{\text{eff}}(0) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{b^2} \right) = \pi J \ln(0.24). \quad (10)$$

This artifact leads to an expression valid in all space that reproduces correctly the asymptotic limits for $b = 1.03a$. The potential [Eq. (9)] indicates that the vortex can be trapped by a nonmagnetic impurity. The attractive potential experienced by the vortex can be written as

$$V(X) = \frac{\pi J}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{X^2 + b^2} \right), \quad (11)$$

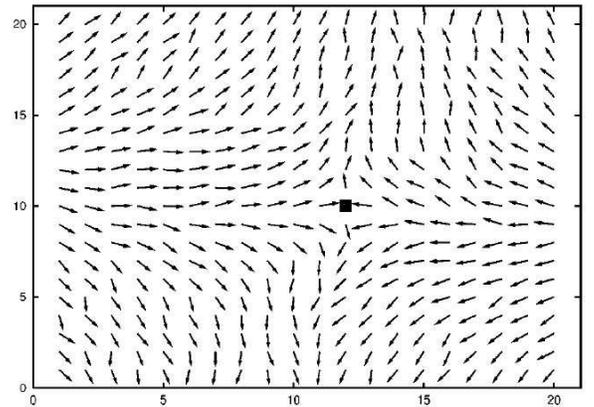


FIG. 6. Antivortex configuration after 2×10^5 MC steps. The impurity is located at site (12,10).

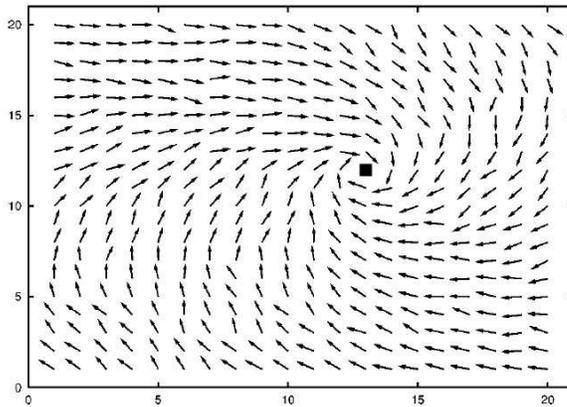


FIG. 7. Vortex configuration after 2×10^5 MC steps. The impurity is located at site (13,12).

where X is the distance between vortex center and the spinless site. It has a minimum at $X=0$ and goes to zero rapidly for $X > 2a$ (see Fig. 5).

In order to observe the lowest energy configurations at low temperatures in a classical two-dimensional system described by the XY model with a nonmagnetic impurity, we performed Monte Carlo (MC) simulations. The simulations were done on $L=20$ square lattices at temperature $T=0.1$ in units of J/k_B (k_B is the Boltzmann constant), using a standard Metropolis algorithm¹⁵ with diagonally antiperiodic boundary conditions [Eq. (3)] and random initial configurations. Using these boundary conditions, at low temperature, the equilibrium configurations can have a single vortex or a single antivortex. We have observed that after 10^5 MC steps

the equilibrium configurations was reached. Figure 6 shows a single antivortex equilibrium configuration after 2×10^5 MC steps with the nonmagnetic impurity located at site (12,10). Figure 7 shows a single vortex equilibrium configuration after 2×10^5 MC steps with the nonmagnetic impurity located at site (13,12). We have observed that, in both cases, in the lowest energy configurations, the antivortex and vortex centers are located at the nonmagnetic impurity, which is in agreement with Eq. (11).

Of course, thermal fluctuations increases the system energy, but they should not affect the pinning energy, which is consequence of the pure magnetic interactions. Really, they may induce favorable energetic conditions for some vortices to escape from the vacancy.

In summary, using Monte Carlo and molecular dynamics simulations, we observed that a vortex structure put close to a nonmagnetic site in a square lattice does not appreciably change its geometry. As the system evolves in time the vortex center moves toward the spinless site. By using a continuum approach we have modeled the interaction as an attractive potential which has a minimum for the vortex center located at spinless site, as observed in MC simulations. The study of the dynamics of diluted models can help us to understand the origin of the central peak found in early simulations. If the vortex motion is the important contribution, the presence of nonmagnetic sites will diminish the height of the central peak due to a trapping of vortices at that nonmagnetic sites.

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian agencies). Numerical work was done at the Laboratório de Computação e Simulação do Departamento de Física da UFJF.

¹F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, and C. Kawabata, Phys. Rev. B **39**, 591 (1989).

²M.E. Gouvêa, G.M. Wysin, A.R. Bishop, and F.G. Mertens, Phys. Rev. B **39**, 11 840 (1989).

³A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E. Gouvêa, and B.V. Costa, Z. Phys. B **89**, 109 (1992).

⁴J.E.R. Costa and B.V. Costa, Phys. Rev. B **54**, 994 (1996).

⁵B.V. Costa, J.E.R. Costa, and D.P. Landau, J. Appl. Phys. **81**, 5746 (1997).

⁶K. Subbaraman, C.E. Zaspel, and J.E. Drumheller, Phys. Rev. Lett. **80**, 2201 (1998).

⁷C.E. Zaspel, K. Drumheller, and K. Subbaraman, Phys. Status Solidi A **189**, 1029 (2002).

⁸J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).

⁹L.A.S. Mól, A.R. Pereira, and A.S.T. Pires, Phys. Rev. B **66**, 052415 (2002).

¹⁰S.A. Leonel, P. Zimmermann Coura, A.R. Pereira, L.A.S. Mól, and B.V. Costa, Phys. Rev. B **67**, 104426 (2003).

¹¹H. Kawamura and M. Kikuchi, Phys. Rev. B **47**, 1134 (1993).

¹²H.G. Evertz and D.P. Landau, Phys. Rev. B **54**, 12 302 (1996).

¹³G.M. Wysin, Phys. Rev. B **54**, 15 156 (1996).

¹⁴G.M. Wysin, cond-mat/0307448 (unpublished).

¹⁵N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953) and for a review, see, e.g., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, edited by K. Binder (Springer, New York, 1979).

Monte Carlo study of the critical temperature for the planar rotator model with nonmagnetic impurities

S. A. Leonel and Pablo Zimmermann Coura

Departamento de Física ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, CEP 36036-330, Minas Gerais, Brazil

A. R. Pereira and L. A. S. Mól

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36571-000, Viçosa, Minas Gerais, Brazil

B. V. Costa

Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Caixa Postal 702, CEP 30123-970, Belo Horizonte, MG, Brazil

(Received 8 October 2002; published 26 March 2003)

We performed Monte Carlo simulations to calculate the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) temperature T_{BKT} for the two-dimensional planar rotator model in the presence of nonmagnetic impurity concentration (ρ). As expected, our calculation shows that the BKT temperature decreases as the spin vacancies increase. There is a critical dilution $\rho_c \approx 0.3$ at which $T_{BKT} = 0$. The effective interaction between a vortex-antivortex pair and a static nonmagnetic impurity is studied analytically. A simple phenomenological argument based on the pair-impurity interaction is proposed to justify the simulations.

DOI: 10.1103/PhysRevB.67.104426

PACS number(s): 75.30.Hx, 75.40.Mg, 75.10.Hk, 74.78.-w

I. INTRODUCTION

The planar rotator (PR) model in two dimensions (2D) is a prototype for several physical systems such as, for example, high-temperature superconductors and granular superconductors. The PR model supports topological excitations, and although there is no long-range order at any finite temperature, it undergoes a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase transition driven by the unbinding of vortex-antivortex pairs. In short the BKT picture of the phase transition is as follows. At low temperature spin waves are the relevant excitations of the system. Spin-spin correlation functions fall off slowly with distance; free vortices do not exist but pairs strongly bind. Vortices pairs cannot disorder the system significantly since they affect only close spins. As the temperature is raised, the distance between vortex-antivortex pairs grows until T_{BKT} . Then free vortices exist, the system is disordered, and the spin-spin correlation function falls off exponentially. The Hamiltonian describing the model is

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1)$$

where i and j enumerate sites in a square lattice, $J_{i,j}$ is an exchange coupling, and $\vec{S}_i = \{S_i^x, S_i^y\} = |S| \{\cos \theta_i, \sin \theta_i\}$ is a two-dimensional spin vector. Of course, Hamiltonian (1) describes an ideal system, in which each site of a regular square lattice is occupied by a spin vector \vec{S} . However, impurities and/or defects are present in any material sample. In fact, the effect of impurities on superconductors has been of theoretical and experimental interest in its own right for a long time. Particularly, the interaction of topological excitations with spatial inhomogeneities is of considerable importance from both theoretical and applied points of view. For example,

solitons near a nonmagnetic impurity in 2D antiferromagnets cause observable effects in electron paramagnetic resonance (EPR) experiments.^{1,2} In this scenario it would be important to study the effects of the presence of nonmagnetic sites diluted in magnetic materials. In a recent work, Mól, Pereira, and Pires³ have studied the interaction between a static spin vacancy and a planar vortex, and they have shown that the effective potential experienced between the two defects is repulsive. It indicates that the presence of spinless atoms on the magnetic plane may affect the BKT critical temperature. The main goal in this paper is to consider the effect of magnetic dilution to the BKT temperature by using numerical and analytical methods. To take into account the presence of nonmagnetic impurities in our model [Eq. (1)] we can replace some spin vector \vec{S} by a $\vec{S} = 0$ creating a vacancy at that lattice site. First we consider that the spin vacancies are uniformly distributed on the sites of the lattice. The case in which the spin vacancies are grouped into a cluster will also be analyzed in order to compare with the random case.

The paper is organized as follows: in Sec. II, we describe the model and the Monte Carlo (MC) method. In Sec. III we present the MC results. In Sec. IV, the continuum theory is used to study the vortex-pair-impurity interaction and a simple heuristic argument to justify the MC results is presented, and Sec. V contains a summary and final comments.

II. BACKGROUND

We consider in this work a quenched site-diluted PR model. In order to introduce dilution we define a variable σ_i with the following properties: It is 1 if site i is magnetic and 0 otherwise. To accommodate this change we have to modify Eq. (1) as

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \vec{S}_i \cdot \sigma_j \vec{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \cos(\theta_i - \theta_j). \quad (2)$$

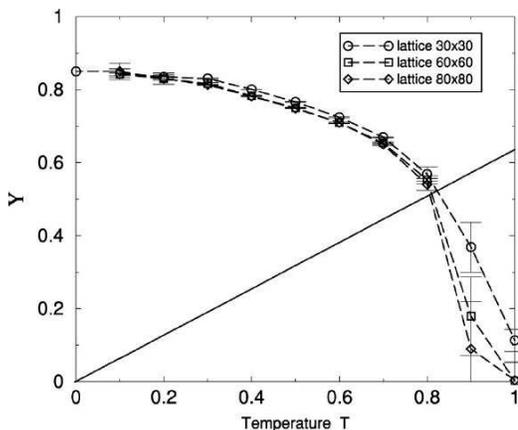


FIG. 1. Helicity modulus Y as a function of temperature for lattices with sizes 30×30 , 60×60 , and 80×80 and with 5% of nonmagnetic impurities randomly distributed. The solid line is the curve $(2/\pi)T$ and the dashed lines are only guides to the eyes.

The precise determination of the BKT temperature is a difficult task due to the absence of sharp peaks in the thermodynamic quantities. One way to extract T_{BKT} was suggested by Weber and Minnhagen^{4,5} by calculating the helicity modulus defined as

$$Y = \frac{\partial^2 F}{\partial \Delta^2}, \quad (3)$$

where F is the free energy and Δ is a small twist across the system in one direction. Using Eq. (2) we get

$$Y = -\frac{1}{2(N-n)} \langle H \rangle - \frac{1}{k_b T(N-n)} \left\langle \left[\sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j \sin(\theta_i - \theta_j) \hat{e}_{i,j} \cdot \hat{x} \right]^2 \right\rangle, \quad (4)$$

where N is the volume of the system, n is the number of nonmagnetic sites, $\hat{e}_{i,j}$ is the vector pointing from site j to site i , and \hat{x} is a unit vector pointing along the x direction. The Kosterlitz renormalization-group equations⁶ lead to the prediction that Y jumps from the value $(2/\pi)T_c$ to zero at the critical temperature,

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \frac{Y}{k_b T} = \frac{2}{\pi}. \quad (5)$$

Although Eq. (3) was obtained for the nondiluted mode, its extension to diluted cases is expected to be straightforward. Arguments based on the self-consistent harmonic approximation show that the helicity modulus at T_{BKT} should be independent of the nonmagnetic impurity concentration.⁷ To calculate the quantity Y we use a MC approach using a standard Metropolis algorithm with periodic boundary conditions.⁸ We used $100 \times L \times L$ Monte Carlo steps per site for equilibration, which means, for example, we moved each

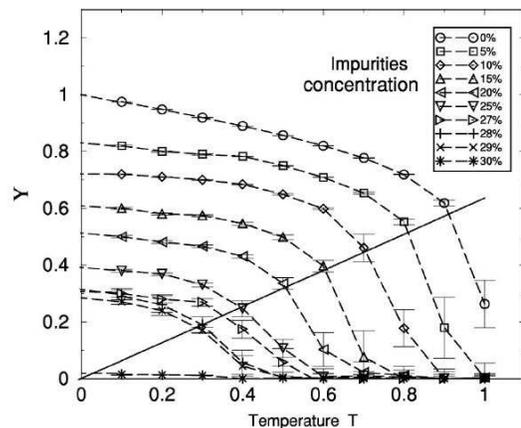


FIG. 2. Helicity modulus Y as a function of temperature for lattices size 60×60 with 0%, 5%, 10%, 15%, 20%, 25%, 27%, 28%, 29%, and 30% of nonmagnetic impurities randomly distributed. The solid line is the line $(2/\pi)T$ and dashed curves are guides to the eye.

spin 3.6×10^4 times for the $L=60$ lattice. The temperature was varied in steps of size $\Delta T=0.1$ K. Each point in our simulations is the result of the average over 2×10^5 independent configurations. In the figures showing the results of our simulations, when not indicated, the error bars are smaller than the symbols.

Figure 1 shows the results from MC simulations of Y for lattices with 5% of impurities and sizes $L=30, 60$, and 80 . The straight line represents $(2/\pi)T$. The crossing point between this line and Y gives an estimate of the BKT temperature. Of course, this estimate becomes more accurate as the lattice size increases. However, as we can see in Fig. 1, the lattice of size $L=60$ already gives a good result adequate for our purposes. From now on we use $k_b=1$. The symbol T_{BKT} is used for $T_c(\rho=0)$, i.e., $T_{BKT}=T_c(\rho=0)$.

III. MONTE CARLO RESULTS

In this section we present the results obtained by MC simulations. First, we distribute the nonmagnetic impurities at random in the lattice sites. Figure 2 contains the helicity modulus as a function of the temperature considering several values of the impurity concentration (ρ). The straight line representing the function $(2/\pi)T$ is also shown. As noted earlier, the intersection of this line with the value of each Y gives T_c for the corresponding impurity concentration. We observe that $T_c(\rho)$ decreases with increasing ρ . Since the helicity modulus is a measurement of the phase correlations of the system,⁵ it is not surprising that these correlations are strongly affected by the dilution. It can be understood as follows: if we remove a spin from the lattice, the nearest neighbors of that spin will have coordination number of 3, one less than in the bulk. The spins in the boundary have larger fluctuations than the spins in the bulk lowering the spin correlations. We should expect that the fluctuation becomes appreciable, disordering the system for large enough

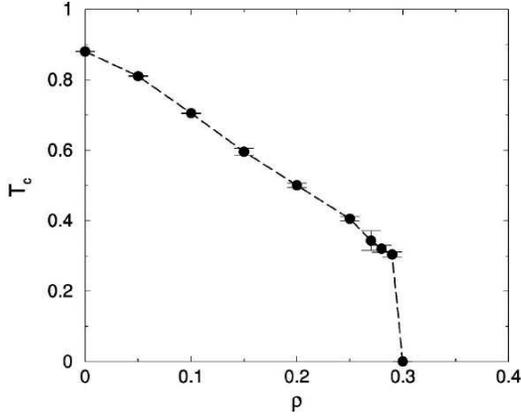


FIG. 3. The BKT transition temperature behavior as a function of nonmagnetic impurity concentration, based on the MC simulations results shown in Fig. 2. The dashed curves are guides to the eye.

nonmagnetic concentrations up to a critical value where the BKT temperature goes down to zero. In Fig. 3 we show the BKT temperature as a function of the nonmagnetic impurity concentration. Each point in our plot is the result of an average over four different distributions of nonmagnetic sites for the same concentration ρ . Note the abrupt fall of the critical temperature for $\rho_c \approx 0.3$. We also performed MC simulations for the case in which the nonmagnetic impurities are clustered for $\rho = 0.2$ and 0.3 (see Fig. 4). Note that in this case the critical temperature practically does not depend on the impurity concentration [$T_c(0.2) \approx T_c(0.3)$]. In fact this is an expected result. Since the nonmagnetic cluster is confined to a region of size $\rho \times L^2$ and the boundary grows as $\rho \times L$, spins are still strongly correlated, driving the BKT transition even for large values of ρ . A comparison between the two cases is shown in Fig. 4. Note the considerable difference between them. Due to the short range of the spin interactions, only the spins near the boundary of the cluster will become influenced by the vacancies and hence the correlations of the rest of the system will have a behavior almost independent of the vacancies. It must not affect considerably the vortices that are formed far way from the cluster and the phase transition occurs normally.

IV. VORTEX-ANTIVORTEX-IMPURITY INTERACTION

In this section we discuss the effect of nonmagnetic sites on the vortex-antivortex structure. The interaction between the topological excitation and a single nonmagnetic impurity below the critical temperature may help us to understand in more detail the phase transition mechanism. In the continuum limit, Hamiltonian (1) can be written as

$$H_c = (1/2)J \int (\vec{\nabla} \theta)^2 d^2x. \quad (6)$$

Following Ref. 3, to take into account the absence of one spin in the lattice site we modify H_c as

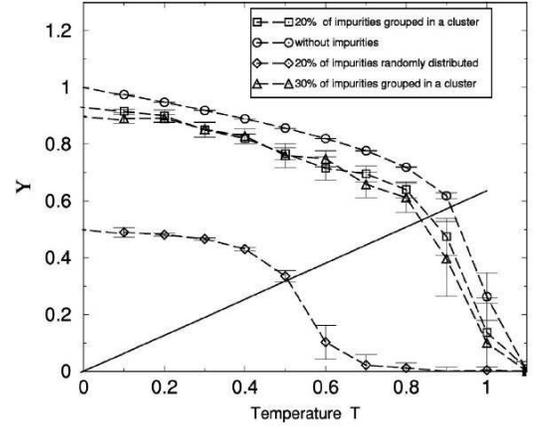


FIG. 4. Helicity modulus Y as a function of temperature, for lattices with 20% and 30% of nonmagnetic impurities grouped in a cluster, compared with the helicity modulus results for lattice with 20% of nonmagnetic impurities randomly distributed and lattice without impurities. The solid line is the line $(2/\pi)T$ and dashed curves are guides to the eye.

$$H_I = (1/2)J \int (\vec{\nabla} \theta)^2 V(\vec{r}) d^2x, \quad (7)$$

where $V(\vec{r})$ is a localized potential given by $V(\vec{r}) = 1$ if $|\vec{r} - \vec{r}_0| \geq a$ and $V(\vec{r}) = 0$ if $|\vec{r} - \vec{r}_0| < a$. Here, the nonmagnetic site is placed at \vec{r}_0 and a stands for the lattice constant. This lack of magnetic interaction inside the circle of radius a means that a spin located at \vec{r}_0 was removed from the lattice. The equation of motion obtained from Eq. (7) is

$$V(\vec{r}) \nabla^2 \theta = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \theta. \quad (8)$$

In polar coordinates, the vectors \vec{r} and \vec{r}_0 are written as (r, ϕ) and (r_0, ϕ_0) , respectively. Then, the gradient of the potential is

$$\vec{\nabla} V(\vec{r}) = a[\hat{r} \cos(\alpha - |\phi - \phi_0|) + \hat{\phi} \sin(\alpha - |\phi - \phi_0|)] \times \delta(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{a}), \quad (9)$$

where δ is the Dirac delta function and α is the angle that the vector \vec{a} , with origin at the point \vec{r}_0 and end at a point on the circumference of the potential ($|\vec{a}| = a$) makes with the vector \vec{r}_0 . In the limit $a \rightarrow 0$, we write

$$\vec{\nabla} V(\vec{r}) \approx a[\hat{r} \cos(\alpha) + \hat{\phi} \sin(\alpha)] \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (10)$$

where $\cos(\alpha)$ and $\sin(\alpha)$ are anisotropic coupling constants. A vortex-antivortex pair solution with “center of mass” at

the origin is given by $\theta_{2\nu} = \arctan[(y-P)/x] - \arctan[(y+P)/x]$, where $R=2P$ is the distance between the vortex centers. The energy of a pair is $E_{2\nu} = \pi^2 J + 2\pi J \ln(R/a)$. Note that the energy $E_{2\nu}$ increases with increasing R , implying an attractive force between vortices of opposite sign. Supposing θ_1 is the deformation introduced in the vortex-antivortex structure by the absence of a spin at \vec{r}_0 we can

write $\theta = \theta_{2\nu} + \theta_1$. Rewriting $\theta_{2\nu}$ in polar coordinates and substituting $\theta = \theta_{2\nu} + \theta_1$ into Eq. (8), we obtain

$$\theta_1 = -\frac{\beta}{\pi} \ln\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|}{a}\right), \quad (11)$$

where

$$\beta = \frac{Pa[rr_0^2 \cos(2\phi_0 - \phi) + rP^2 \cos\phi - r_0^3 \cos\phi_0 - P^2 r_0 \cos\phi_0]}{|\vec{r} - \vec{r}_0|[P^4 + r_0^4 + 2P^2 r_0^2 \cos(2\phi_0)]}. \quad (12)$$

The configuration of this deformed vortex-antivortex pair is shown in Fig. 5. As the vortex (or antivortex) center approaches the nonmagnetic impurity, the pair structure becomes more and more deformed, indicating that there is a repulsive interaction potential between each vortex core and the spin vacancy. This phenomenon is in agreement with the results of Ref. 3, where the calculations took in consideration a single vortex. In order to understand how the effective interaction potential is between the two defects, we substitute $\theta = \theta_{2\nu} + \theta_1$ into Eq. (7) to calculate the energy of the pair-impurity system E_{PI} . Unfortunately, the integral in Eq. (7) cannot be done analytically for a general impurity position, but in the special case of the spin vacancy being located at the center of mass we can solve it exactly. Using the dominant terms, the effective potential is given by

$$V_{eff} \approx \frac{a^2 J}{2\pi P^2} \left[\frac{1}{3} \ln^3\left(\frac{d}{a}\right) + \ln\left(\frac{d}{a}\right) + \frac{4\pi d}{a} \right], \quad (13)$$

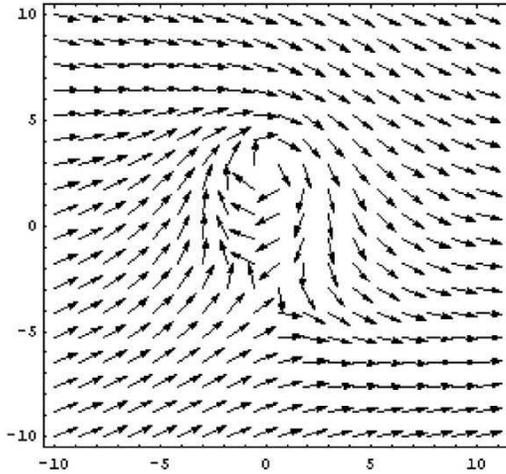


FIG. 5. A vortex pair configuration with “center of mass” located at the origin and size $R=6a$ and a spin vacancy located at $(1,3)$. The pair configuration is deformed for large distance if vortex centers are near the impurity, increasing considerably the system energy.

where $V_{eff} = E_{PI} - E_{2\nu}$, and d is the lattice size. Since P is the distance between the vortex (or antivortex) center and the spin vacancy, this expression is very much like the effective potential obtained in Ref. 3, between a single vortex and a nonmagnetic impurity. Note that the effective interaction potential increases with decreasing $R=2P$, implying a repulsive force between vortices and impurities. In fact, the spin vacancy force obtained from Eq. (13) acts as a “repulsive force,” weakening the coupling strength between the bound vortices, and becomes stronger as P decreases. Here, the nonmagnetic impurity must repel simultaneously the two vortices in a pair, affecting the spin field for large distances (see Fig. 5). For a lattice of size d , the effective potential (13) is a minimum only if $P \rightarrow d/2 (R \rightarrow d)$, showing the tendency of a complete separation of the vortices in a pair due to the presence of the vacancy. We conclude that static spin vacancies repel vortices, independently if they are free or bound into pairs. Based on the above results, we propose a phenomenological model to explain the behavior of the BKT temperature as a function of the impurity concentration. As discussed above, a nonmagnetic site can induce a repulsive potential between a pair vortex-antivortex in such a way that we can have the two scenarios. If the nonmagnetic impurity is in between the pair vortex-antivortex, the effective repulsive potential created tends to unbind the pair. On the other hand, if the impurity is not in between the pair, the force in the nearest vortex will be stronger than in the other and the tendency is to increase the vortex-antivortex attraction, leading to the annihilation of the pair. Then, impurities may induce either the vortex-antivortex unbinding process or pair annihilation. In a system containing a random distribution of impurities one can expect a lower density of vortices at any temperature than in a pure system due to the annihilation of pairs. Beside that, the unbinding of vortices and antivortices should occur at lower temperature, inducing the BKT transition.

Hence, we may expect a critical nonmagnetic impurity concentration in which vortex pairs are not more formed and the BKT critical temperature goes to zero. The situation is different for the case in which the nonmagnetic impurities are clustered. In this case, vortex pairs will be excited far away from the cluster in order to minimize their energies and

the cluster would have only a small influence on the vortex-antivortex unbinding. The critical temperature should not be much affected. The results presented in Fig. 4 confirm this conjecture.

V. SUMMARY

We have performed Monte Carlo simulations for the diluted planar rotator model in a square lattice. We have found that the BKT temperature decreases with increasing impurity concentration and that there is a critical impurity concentration $\rho_c \cong 0.3$ at which the transition temperature goes to zero. The interaction between a vortex pair and a static spin vacancy was studied in the continuum approximation. By considering the decoupling of vortex pairs induced by impurities we argued that the BKT critical temperature should decrease, justifying the MC simulations. Our results may also have applications for granular superconducting films such as ceramic high- T_c materials. These systems could be modeled as 2D Josephson-junction arrays because such films contain large number of Josephson boundaries between the small su-

perconducting grains forming a complex Josephson-junction network. However, the actual situation is not so ideal as the perfect array since grains with different sizes and orientations are arranged almost randomly. This makes the model with vacancies more realistic than the usual perfect array. The results can also be extrapolated to models with three spin components such as easy-plane and XY magnets. In these cases, the problem with impurities could be still more interesting since they have a true dynamics. In fact, it can shed some light on the important question of the origin of the central peak in the dynamical spin-spin correlation function in the two-dimensional anisotropic Heisenberg model.⁹⁻¹⁵ However, much work has to be done in order to understand those effects.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian agencies). Numerical work was done at the Laboratório de Computação e Simulação do Departamento de Física da UFJF.

-
- ¹K. Subbaraman, C.E. Zaspel, and K. Drumheller, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2201 (1998).
²C.E. Zaspel, K. Drumheller, and K. Subbaraman, *Phys. Status Solidi A* **189**, 1029 (2002).
³L.A.S. Mól, A.R. Pereira, and A.S.T. Pires, *Phys. Rev. B* **66**, 052415 (2002).
⁴H. Weber and P. Minnhagen, *Phys. Rev. B* **37**, 5986 (1988).
⁵P. Minnhagen, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1001 (1987).
⁶J.M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7**, 1046 (1974).
⁷L.M. Castro, A.S.T. Pires, and J.A. Plascak, *J. Magn. Magn. Mater.* **248**, 62 (2002).
⁸N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953); for a review, see, e.g., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, edited by K. Binder (Springer, New York, 1979).
⁹F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, and C. Kawabata, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 117 (1987); *Phys. Rev. B* **39**, 591 (1989).
¹⁰A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E. Gouvêa, and B.V. Costa, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **89**, 109 (1992).
¹¹A.R. Pereira and J.E.R. Costa, *J. Magn. Magn. Mater.* **162**, 219 (1996).
¹²H.G. Evertz and D.P. Landau, in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics VIII*, edited by D.P. Landau, K.K. Mon, and H.B. Schuetteler (Springer, Berlin, 1995), p. 175.
¹³J.E.R. Costa and B.V. Costa, *Phys. Rev. B* **54**, 994 (1996).
¹⁴B.V. Costa, J.E.R. Costa, and D.P. Landau, *J. Appl. Phys.* **81**, 5746 (1997).
¹⁵D.A. Dimitrov and G.M. Wysin, *Phys. Rev. B* **53**, 8539 (1996).