

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS (UFAL)
INSTITUTO DE FÍSICA (IF)
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA (PGF)

DENILSON DE MORAIS SILVA

ASPECTOS DA DINÂMICA DE MÁGNONS NÃO INTERAGENTES EM CADEIAS
HARMÔNICAS FERROMAGNÉTICAS

Maceió, 2021

DENILSON DE MORAIS SILVA

ASPECTOS DA DINÂMICA DE MÁGNONS NÃO INTERAGENTES EM CADEIAS
HARMÔNICAS FERROMAGNÉTICAS

Monografia apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física, da Universidade Federal de Alagoas, como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Wandearley da Silva Dias.

Maceió, 2021

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

S586a Silva, Denilson de Morais.

Aspectos da dinâmica de mágnons não interagentes em cadeias harmônicas ferromagnéticas / Denilson de Morais Silva. – 2021.

91, [6] f. : il. color.

Orientador: Wandearley da Silva Dias.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. Maceió, 2021.

Bibliografia: f. 74-83.

Apêndice: f. 84-[97].

1. Mágnons. 2. Ferromagnetismo. 3. Modelos de transporte eletrônico.
I. Título.

CDU: 53



Universidade Federal de Alagoas

Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

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

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

**“Aspectos da Dinâmica de Mágns não Interagentes em Cadeias
Harmônicas Ferromagnéticas”**

por

Denilson de Moraes Silva

A Banca Examinadora composta pelos professores Wandearley da Silva Dias (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Edgard Pacheco Moreira Amorim, da Universidade do Estado de Santa Catarina e Maurício Domingues Coutinho-Filho, da Universidade Federal de Pernambuco, consideram o candidato aprovado com grau **“A - Com Louvor”**.

Maceió, 15 de fevereiro de 2021.


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Edgard Pacheco Moreira Amorim


Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho-Filho

“Com o advento da mecânica quântica, o mundo que funcionava como um relógio se transformou em uma loteria.”
*Ian Stewart, **Does God Play Dice?**. 2002.*

Dedico esse trabalho aos meus pais que nunca mediram esforços para meu aprendizado pessoal e nunca me deixaram seguir sem os seus apoios.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer aos meus pais, primeiramente, pois me auxiliaram sempre que necessário e acompanharam minha trajetória no mestrado. Embora eu tenha tomado algumas decisões egoístas, agradeço profundamente a compreensão e paciência que tiveram. Ao meu irmão que, apesar da distância e dificuldades pessoais, ainda assim teve presente e me proporcionou apoio.

Agradeço especialmente com muito carinho à Michelly Cordeiro, por me acompanhar e me fortalecer durante esses anos. A atenção e afeto proporcionados a mim foram, de longe, muito maiores do que o que eu esperava e talvez até do que merecia.

Agradeço ao Instituto de Física e ao corpo docente deste por me proporcionarem um ambiente de conforto e com possibilidades de me desenvolver. Em especial eu agradeço aos professores que tive contato em sala de aula durante o mestrado: Francisco Fidelis, Iram Gleria, Italo Nunes e Paulo Brandão; pelas discussões em sala de aula, ou fora dela.

Ao meu grupo de pesquisa TIQNano (Transporte e Informação Quântica em Nanoestruturas), obrigado pelo ambiente de carinho de acolhimento. Principalmente pela paciência comigo e peço desculpas pelos raros momentos exaltados e pela minha dificuldade de socialização. Agradecimento especial aos Paladinos do χ (Luciano José Jr. e Frederico Passos) pelas longas discussões construtivas.

Sou grato ao meu orientador, Wandearley Dias, por me auxiliar nesse processo de aprendizagem, por me ser presente durante todo o período de mestrado e escolher o caminho que julgou melhor para minha formação. Obrigado por me ajudar a ser sempre mais do que já sou e obrigado pela paciência e compreensão.

Agradeço também às instituições que financiaram o nosso grupo: CAPES, CNPq e FAPEAL.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, os meus agradecimentos.

Resumo

A dinâmica de mágnons sob influência de modos vibracionais da rede tem sido ativamente estudada nos últimos anos, tanto no contexto teórico e experimental. Neste contexto, apresentamos aqui alguns estudos que levam em consideração a dinâmica de mágnons não interagentes em um sistema ferromagnético cujo acoplamento mágnon-rede é dado pela componente anisotrópica do termo de *exchange*, que possui uma dependência linear com relação ao espaçamento dos íons referentes ao acoplamento. Antes de apresentar nossos modelos e resultados, apresentamos alguns estudos acerca dos modelos de transporte eletrônico que trazem informações relevantes para a compreensão dos resultados. Nossos resultados são obtidos por meio de algoritmos numéricos para evolução temporal de uma excitação magnética localizada num único íon, um pacote magnônico do tipo delta. Para o primeiro modelo, consideramos o regime em que o sistema é governado por uma equação de Schroedinger não linear efetiva com um parâmetro χ que descreve a força da não linearidade. Neste sistema, que apresenta formações itinerantes tipo-soliton no regime de fraca não linearidade, nós encontramos o ponto crítico de transição para o regime de *self-trapping*: $\chi_c = 1.825$. Este ponto crítico pode ser revelado por diferentes quantidades físicas, como função participação, probabilidade de retorno e entropia de Shannon. Em um outro estudo, investigamos a influência de desordem no modelo anterior ao considerarmos flutuações nos termos de *exchange*. Nossos resultados sugerem o acoplamento mágnon-rede (χ) sendo capaz de enfraquecer a localização induzida pela desordem. Por fim, decidimos investigar de forma mais abrangente como a dinâmica do mágnon pode ser influenciada pelos modos vibracionais da rede. Neste último trabalho, nós estendemos nosso modelo de forma a considerar a dinâmica da rede mais rápida que a dinâmica do mágnon, tendo como parâmetro de controle o (τ), que descreve a razão entre os tempos característicos do modo magnônico e das perturbações da rede. Diferente dos modelos anteriores, este último modelo envolve a solução de dois conjuntos de equações (mágnon e rede harmônica) acopladas. Nossos resultados apresentam um cenário de formação de *polarons*. O parâmetro de acoplamento (χ) entre a componente magnética e a vibracional é capaz de induzir uma mudança do regime de *polarons* itinerantes, existente no regime de fraco acoplamento, para o regime de *polaron* estacionário. Ao investigarmos a interdependência entre este ponto crítico (χ_c) e o parâmetro τ , identificamos um valor limite para o χ_c a medida que a dinâmica da rede se torna muito mais rápida que a dinâmica do mágnon.

Palavras-chave: Não linearidade, mágnon-rede, soliton, pólaron, self-trapping, desordem.

Abstract

The dynamics of magnons under the influence of vibrational modes of the lattice have been actively studied in recent years, both in the theoretical and experimental context. In this context, we present here some studies that take into account the dynamics of non-interacting magnons in a ferromagnetic system whose magnon-lattice coupling is given by an anisotropic component of the exchange term, which depends linearly on the spacing of the ions related to the coupling. Before presenting our models and results, we present some studies about electronic transport models that provide relevant information for understanding the results. Our results are obtained using numerical algorithms for the temporal evolution of a magnetic excitation located in a single ion, an initial delta wave-packet. For the first model, we consider the regime in which the system is governed by an effective nonlinear Schroedinger equation with an χ parameter that describes the strength of nonlinearity. In this system, which exhibits itinerant soliton-like formations in the weak nonlinearity regime, we find the critical transition point for the self-trapping regime: $\chi_c = 1.825$. This critical point can be revealed by different physical quantities, such as participation function, probability of return and Shannon entropy. In another study, we investigated the influence of disorder on the previous model when considering fluctuations in exchange terms. Our results suggest the magnon-lattice (χ) coupling being able to weaken localization come from the disorder. Finally, we decided to investigate more comprehensively how the dynamics of the magnon can be influenced by the lattice vibrations. In this last work, we extended our model in order to consider the lattice dynamics faster than the magnon dynamics, using the control parameter (τ), which describes the ratio between the characteristic times of the magnetic mode and the perturbations of the lattices. Unlike the previous models, this last model involves the solution of two sets of coupled equations (magnon and harmonic lattice). Our results present a scenario of polaron formation. The coupling parameter (χ) between the magnetic and the vibrational component is able to induce a change from the itinerant polaron regime, existing in the weak coupling regime, to the stationary polaron regime. When investigating the interdependence between this critical point (χ_c) and the parameter τ , we identified a limit value for χ_c as the lattice dynamics becomes much faster than the dynamics of the magnon.

Keywords: Nonlinearity, magnon-lattice, soliton, polaron, self-trapping, disorder.

Lista de Figuras

1	Densidade de Estados (<i>DOS</i>) para elétrons não interagentes numa cadeia cristalina na aproximação <i>tight-binding</i> de interação de primeiros vizinhos.	19
2	Evolução temporal do pacote de onda eletrônico da condição inicial do tipo delta numa cadeia com $N = 4 \cdot 10^3$ até o tempo $t = 10^3 t_e$.	20
3	Representação de uma rede bidimensional quadrada cristalina regular (a) e com alguns tipos de defeitos: os defeitos podem ser composicional (b), que apresenta mais de um tipo de elemento na sua construção, ou podem ser estrutural (c), com a distância entre os elementos da rede com distribuições distintas.	21
4	Densidade de estados <i>DOS</i> de elétrons não interagentes numa cadeia desordenada no modelo de Anderson na aproximação de primeiros vizinhos para alguns valores de largura de desordem W .	22
5	(a) Evolução temporal da densidade de probabilidade do elétron com desordem diagonal de largura $W = 2\gamma$ e (b) seu perfil exponencialmente localizado em $t = 2 \cdot 10^3 t_e$. A linha tracejada foi construída a partir de $e^{- n-\langle n \rangle /l}$, com $\langle n \rangle = 0$ e $l = 14.81$.	23
6	Representação de íons por esferas idênticas cuja ligações químicas são representadas por molas harmônicas idênticas. Está representado o vetor da rede \mathbf{a} entre as posições de equilíbrio de dois íons consecutivos e a deflexão \mathbf{u}_n de um íon n . As posições de equilíbrio estão marcadas em círculos tracejados.	24
7	Relação de dispersão do modo acústico de uma cadeia cristalina de osciladores idênticos acoplados por molas idênticas.	25
8	Relação de dispersão dos modos acústico e ótico de uma cadeia cristalina composta por dois íons de massas diferentes.	26
9	Representação de uma cadeia molecular de elementos diatômicos como osciladores independentes com molas efetivas representando as ligações químicas maleáveis.	27
10	Evolução temporal do pacote de onda no modelo de Holstein com $N = 4 \cdot 10^3$ até o tempo $t = 10^3 t_e$ para alguns valores de χ . O caso linear, quando $\chi^{(h)} = 0.0$ (a), vemos que a dinâmica tende ao estados estendidos de Bloch. Para não linearidade fraca, com $\chi^{(h)} = 1.5$ (b) e $\chi^{(h)} = 3.0$ (c), temos soluções semelhantes ao de Bloch e para não linearidade alta, como em $\chi^{(h)} = 4.5$ (d) surge estados autoarmadilhados no centro da cadeia.	29

11	Cadeia unidimensional de poliacetileno na forma <i>trans</i> (a) e na forma <i>cis</i> (b). As esferas claras e escuras representam carbonos e hidrogênios, respectivamente.	30
12	Estrutura <i>trans</i> do poliacetileno quando há um elétron (esfera vermelha) na banda de valência de um carbono, causando um defeito na estrutura. . .	31
13	Solução <i>soliton</i> para a estrutura <i>trans</i> do poliacetileno no modelo SSH. Gráfico para $l = 7$	32
14	Representação de uma proteína α -hélice. As ligações em preto indicam a direção da cadeia em formato de hélice. As linhas tracejadas representam as pontes de hidrogênio.	33
15	Representação clássica do momento angular orbital \mathbf{L} e o que seria esperado do spin \mathbf{S} da partícula vermelha que orbita a partícula azul.	36
16	Representação dos níveis de energia do tripleto e singleto com desnível $J\hbar^2$	39
17	Estado fundamental de uma cadeia ferromagnética (a), um estado ferromagnético excitado localizado com apenas um <i>spin</i> invertido (b).	40
18	Relação de dispersão de um mágnon numa cadeia ferromagnética linear cristalina.	44
19	Densidade de estados <i>DOS</i> de um mágnon numa cadeia ferromagnética cristalina na aproximação de primeiros vizinhos.	45
20	Densidade de estados <i>DOS</i> de um mágnon numa cadeia ferromagnética desordenada na aproximação de primeiros vizinhos para alguns valores de largura de desordem W	46
21	Evolução temporal de um mágnon a partir da condição inicial do tipo delta numa cadeia ferromagnética (a) cristalina ($W = 0.0$) e (b) desordenada com $W = 1.5J_0$. Tamanho da cadeia é de $N = 2000$	46
22	Representação de uma cadeia ferromagnética de spins representados por setas e íons por esferas idênticas cuja ligações químicas são representadas por molas harmônicas efetivas idênticas.	49
23	Evolução temporal do pacote do mágnon para alguns valores de χ . Para (a) $\chi = 0.00$, o sistema linear, o pacote se estende pela cadeia. Para (b) $\chi = 0.80$ e (c) $\chi = 1.60$ há formação de estruturas do tipo solitônicas. E para (d) $\chi = 2.40$ aparece modos autoaprisionados na posição inicial no regime de forte intensidade da não linearidade.	53

24	(a) Trajetória das estruturas solitônicas para alguns valores de χ . (b) Comportamento da velocidade em função de χ e (c) a análise de escala da velocidade dos modos caminhantes para esquerda e direita do centro da cadeia. As velocidades das estruturas têm uma dependência por uma lei de potência do tipo $(\chi_c - \chi)^{0.5}$ com $\chi_c = 1.825$	55
25	(a) Média temporal da probabilidade de retorno para tempo longo em função de χ . O gráfico interno mostra a transição descontínua em χ_c e que o valor da probabilidade de retorno após a transição é o dobro da amplitude das estruturas caminhantes. (b) Comportamento da média temporal da participação para um tempo longo. Para valores de χ pequenos e grandes a participação se comporta por uma lei de potência do tipo χ^{-3} . Em torno da transição há uma singularidade e o gráfico interno mostra que não há descontinuidade na transição.	56
26	Inclinação da entropia em função à $\ln t$ para um tempo longo dado por $S_T = A + B \ln(t/t_m)$. Na transição para <i>self-trapping</i> a entropia escala de forma diferente e apresenta uma descontinuidade vista no gráfico interno. Para valores grandes e para valores pequenos de χ , o comportamento pode ser bem descrito por uma lei exponencial do tipo $B = e^{-C\chi}$	56
27	Perfil do pacote de onda magnônico em torno do (a) modo caminhante para $\chi = 0.5$ e do (b) modo autoaprisionado na posição inicial para $\chi = 2.0$ em $t = 10^4 t_m$. Os círculos são o perfil do pacote dado pela evolução temporal e a curva preenchida em vermelho é dada pela solução de <i>breathing bright soliton</i>	57
28	Evolução temporal do pacote de onda inicialmente totalmente localizado no centro de uma cadeia ferromagnética desordenada não linear. A largura de desordem utilizada é $W = 1.5J_0$. (a) Localização mediante à desordem num sistema não linear ($\chi = 0.0$), (b) enfraquecimento da localização mediante a desordem no regime de baixa não linearidade e (c) autoarmadilhamento perturbado pela desordem no regime de alta não linearidade.	58
29	(a) Média temporal da posição mais provável e (b) média temporal do valor mais provável para alguns valores de W . O valor mais provável não se afasta muito do centro da cadeia. O valor mais provável apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização mediante à desordem no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado pela desordem no regime de alta não linearidade. A linha pontilhada é o comportamento do valor mais provável no sistema cristalino.	59

30	Média temporal da função participação para alguns valores de W . (a) A participação apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado no regime de alta não linearidade. A linha pontilhada é o comportamento da participação no sistema cristalino. (b) No regime de alta não linearidade, a participação se comporta de forma semelhante ao caso cristalino.	60
31	Média temporal da entropia de Shannon para alguns valores de W . A entropia apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado no regime de alta não linearidade.	61
32	Evolução temporal do desvio quadrático médio para alguns valores de χ para $W = 0.5J_0$. O desvio quadrático médio apresenta um comportamento balístico nos tempos iniciais e após um transiente inicial apresenta um comportamento difusivo para tempo longo.	61
33	Evolução temporal do pacote magnônico $ \psi_n ^2$ inicialmente totalmente localizado no centro da cadeia ferromagnética e das deformações na rede $x_{n+1} - x_{n-1}$ inicialmente estática para $\tau = 10^{0.5}$. (a) Sem acoplamento ($\chi = 0.0$) com a rede ela permanece estática e mágnon se dispersa pela rede, (b) com um valor pequeno de acoplamento ($\chi = 0.5$), surgem modos não dispersivos caminhantes acoplados com a rede que também apresenta estruturas que os acompanha. (c) Com o aumento de χ ($= 1.0$), os estados ligados têm velocidade menor do que em $\chi = 0.5$ e (d) para grandes valores de χ ($= 1.5$), o pacote é predominantemente aprisionado no centro da cadeia com velocidade zero.	64
34	Média temporal das funções participações para alguns valores de τ para um tempo muito longo. A participação do (a) mágnon e da (b) rede apresenta um decaimento com surgimento de uma singularidade que representa uma transição de fases. O comportamento da singularidade é mais abrupto com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede.	65

- 35 Média temporal da (a) probabilidade de retorno R_0 e a (b) função de retorno da rede ρ_0 para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Ambas são praticamente nulas até um valor χ_c e apresentam uma transição descontínua para valores altos, indicando a formação de *polarons* estacionários no centro da cadeia. A descontinuidade é maior com o aumento de τ . Após a transição, ρ_0 aumenta com uma lei de potência do tipo $(\chi - \chi_c)^{0.5}$. O comportamento de ambas as funções após a transição é mais suave com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede. 66
- 36 (a) Densidade de probabilidade do mágnon e (b) distribuição das deformações simétricas na rede nos tempos $t = 1000t_m$, $1500t_m$ e $2000t_m$ para $\tau = 10^{0.5}$ e $\chi = 1.0$. As duas funções apresentam estruturas não dispersivas caminhantes do tipo solitônicas na mesma posição. Na figura (b) vemos que nestes instantes de tempo a cauda longa praticamente não influencia mais o *polaron* viajante. As estruturas não dispersivas em $|\psi_n|^2$ e $|x_{n+1} - x_{n-1}|$ normalizadas ao pico para $\chi = 1.0$ (c), *polarons* viajantes, e $\chi = 1.5$ (d), *polarons* estacionários, é proporcional à $\text{sech}^2[\lambda(n \pm v_{tra}t/t_m)]$ 67
- 37 (a) Média temporal da velocidade dos *polarons* viajantes para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Próximo à transição o comportamento da velocidade é dada por uma lei de potência do tipo $(\chi_c - \chi)^{0.5}$. (b) Espaço de fases dos valores de χ_c em função de τ . Acima desta curva há formação de *polarons* estacionários no centro da cadeia e abaixo há *polarons* viajantes. Para valores de $\tau > 10$ a dependência de χ_c pode ser representada por uma lei de potência do tipo τ^{-2} que tende a $\chi_c = 1.825$ para $\tau \rightarrow \infty$ 68
- 38 Média temporal das variações das energias adimensionais dos mágnons (a) e da rede (b) para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Elas apresentam uma mudança de comportamento na transição, mas aumentam com o valor de χ . O comportamento de ambas as funções após a transição é mais suave com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede. Para valores pequenos de χ , as energias têm uma dependência linear. 69

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	MODELOS ELETRÔNICOS EM BAIXA DIMENSIONALIDADE	16
2.1	Modelo de Bloch	17
2.2	Localização de Anderson	21
2.3	Sistema eletrônico não linear	24
2.3.1	Vibrações internas em estruturas moleculares	26
2.3.2	Modos vibracionais em cadeias de poliacetileno	30
2.3.3	Interação éxciton-rede em proteínas α -hélice	32
3	MÁGNONS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS	36
3.1	Momento angular intrínseco e interação de troca entre dois elétrons	36
3.2	Mágnons não interagentes em cadeias ferromagnéticas	40
4	MÁGNONS FERROMAGNÉTICOS ACOPLADOS À REDE HARMÔNICA	48
4.1	Transição para <i>self-trapping</i> e formação de <i>solitons</i>	52
4.2	Enfraquecimento da localização no sistema desordenado	57
4.3	Formação de <i>polarons</i>	62
5	CONCLUSÃO	71
	REFERÊNCIAS	73
	APÊNDICE A - DNLSE no modelo de Holstein	84
	APÊNDICE B - MDNLSE no modelo de Davydov	87
	ANEXO A - Artigo publicado	91

1 INTRODUÇÃO

A área de estudo de estado sólido busca novas formas de estruturar materiais para transporte eletrônico ou mesmo inserir efeitos externos que melhorem a eficiência para reter ou transferir informação. Dispositivos de estado sólido para armazenamento de dados (SSDs¹) têm sido amplamente usados na sociedade, como *pen drives*, cartões e placas de memória. Devido aos aprimoramentos aos longos dos anos, os dispositivos de armazenamento por meio eletrônico tem uma alta eficiência de transferência de informação, apesar da capacidade de armazenamento ser pequena. Estes dispositivos são geralmente utilizados para aprimoramento de transferência de informação que comumente é armazenada de outros meios. Outras alternativas de dispositivos de armazenamento foram criadas, como por meio ótico e magnético. O armazenamento ótico é mais utilizado para gravações de multimídia, devido à forma de leitura por impressões feitas em materiais, como os CDs² e DVDs³. Já o magnético é geralmente feito com materiais que retêm grande quantidade de informação, isto é, sistemas magnéticos podem ser compactos e ainda armazenar uma grande quantidade de informação. Isto se deve também a sua construção com partes móveis, ao contrário do armazenamento eletrônico. Um exemplo amplamente conhecido é o Disco Rígido (HD⁴).

Para análise, podemos encontrar comumente um SSD com velocidade de transferência de dados de 520 MB/s, mas com 240 GB de armazenamento [1], DVDs com 29.7 MB/s de transferência e 8.5 GB de capacidade de armazenamento [2], assim como CDs podem ter 88.5 MB/s e 700 MB [3]. Além disso, os HDs podem chegar a 14 TB de capacidade de armazenamento [4]. Já sua velocidade de escrita e leitura de dados é normalmente entre 50 e 120 MB/s [5] devido às limitações causadas pelo cabeçote de leitura e gravação. Devido a este fator, a junção de um SSD ao HD se tornou mais comum. Diante desses valores, vemos que os dispositivos por meio magnético são ótimos em armazenar informações, mas normalmente eles são integrados em outros sistemas, como eletrônico ou ótico para melhorar a transferências de dados.

Embora este cenário recente transmita a ideia de obsolescência dos sistemas magnéticos para transferência de informação, estudos recentes prometem novas perspectivas. A *magnônica* é uma área de estudo que investiga o comportamento de ondas de *spins*⁵, mágnons, que ocorrem em elementos nanoestruturados. Vários estudos indicam os mágnon como fundamentais para a computação quântica e transferência de dados mais eficiente principalmente devido ao comportamento destas partículas ocorrerem muito rápido

¹Do inglês, *Solid State Drive*.

²Sigla do inglês para *Compact Disc*.

³Sigla para *Digital Versatile Disc*.

⁴Derivado de HDD, que do inglês significa *Hard Disk Drive*.

⁵De forma simplificada, estas ondas ocorrem devido às excitações magnéticas coletivas que geram um reorganização magnético que se propaga no material através da precessão dos *spins*.

(ordem de nanossegundos) e em comprimentos pequenos (ordem de micrometros). Estruturas magnéticas não apresentam problemas de aquecimento como o Efeito Joule presente nas eletrônicas. Desta forma, nano-osciladores *spin*-Hall [6,7] e análogos de componentes eletrônicos para sistemas magnéticos, como diodo [8,9] e transistor [10,11], são objetos de estudos recentes.

Com a descrição dos mágnons, a capacidade de guardar informação de forma dinâmica em sistemas magnéticos tem sido tema de estudos no âmbito acadêmico. Podemos citar, por exemplo, a busca por materiais que podem incrementar os componentes que necessitavam maior quantidade de informações armazenadas. Em alguns materiais chamados magnetolásticos, há efeitos não lineares que podem gerar a formação de *solitons* em meios magnéticos. Como *solitons* são definidos pelo perfil do pacote da onda e este armazena informação física, efeitos não lineares podem trazer uma nova perspectiva para o armazenamento de informação de forma dinâmica.

Diante deste contexto, o presente trabalho busca abordar um sistema ferromagnético anisotrópico de *spin* 1/2, onde a dinâmica do mágnon neste material sofre influência da dinâmica da rede. A anisotropia gerada por efeitos como o de *spin*-órbita, acoplará a dinâmica do mágnon com a dinâmica da rede, que será aproximada para uma rede harmônica. Devido à expectativa de construção de dispositivos para componentes eletrônicos em temperaturas ambientes, nosso trabalho tem como finalidade principal descrever a dinâmica de mágnons não interagentes nestes sistemas magnetolásticos ferromagnéticos em altas temperaturas na presença de um campo magnético constante e uniforme. Buscamos também mapear efeitos não lineares conhecidos na literatura em meios eletrônicos para estes meios magnéticos, como o fenômeno de *self-trapping*, formação de *solitons*, de *polarons* e enfraquecimento da localização de Anderson.

Para melhor compreensão, iniciamos descrevendo e discutindo os modelos teóricos que fundamentam o presente trabalho. Além de abordarmos modelos que servem de base para construção de outros, como o de Bloch e de Anderson, no próximo capítulo descrevemos alguns modelos de sistemas não lineares eletrônicos. No capítulo seguinte apresentamos a abordagem de mágnons em sistemas ferromagnéticos e discutimos um paralelo comparativo entre as características destes mágnons e as características dos elétrons no cristal. No capítulo 4 investigamos a influência dos modos vibracionais da rede magnetolástica sob a dinâmica do mágnon. Neste cenário de mágnons não interagentes entre si e acoplados às deformações na rede, investigamos a formação de *solitons* no sistema cristalino tanto dentro do regime da aproximação adiabática, tanto no regime oposto. Também abordamos a competição que pode haver num sistema desordenado entre os efeitos não lineares e os efeitos de localização pela desordem.

2 MODELOS ELETRÔNICOS EM BAIXA DIMENSIONALIDADE

No estado sólido são estudadas estruturas cristalinas construídas por elementos, como átomos ou moléculas, espacialmente organizadas de forma periódica. Apenas os sólidos apresentam estruturas cristalinas e uma grande variedade delas, incluindo os metais, tem arranjos cristalinos.

A estrutura cristalina pode ser construída pela repetição de uma estrutura elementar, definida como *célula unitária*. A forma e tamanho da célula unitária de cada cristal depende das dimensões, valência química e estado de ionização dos átomos ou moléculas que o compõem e das condições em que o cristal se formou. Uma mesma substância, sob condições de pressão e temperatura distintas, pode formar cristais com células unitárias totalmente distintas. O carbono, por exemplo, pode cristalizar sob algumas formas, como o diamante, o grafite, fulerenos e outras variantes de fibra de carbono. As estruturas orgânicas, como açúcares, proteínas e lipídios também podem assumir grande complexidade estrutural dependendo das condições quando cristalizadas.

As células unitárias são estruturas geométricas que podem ser definidas com um conjunto de *parâmetros de rede*. A partir das células unitárias é possível descrever qualquer cristal utilizando o diagrama da *rede de Bravais*, em homenagem à Auguste Bravais [12, 13]. Esta rede é um artifício matemático que descreve a geometria da estrutura periódica subjacente sem descrição das unidades reais.

Uma rede de Bravais é um arranjo infinito de pontos discretos com arranjos e orientação que parecem exatamente os mesmos, de qualquer um dos pontos do qual o arranjo é visualizado [14]. Todos os vetores \mathbf{R} que descrevem os pontos da rede de Bravais podem ser definidos como uma combinação linear de vetores base $\{\mathbf{a}_n\}$ chamados de *vetores da rede*, assim

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3. \quad (1)$$

Contudo, a idealização da rede de Bravais não descreve totalmente a realidade, pois muitas células unitárias nos cristais naturais são substituídas por impurezas ou há deformações na rede, dando características distintas aos materiais e modificando propriedades térmicas, óticas e eletrônicas. Além disto, outras características como a maleabilidade da rede que pode gerar modos vibracionais necessitam de uma descrição mais detalhada.

Apresentamos a seguir o primeiro modelo quântico que descreveu o transporte eletrônico numa estrutura cristalina, o *modelo de Bloch*. Este modelo descreve a dinâmica de elétrons não interagentes na presença de um potencial periódico, *a priori*, infinito. Os elementos da rede utilizados a seguir serão tratados como fixos nos pontos de uma rede de

Bravais que, por simplicidade, será trabalhado em uma dimensão com apenas um vetor de rede, mas facilmente generalizável para dimensões maiores.

2.1 Modelo de Bloch

O modelo proposto por Felix Bloch [15] apresentou pela primeira vez a visão de transporte eletrônico puramente quântico. Seu modelo parte da ideia de resolver a equação de Schroedinger [16] para uma estrutura cristalina. Uma vez que os íons de um cristal perfeito são regularmente espaçados, o potencial que representa a rede deve conter a mesma periodicidade.

No caso mais simples de uma cadeia, uma rede unidimensional, com todos os íons iguais e igualmente espaçados pelo vetor da rede \mathbf{a} , o potencial que representa a mesma periodicidade da rede é do tipo

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Bloch sugeriu resolver a equação de Schroedinger independente do tempo

$$\mathcal{H}_{el}\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

para obter os autoestados do elétron. $\psi(\mathbf{r})$ é a função de onda de um único elétron e descreve os efeitos da dinâmica de muitos elétrons, tratando-os como elétrons independentes devido à fraca interação entre eles em metais. Aqui, $-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2$ é o termo dispersivo e corresponde ao operador energia cinética do elétron.

Para um elétron livre [$U(\mathbf{r}) = 0$], a solução da equação de Schroedinger é $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ [17], então Bloch sugere a solução para o potencial periódico como

$$\psi(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (4)$$

onde $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é uma função que apresenta a mesma periodicidade do potencial, então

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Esta solução ficou conhecida como o *teorema de Bloch*. Podemos ainda utilizar este e escrever

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}). \quad (6)$$

A partir desta solução, vemos que a função de onda apresenta a mesma periodicidade

dade da rede a menos de um termo de fase. Desta maneira, $|\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$, então é possível inferir, por repetição, que a densidade de probabilidade se estende por toda a rede. Como a equação (4) é autofunção do hamiltoniano \mathcal{H}_{el} , a dinâmica de um pacote de onda arbitrário tende às soluções do tipo da equação (4). Assim, Bloch encontra que o elétron na rede tende a seu estado estacionário estendido pela rede.

Podemos utilizar a aproximação *tight-binding* [14] para discretizar o hamiltoniano de Bloch. A partir desta aproximação, onde o elétron está fortemente ligado aos íons, definimos estados localizados nos íons com o custo energético de ligação ε correspondente à energia eletrostática entre o elétron e o íon com a correção da presença da rede. Além disto, a superposição entre os estados localizados deve ser desprezível de forma que os estados sejam semelhantes ao elétron ligado a um íon isolado. Porém a superposição deve ser grande o suficiente para que haja um acoplamento entre os íons. Chamaremos de termo de *hopping* $\gamma_{n,m}$ o parâmetro que acopla os íons n e m e iremos impor $\gamma_{n,m} = \gamma_{m,n}$ devido ao hamiltoniano ser hermitiano.

O hamiltoniano de Bloch discreto de uma cadeia de N sítios dada pela aproximação *tight-binding* é

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{n=1}^N \left(\varepsilon c_n^\dagger c_n - \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \gamma_{n,m} c_m^\dagger c_n \right). \quad (7)$$

Onde c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação, respectivamente, do estado localizado no sítio n . O parâmetro ε , os elementos da diagonal, corresponde ao termo de interação potencial *onsite*. De forma geral, este termo pode variar no espaço (fazendo a transformação $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_n$), mas no hamiltoniano de Bloch há simetria por translação e o valor de ε é constante para toda a rede. O termo de *hopping* $\gamma_{n,m}$, os elementos fora da diagonal, é o termo cinético responsável pela mobilidade do elétron na cadeia, visto que acopla dois sítios diferentes e permite a transição entre estados localizados. Este termo é a contribuição dispersiva do hamiltoniano.

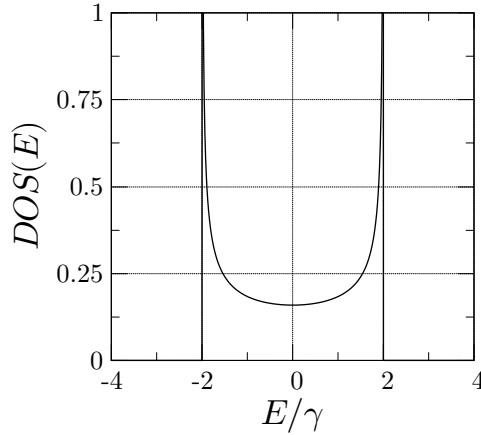
Podemos escrever o hamiltoniano (7) na aproximação de primeiros vizinhos ($m = \pm 1$) e, sem perdas de generalidade, redefinir o referencial de energia fazendo $\varepsilon = 0$, isto é:

$$\mathcal{H}_{el} = -\gamma \sum_{n=1}^N (c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n). \quad (8)$$

Aqui, fizemos $\gamma_{n,n\pm 1} = \gamma$ tendo em vista o sistema cristalino com simetria translacional.

Utilizando este hamiltoniano, construímos um algoritmo computacional para uma diagonalização direta, isto é, resolvemos numericamente a equação $\det(\mathcal{H}_{el} - E\mathbf{1}) = 0$ para

Figura 1 - Densidade de Estados (DOS) para elétrons não interagentes numa cadeia cristalina na aproximação *tight-binding* de interação de primeiros vizinhos.



Fonte: Autor, 2020.

o caso $N = 10^6$. A partir do espectro de autovalores, montamos a *Densidade de Estados* (DOS^6) apresentada na Figura 1.

Utilizando uma solução do tipo

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n |n\rangle, \quad (9)$$

em que $|n\rangle$ é o estado localizado no sítio n e $\sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 = 1$. Com o hamiltoniano da equação (8), resolvemos a equação de Schrodinger independente do tempo

$$E|\Psi\rangle = \mathcal{H}_{el}|\Psi\rangle \quad (10)$$

e encontramos a seguinte relação de recorrência:

$$E\psi_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (11)$$

Propondo $\psi_n = Ae^{ikna}$ e as condições periódicas de contorno ($|n+N\rangle = |n\rangle$), encontramos

$$E(k) = 2\gamma \cos(ka), \quad (12)$$

onde deixamos explícito a dependência de E com k . Esta é chamada de *relação de dispersão* do elétron de Bloch numa rede unidimensional. Por este resultado, vemos que $-2\gamma \leq E \leq 2\gamma$ e esta faixa de energia de 4γ é chamada de *largura de banda*. A partir desta relação de dispersão, podemos calcular a $DOS(E)$ como

$$DOS(E) = N \left| \frac{dk}{dE} \right| = \frac{N}{a} \frac{1}{\sqrt{4\gamma^2 - E^2}}, \quad (13)$$

⁶Do inglês, *Density of States*.

onde $N = a/\pi$ é a constante de normalização. Esta é a mesma $DOS(E)$ apresentada na Figura 1.

Resolvemos, então, a equação de Schroedinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \mathcal{H}_{el}|\Psi\rangle \quad (14)$$

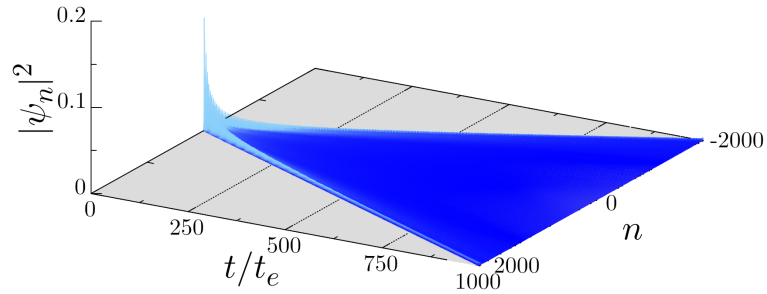
utilizando a solução proposta em (9) e encontramos a seguinte relação de recorrência:

$$i\hbar\dot{\psi}_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}), \quad (15)$$

que descreve a dinâmica do pacote eletrônico. Aqui, i é a unidade imaginária e \hbar a constante de Planck. Estamos utilizando a notação de Newton em que $\dot{\psi}_n = \frac{d}{dt}\psi_n$. Esta equação é chamada de *equação de Schroedinger discreta* (DSE⁷).

A partir da DSE, construímos um algoritmo computacional para fazer a evolução temporal utilizando o método de Runge-Kutta de 4^a ordem [18] para cálculo de integração numérica. Fizemos a evolução temporal a partir da condição inicial do tipo delta ($\psi_n = \delta_{n,0}$), isto é, o estado totalmente localizado no centro da cadeia. Aqui definimos o centro da cadeia com o índice 0.

Figura 2 - Evolução temporal do pacote de onda eletrônico da condição inicial do tipo delta numa cadeia com $N = 4 \cdot 10^3$ até o tempo $t = 10^3 t_e$.



Fonte: Autor, 2020.

Apresentamos na Figura 2 a evolução temporal do elétron a partir do pacote inicial do tipo delta numa cadeia de $N = 4 \cdot 10^3$ e vemos que o estado evolui tendendo ao estado estendido por toda a rede, assim como foi relatado por Bloch. A evolução temporal foi feita até $t = 10^3 t_e$, onde $t_e = \hbar/\gamma$ é o tempo característico do elétron, isto é, o tempo necessário para o elétron saltar de um sítio para o seu vizinho.

Porém, os elétrons em sistemas mais complexos não se comportam como o elétron de Bloch. Uma das situações possíveis é haver imperfeições na rede, como os arranjos dos elementos ou a composição deles, quebrando a simetria por translação. Outra situação possível é a interação do elétron com outras partículas ou quasipartículas. A seguir,

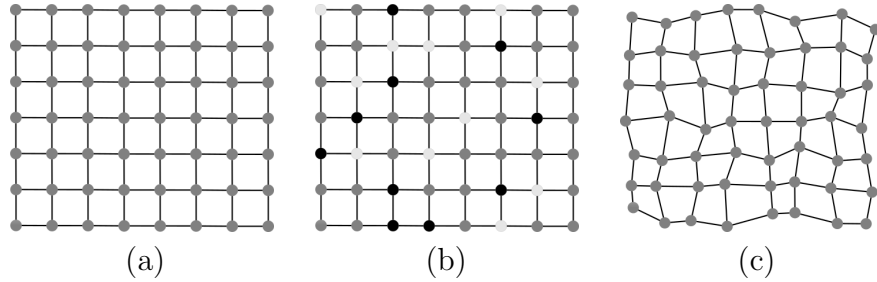
⁷Do inglês, *Discrete Schroedinger Equation*.

apresentaremos como as imperfeições na rede promovem a localização do pacote de onda e a interação do elétron com os modos vibracionais da rede cria estados autoaprisionados.

2.2 Localização de Anderson

Estruturas cristalinas nanoestruturadas são difíceis de se encontrar na natureza e também difíceis de se produzir em laboratório. Os cristais encontrados na natureza, em sua maioria, apresentam imperfeições. Estes defeitos no material alteram as suas propriedades físicas, como propriedades térmicas, óticas e elétricas.

Figura 3 - Representação de uma rede bidimensional quadrada cristalina regular (a) e com alguns tipos de defeitos: os defeitos podem ser composicional (b), que apresenta mais de um tipo de elemento na sua construção, ou podem ser estrutural (c), com a distância entre os elementos da rede com distribuições distintas.



Fonte: Autor, 2020.

Essas imperfeições podem ser do tipo composicional, ao qual temos átomos ou estruturas moleculares diferentes como dopagem no material, não podendo descrever o material através de uma única célula unitária. A Figura 3b apresenta uma rede quadrada com três tipos de elementos. Essas imperfeições também podem ser do tipo estrutural, em que o arranjo podem sofrer alterações com elementos deslocados, como mostra a Figura 3c.

Um dos primeiros estudos que tentaram descrever as propriedades elétricas destes materiais foi desenvolvido por Philip Warren Anderson [19], em que ele considera que as imperfeições na rede (assumiremos o nome de *desordem* a partir deste ponto) são distribuídas aleatoriamente por ela sem qualquer tipo de correlação. Assim, no hamiltoniano discreto de Bloch, a equação 7, a desordem de Anderson permite que os potenciais *on-site* (desordem diagonal) ou os termos de *hopping* (desordem fora da diagonal) assumam valores aleatórios.

Em seu trabalho, ele assume que os termos de *hopping* podem ser considerados constantes e acoplam apenas os primeiros vizinhos, mas o potencial *on-site* varia de forma aleatória. Logo, o hamiltoniano que será tratado é

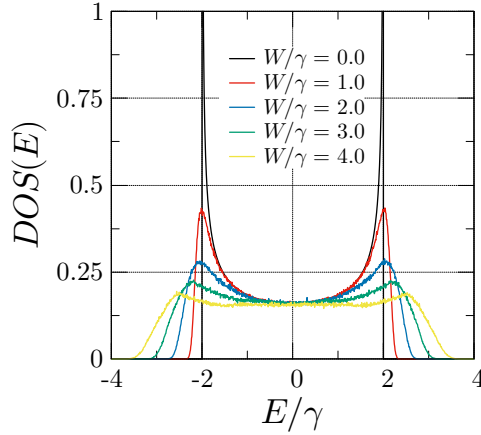
$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{n=1}^N \left[\varepsilon_n c_n^\dagger c_n - \gamma (c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n) \right]. \quad (16)$$

Os valores atribuídos a ε_n seguem uma distribuição uniforme dada por

$$\mathcal{P}(\varepsilon_n) = \begin{cases} \frac{1}{W} & , \quad -\frac{W}{2} \leq \varepsilon_n \leq \frac{W}{2} \\ 0 & , \quad |\varepsilon_n| > \frac{W}{2} \end{cases} , \quad (17)$$

em que W é chamado de largura de desordem. Claramente quando $W = 0$, recuperamos o modelo de Bloch com simetria de translação e, para qualquer valor de $W \neq 0$, há uma quebra na simetria por translação.

Figura 4 - Densidade de estados DOS de elétrons não interagentes numa cadeia desordenada no modelo de Anderson na aproximação de primeiros vizinhos para alguns valores de largura de desordem W .



Fonte: Autor, 2020.

A partir deste hamiltoniano, podemos efetuar a diagonalização exata ao resolver a equação $\det(\mathcal{H}_{el} - E\mathbf{1}) = 0$ e a partir do espectro de energia, encontrar a DOS para este sistema. A Figura 4 mostra que a presença de desordem no sistema quebra a alta degenerescência que havia e a medida que a largura de desordem aumenta, a largura de banda também seguindo a relação $|E| \leq 2\gamma + W/2$ [20], mas mantendo a simetria. Além disto, não é percebido uma descontinuidade na DOS para qualquer valor de largura de desordem não nula. Este comportamento está presente em muitos sistemas desordenados e o fato de não ter descontinuidade na DOS é um forte indicativo de haver estados localizados. Cada curva destas foram feitas com a média sobre 20 amostras para $N = 10^5$.

A partir deste mesmo hamiltoniano, assim como mostramos na seção anterior, podemos encontrar a relação de recorrência

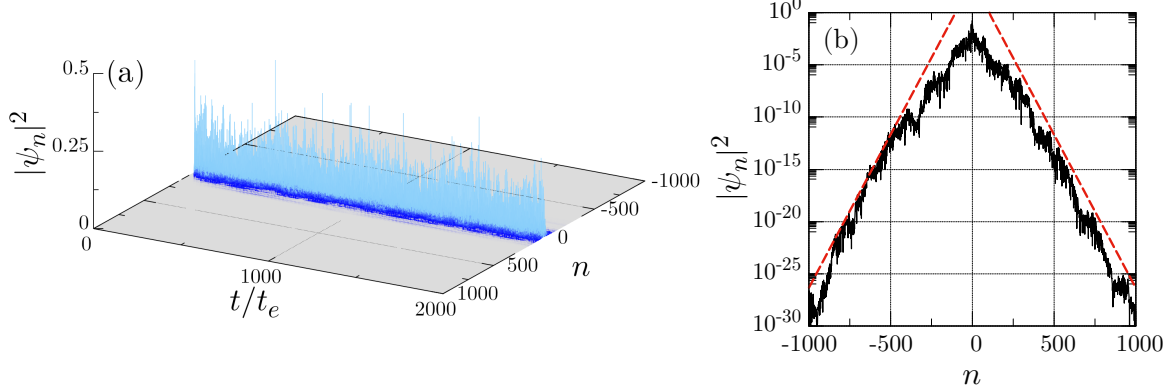
$$i\hbar\dot{\psi}_n = \varepsilon_n\psi_n - \gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (18)$$

Esta equação descreve a dinâmica do elétron nesse material desordenado.

Anderson afirma que para qualquer valor da largura de desordem W não nula, a quebra de simetria promove a localização espacial do pacote de onda eletrônico. Além

disto, a *localização de Anderson* tem por característica, o pacote estar exponencialmente localizado, isto é, o pacote contém um envelope que decai exponencialmente com a posição.

Figura 5 - (a) Evolução temporal da densidade de probabilidade do elétron com desordem diagonal de largura $W = 2\gamma$ e (b) seu perfil exponencialmente localizado em $t = 2 \cdot 10^3 t_e$. A linha tracejada foi construída a partir de $e^{-|n-\langle n \rangle|/l}$, com $\langle n \rangle = 0$ e $l = 14.81$.



Fonte: Autor, 2020.

Construímos um algoritmo computacional para calcular a evolução temporal da dinâmica do pacote inicialmente totalmente localizado no centro da cadeia (apresentado na Figura 5a) utilizando o método de integração numérica de Runge-Kutta de 4ª ordem. Em comparação com a Figura 2, vemos que a presença da desordem não permite o pacote se estender como no caso cristalino de Bloch. Na Figura 5b, mostramos o perfil do pacote eletrônico, a densidade de probabilidade em $t = 2 \cdot 10^3 t_e$. Este gráfico está apresentado em escala log-decimal, onde a característica da queda em linha reta, mostra que há um envelope exponencial. Resultados semelhantes aos encontrados em [21]. O envelope é dado por uma função do tipo $e^{-|n-\langle n \rangle|/l}$, onde l é o *comprimento de localização* e $\langle n \rangle$ a posição média do pacote. Para a condição inicial do tipo delta, temos que $\langle n \rangle(t) \approx 0$, isto é, o pacote está localizado em torno do centro da cadeia. Na Figura 5, a curva tracejada é proporcional a $e^{-|n|/14.81}$.

A partir deste estudo, foram feitos diversos outros teóricos e experimentais nas áreas de ótica [22–24], ondas de matérias [25–27], condensados de Bose-Einstein [28–31], excitações coletivas de *spins* [32–35] e transporte eletrônico [19, 36–38]. Dentre eles, a desordem de Anderson foi inspiração para buscar sistemas que tenham transição metal-isolante, isto é, a transição do sistema regido por estados estendidos para localizados mediante o controle do parâmetro, neste caso, da largura de desordem.

Baseados nas ideias de David James Thouless [36] que propôs que a transição podia ser controlada por um parâmetro à temperatura de zero absoluto, os autores Elihu Abrahams e colaboradores criaram a *Teoria de Escala* [37]. Nesta, demonstraram que em sistemas de dimensão $d > 2$ pode ocorrer uma transição entre estados localizados e estados estendidos. Em sistemas de baixa dimensionalidade, $d \leq 2$, não é previsto estados

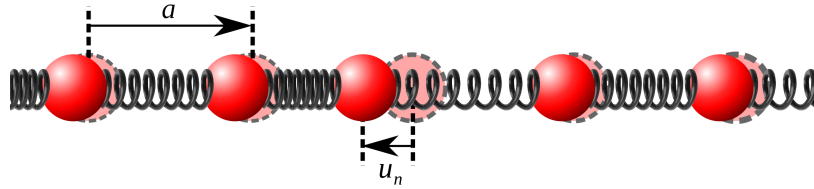
estendidos em sistemas desordenados. Contudo, estudos recentes mostram que a presença de correlações nos termos que antes eram independentemente aleatórios, podem promover a existência de estados estendidos. Estudos de correlação de curto alcance em sistemas de dímeros aleatórios [39] e correlação de longo alcance [40] são exemplos de casos em que há estados estendidos em sistemas de baixa dimensionalidade.

Além da desordem, outros elementos podem desempenhar papel predominante na dinâmica do elétron. Um desses elementos podem gerar efeitos não lineares. Apresentaremos um sistema não linear para sistemas eletrônicos na próxima seção.

2.3 Sistema eletrônico não linear

A rede, ainda que cristalina, pode apresentar maleabilidade. A vibração dos íons acoplados pelas ligações químicas pode ser descrito como uma rede de massas acopladas por molas aos seus vizinhos. Para explicar o fenômeno, assumiremos uma cadeia de N corpos de massas M acopladas por molas harmônicas de constante elástica κ .

Figura 6 - Representação de íons por esferas idênticas cuja ligações químicas são representadas por molas harmônicas idênticas. Está representado o vetor da rede \mathbf{a} entre as posições de equilíbrio de dois íons consecutivos e a deflexão \mathbf{u}_n de um íon n . As posições de equilíbrio estão marcadas em círculos tracejados.



Fonte: Autor, 2020.

Desta forma, o hamiltoniano clássico que descreve as energias do sistema é dado por

$$\mathcal{H}_{latt} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \mathbf{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1})^2 \right], \quad (19)$$

onde \mathbf{u}_n e $\mathbf{p}_n = M\dot{\mathbf{u}}_n$ são a posição e momento da massa n , respectivamente, medidos a partir da sua posição de equilíbrio desta. A Figura 6 apresenta uma cadeia de íons com a representação do vetor posição \mathbf{u}_n do íon n medido a partir da sua posição de equilíbrio marcado pelo centro do círculo tracejado e o vetor da rede \mathbf{a} medido entre a distância da posição de equilíbrio de dois íons consecutivos.

O mesmo fenômeno pode ser abordado por um tratamento puramente quântico utilizando os operadores criação b_n^\dagger e aniquilação b_n bosônicos

$$\mathcal{H}_{latt} = \sum_n \hbar\omega_0 b_n^\dagger b_n, \quad (20)$$

em que este hamiltoniano em termos da constante de Planck \hbar e da frequência natural $\omega_0^2 = \kappa/M$ descreve a existência de *fônons*⁸. Não abordaremos o tratamento quântico, pois este é ideal nos casos em que $\hbar\omega_0 \gg k_B T$ (aqui k_B é a constante de Boltzman e T a temperatura), isto é, quando as temperaturas são baixas. Em baixas temperaturas o tratamento clássico não corresponde bem às observações, mas para temperaturas altas $\hbar\omega_0 \ll k_B T$, os dois tratamentos coincidem [14].

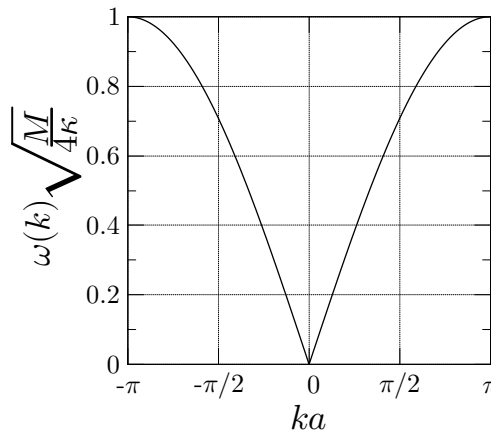
A partir das equações de Euler-Lagrange aplicadas na equação (19), encontramos a relação de recorrência que rege a dinâmica do sistema

$$M\ddot{\mathbf{u}}_n + \kappa(2\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_{n-1}) = 0. \quad (21)$$

Esta equação nos descreve a dinâmica da cadeia unidimensional de osciladores harmônicos acoplados. Assumindo a deflexão dos íons na direção da cadeia, isto é, modos de vibração longitudinal, podemos sugerir a solução do tipo $u_n(t) = Ae^{i(kna-\omega t)}$, onde k é o módulo do vetor de onda e ω a frequência da onda. A partir desta podemos encontrar a relação de dispersão

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4\kappa}{M}} \left| \sin\left(k\frac{a}{2}\right) \right|. \quad (22)$$

Figura 7 - Relação de dispersão do modo acústico de uma cadeia cristalina de osciladores idênticos acoplados por molas idênticas.



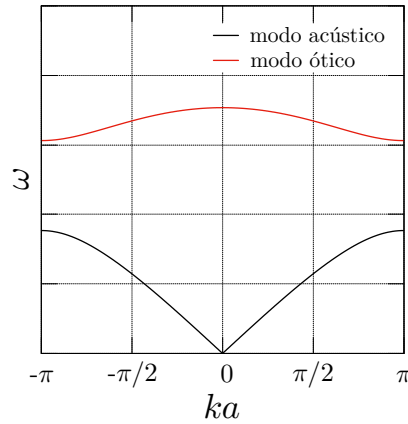
Fonte: Autor, 2020.

Esta relação de dispersão está apresentada na Figura 7. Quando $k \rightarrow 0$, vemos que $\omega(k) \rightarrow \frac{a}{2}\sqrt{\frac{4\kappa}{M}}k$, assim como, no gráfico, quando $k \rightarrow 0$, vemos que $\omega(k) \sim k$. Este modo de vibração é definido como *modo acústico*⁹.

⁸Fônons são quasipartículas bosônicas que surgem na quantização de energia de modos vibracionais de osciladores. Mesmo em temperatura nula, a energia de um gás de fônons não é nula, apesar do que se previa classicamente.

⁹Este nome faz analogia ao movimento dos íons em fase, assim como ocorre em ondas acústicas. Isto é, a frequência de onda acústica é proporcional ao seu número de onda.

Figura 8 - Relação de dispersão dos modos acústico e ótico de uma cadeia cristalina composta por dois íons de massas diferentes.



Por outro lado, se assumirmos um cristal com célula unitária formado por duas massas diferentes ou duas molas diferentes, surge modos vibracionais diferentes. Além do modo acústico, há solução que temos $\omega(k) - \omega_0 \sim k^2$, quando $k \rightarrow 0$, este modo é definido como *modo ótico*¹⁰. A Figura 8 apresenta a relação de dispersão dos dois modos quando a célula unitária contém dois íons de massas diferentes e molas idênticas.

Neste caso em especial, quando $k \rightarrow 0$ no modo ótico, há uma frequência diferente de zero (ω_0), mas não há velocidade de grupo definida por $v_g = \frac{d}{dk}\omega(k)$. Neste caso em especial, as oscilações apresentadas no cristal são semelhantes às oscilações independentes de uma célula unitária para a outra.

O elétron em condução no cristal pode sofrer influência devido aos modos vibracionais presentes. Em especial, a interação entre o elétron e a dinâmica da rede é mais acentuada em compostos semicondutores orgânicos. Modos vibracionais da rede podem alterar significativamente o comportamento dos elétrons. A seguir apresentaremos alguns modelos que abordam elétrons de condução sob a influência de modos vibracionais. O primeiro a ser apresentado é o *modelo de Holstein*, que apresenta uma cadeia cristalina molecular cujo tem grau de vibração interno e desacoplado de uma molécula à outra. Apresentaremos também o *modelo SSH* que apresenta osciladores acoplados numa estrutura unidimensional de poliacetileno. Por último, apresentaremos o *modelo de Davydov* para descrição de um éxciton em cadeias orgânicas maleáveis.

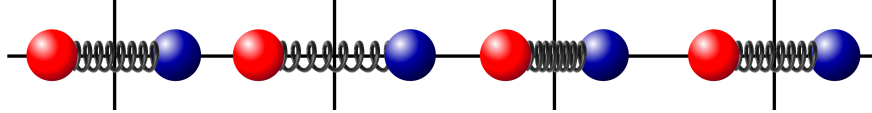
2.3.1 Vibrações internas em estruturas moleculares

Holstein apresenta, em seus dois trabalhos [41, 42], uma descrição da dinâmica de elétrons não interagentes sob a influência de modos vibracionais da rede. Para descrever

¹⁰O nome deste modo de vibração é dado devido ao fato de a interação com luz poder promover oscilações sem fornecer velocidade de grupo a um cristal iônico.

fenômenos de *polarons*¹¹, ele apresenta em seu modelo um cristal com células unitárias de uma molécula diatômica. Estas moléculas tem um grau de vibração interna e com oscilações desacopladas com as moléculas vizinhas.

Figura 9 - Representação de uma cadeia molecular de elementos diatômicos como osciladores independentes com molas efetivas representando as ligações químicas maleáveis.



Fonte: Autor, 2020.

Na Figura 9 temos uma representação um cristal com células unitárias de uma molécula unitária com grau de vibração interna. Essas moléculas são tratadas como osciladores independentes.

O hamiltoniano que descreve o sistema cristalino de moléculas como osciladores independentes com um elétron de condução é dividido em três partes: o hamiltoniano que descreve a cadeia, o elétron e a interação entre eles

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{latt}} + \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (23)$$

O hamiltoniano $\mathcal{H}_{\text{latt}}$ corresponde a N osciladores independentes de massas M com constante elástica efetiva κ

$$\mathcal{H}_{\text{latt}} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} \hat{u}_n^2 \right), \quad (24)$$

aqui \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M\dot{\hat{u}}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, da molécula n .

Já o hamiltoniano \mathcal{H}_{el} será dado pelo modelo *tight-binding* para primeiros vizinhos

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = \sum_{n=1}^N \left(\varepsilon_n c_n^\dagger c_n - \gamma_{n,n+1} c_{n+1}^\dagger c_n - \gamma_{n,n-1} c_{n-1}^\dagger c_n \right), \quad (25)$$

onde c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação do elétron na molécula n . ε_n é o potencial *onsite* de custo energético do elétron para permanecer na molécula n e $\gamma_{n,n+1}$ o termo de *hopping* referente ao custo energético do elétron saltar da molécula n para a molécula $n+1$. Para o caso cristalino, definimos $\varepsilon_n = \varepsilon$ e $\gamma_{n,n+1} = \gamma$.

O hamiltoniano \mathcal{H}_{int} representa a interação entre o elétron e os modos vibracionais, então, *a priori*, deve depender explicitamente de $\{\hat{u}_n\}$ e/ou $\{\hat{p}_n\}$. Holstein sugere a

¹¹Quando a presença do elétron na rede a deforma e esta cria uma alteração na densidade de carga da rede, surgem estados ligados. Estes estados ligados são chamados de *polarons*, quasipartículas que se comportam como partículas massivas.

interação é local e proporcional à deflexão da molécula, assim

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{n=1}^N A \hat{u}_n c_n^\dagger c_n, \quad (26)$$

onde A é chamado de constante de acoplamento energético elétron-rede.

Este hamiltoniano nos indica que a presença do elétron na cadeia molecular transfere energia à rede que a deforma e, pelo mesmo termo de interação, a rede transfere de volta a energia ao elétron. Assim, de forma indireta, o elétron se autorregula, podendo aparecer fenômenos como o de autoarmadilhamento, conhecido amplamente na literatura como *self-trapping*.

Para descrever a dinâmica do elétron sob a influência da dinâmica da rede, é necessário resolver a equação de Schroedinger. Em muitos materiais, o tempo característico do elétron $t_{el} = \hbar/\gamma$ (o tempo necessário para o elétron saltar de um sítio n para o seu vizinho ± 1) é muito menor que o tempo característico de oscilação da rede $t_{latt} = \sqrt{M/\kappa}$. Desta forma, utilizaremos aqui uma aproximação conhecida como *aproximação adiabática* para encontrarmos uma única relação de recorrência para descrever a dinâmica do elétron sob influência das vibrações locais. Do contrário, teríamos que tratar de duas relações de recorrências, uma para a dinâmica do elétron e outra para a dinâmica da rede. A aproximação adiabática nos permite desprezar o termo cinético da rede pois como se move de forma muito lenta, temos que $\hat{u}_n \approx 0$ e conseqüentemente $\hat{\dot{u}}_n \approx 0$.

No Apêndice 1 apresentamos a descrição completa da utilização da aproximação adiabática e, como partindo do princípio de minimização de energia, chegamos na relação de recorrência chamada de Equação de Schroedinger Não Linear Discreta (DNLSE¹²).

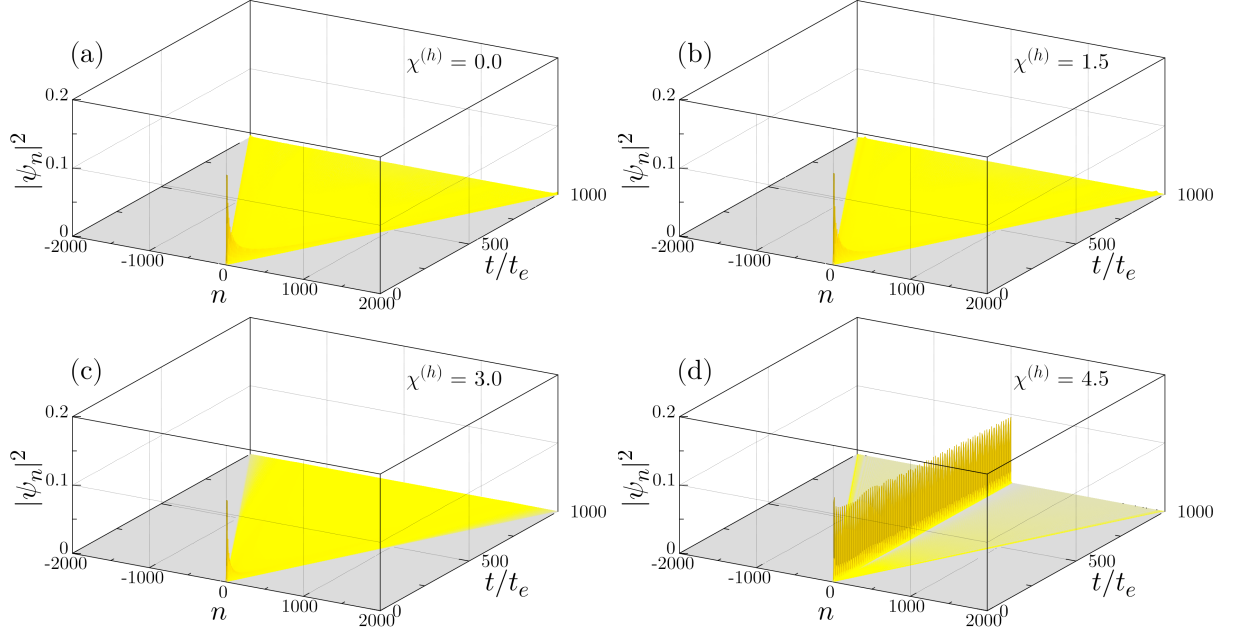
$$i\hbar\dot{\psi}_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \gamma\chi^{(h)}|\psi_n|^2\psi_n \quad (27)$$

Aqui $\chi^{(h)} = A^2/\gamma\kappa$ é chamado de parâmetro efetivo de acoplamento elétron-rede, onde definimos de forma a ser uma grandeza adimensional. Nesta equação, vemos que a não linearidade no caso de Holstein aparece no termo diagonal e depende apenas da porção do elétron no próprio sítio.

É possível perceber que ao iniciarmos com um pacote eletrônico do tipo delta no centro da cadeia ($\psi_n = \delta_{n,0}$), haverá um desnível de $\gamma\chi^{(h)}$ do sítio 0 para o seus vizinhos. Caso o valor de $\chi^{(h)}$ seja grande o suficiente, é de se esperar que o termo de *hopping* não consiga promover a dinâmica de alguma parte do pacote. De fato, Datta e Kundo [43] apresentam em seu trabalho que há um valor crítico de $\chi_c^{(h)}$ de 3.5 que começa a promover autoarmadilhamento um pacote inicialmente localizado no centro de uma cadeia com interação não linear em todos os sítios.

¹²Sigla do inglês *Discrete Nonlinear Schroedinger Equation*.

Figura 10 - Evolução temporal do pacote de onda no modelo de Holstein com $N = 4 \cdot 10^3$ até o tempo $t = 10^3 t_e$ para alguns valores de χ . O caso linear, quando $\chi^{(h)} = 0.0$ (a), vemos que a dinâmica tende ao estados estendidos de Bloch. Para não linearidade fraca, com $\chi^{(h)} = 1.5$ (b) e $\chi^{(h)} = 3.0$ (c), temos soluções semelhantes ao de Bloch e para não linearidade alta, como em $\chi^{(h)} = 4.5$ (d) surge estados autoarmadilhados no centro da cadeia.



Fonte: Autor, 2020.

Apresentamos na Figura 10 a evolução temporal da dinâmica do elétron sob influência das oscilações dos osciladores independentes da rede. Para $\chi^{(h)} = 0.0$ (Figura 10a), o elétron se comporta como o elétron de Bloch; para $\chi^{(h)} = 1.5$ (Figura 10b) e $\chi^{(h)} = 3.0$ (Figura 10c), o pacote sofre influência, mas permanece semelhante ao elétron de Bloch; e para $\chi^{(h)} = 4.5$ (Figura 10d), o pacote apresenta estados autoarmadilhados no centro da cadeia. A evolução temporal foi feita por integração numérica da equação (27) pelo método de Runge-Kutta de 4^a ordem. Assim como foi apresentado anteriormente [43], podemos ver que $3.0 < \chi_c^{(h)} < 4.5$ e com uma análise mais detalhada, é possível verificar que $\chi_c^{(h)} \approx 3.5$.

De fato, os estados ligados autoaprisionados são *polarons* e o Holstein apresenta uma solução analítica da aproximação para o contínuo da DNLSE, equação (27), a solução estacionária da equação não linear após um transiente inicial é

$$|\psi_n|^2 = \frac{\chi^{(h)}}{8} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\chi^{(h)}}{4} (n - n_0) \right]. \quad (28)$$

Nos próximos modelos veremos que as soluções encontradas são semelhantes.

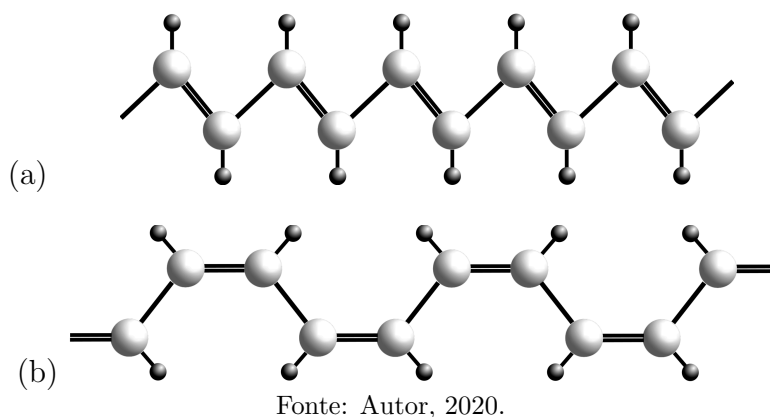
Como mencionado na seção anterior, o modo ótico de osciladores acoplados com velocidade de grupo nula se assemelha a osciladores independentes com mesma frequência, o que traz uma semelhança maior deste modelo de Holstein com os modelos seguintes que

são formados por osciladores acoplados.

2.3.2 Modos vibracionais em cadeias de poliacetileno

O grupo de autores Wu-Pei Su, John Robert Schrieffer e Alan J. Heeger (SSH – Su-Schrieffer-Heeger) apresentaram em dois trabalhos [44, 45] a descrição da formação de *solitons*¹³ em estruturas unidimensionais de poliacetileno nas formas *trans* (Figura 11a) e *cis* (Figura 11a).

Figura 11 - Cadeia unidimensional de poliacetileno na forma *trans* (a) e na forma *cis* (b). As esferas claras e escuras representam carbonos e hidrogênios, respectivamente.



Os autores indicam que as vibrações longitudinais, na direção da cadeia, dos grupos *CH* nestas estruturas de poliacetileno alteram a capacidade do elétron de ir de um grupo *CH* para o outro. O *hopping* é definido na teoria da aproximação *tight-binding* com uma dependência com a distância entre os sítios, desta forma, a oscilação do grupo *CH* altera o valor do *hopping*.

O hamiltoniano que descreve o sistema de grupos *CH* como osciladores acoplados com um elétron de condução sob influência dos modos vibracionais da rede será a soma de duas partes: o hamiltoniano que descreve a dinâmica clássica da rede e o hamiltoniano para a dinâmica do elétron

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{latt}} + \mathcal{H}_{\text{el}}. \quad (29)$$

O hamiltoniano $\mathcal{H}_{\text{latt}}$ é o hamiltoniano clássico para N osciladores de massa M acoplados com constantes elásticas efetivas κ entre os osciladores

$$\mathcal{H}_{\text{latt}} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^2 \right], \quad (30)$$

¹³*Solitons* são definidos como “ondas solitárias”, ondas que não alteram seu perfil com o tempo. Eles são uma das soluções de algumas equações de onda não lineares.

onde \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M\hat{u}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, do n-ésimo grupo CH .

O hamiltoniano \mathcal{H}_{el} será dado pelo modelo *tight-binding* para primeiros vizinhos

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{n=1}^N \left(-\gamma_{n,n+1} c_{n+1}^\dagger c_n - \gamma_{n,n-1} c_{n-1}^\dagger c_n \right), \quad (31)$$

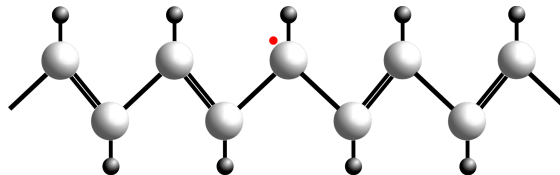
aqui c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação do elétron no n-ésimo grupo CH . $\gamma_{n,n+1}$ é o termo de *hopping* referente ao custo energético do elétron saltar do n-ésimo grupo CH para o n-ésimo+1. Neste caso, sabemos que para o caso cristalino, podemos definir $\varepsilon_n = \varepsilon$, assim como fizemos no modelo de Holstein na equação (25). Escolhemos aqui $\varepsilon = 0$ sem perdas de generalidade.

O acoplamento entre a rede e o elétron se dá pela dependência do termo de *hopping* em relação à deflexão dos grupos CH . Os autores propõem que a dependência em primeira ordem descreve bem o sistema e recupera os fenômenos observados. Assim,

$$\gamma_{n,n+1} = \gamma_0 - \alpha(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n). \quad (32)$$

Onde α é o parâmetro de acoplamento energético elétron-rede e γ_0 o termo de ordem zero que independe da deflexão da rede.

Figura 12 - Estrutura *trans* do poliacetileno quando há um elétron (esfera vermelha) na banda de valência de um carbono, causando um defeito na estrutura.



Fonte: Autor, 2020.

Além disso, neste trabalho, os autores tratam de alternâncias de fases A para B. As fases A e B deste polímero estão relacionadas ao fenômeno de ressonância, onde as ligações químicas do tipo π e σ ficam alternando entre si. O estudo foi feito quando ocorre um defeito devido a presença de um elétron em um dos sítios, cujo o carbono não necessitará mais de quatro ligações e haverá apenas ligações simples. A estrutura *trans* da Figura 11a, quando há o defeito, assume a forma da Figura 12. Nesta figura, a presença do elétron causa um *gap* de energia dos elétrons π e este defeito sugere a localização do pacote de onda e o surgimento de um *soliton*.

As vibrações dos grupos CH apresentadas nos trabalhos de SSH são tratadas como vibrações alternadas, isto é, o deslocamento de um grupo CH tem o sentido oposto do deslocamento dos seus primeiros vizinhos. Assim, podemos escrever as deflexões dos

grupos CH em função de um deflexão da rede sem defeitos \hat{u} para a estrutura *trans*

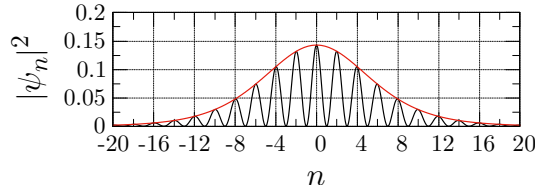
$$\hat{u}_n = \pm(-1)^n \hat{u}, \quad (33)$$

onde o sinal (+) é para a fase A e o sinal (-) para a fase B.

Usando este resultado na equação (32) e definindo $|\gamma_1| = 2\alpha\hat{u}$, podemos escrever

$$\gamma_{n,n+1} = \begin{cases} \gamma_0 - \gamma_1 & \text{se ligação } \sigma \\ \gamma_0 + \gamma_1 & \text{se ligação } \pi \end{cases}. \quad (34)$$

Figura 13 - Solução *soliton* para a estrutura *trans* do poliacetileno no modelo SSH. Gráfico para $l = 7$.



Fonte: Autor, 2020.

Como o elétron não é sempre localizado em um único sítio, não há uma transição abrupta da fase A para a fase B pela presença dele como um defeito como está representada na Figura 12. É de se esperar, então, uma transição que dependa da distribuição do pacote de onda do elétron. Os autores descreveram a dinâmica do sistema em base de unidades experimentais conhecidas e encontraram a solução do tipo *soliton*, como demonstra a figura 13.

O perfil do *soliton* encontrados por eles é dado por

$$|\psi_n|^2 = \frac{1}{l} \operatorname{sech}^2\left(\frac{n}{l}\right) \cos^2\left(\frac{\pi n}{2}\right), \quad (35)$$

onde o envelope vermelho na Figura 13 é expresso por $\frac{1}{l} \operatorname{sech}^2\left(\frac{n}{l}\right)$. Esta solução é definida como um *bright soliton*¹⁴ [46, 47].

Esta solução é semelhante à solução encontrada por Holstein [41] na equação (28), pois uma das soluções de funções de onda em sistemas não lineares são *bright solitons*.

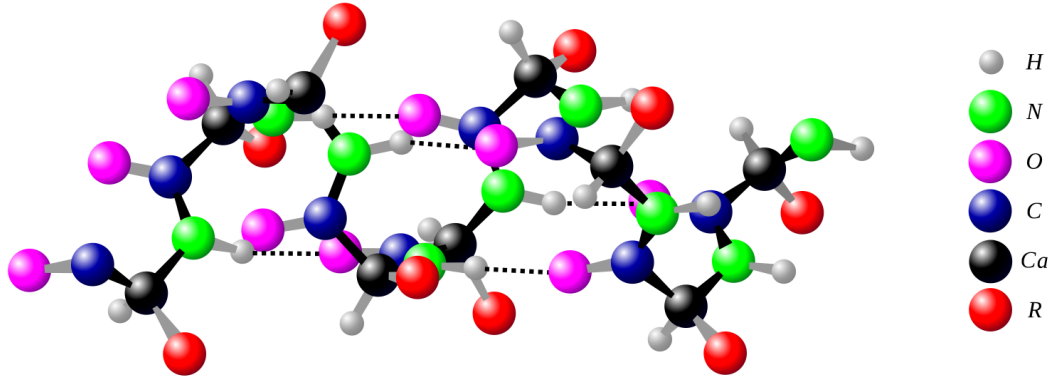
2.3.3 Interação éxciton-rede em proteínas α -hélice

Para descrever excitações propagantes (éxciton) ao longo de proteínas α -hélice, Davydov [48, 49] descreve as interações entre grupos amidas vibrantes com os hidrogênios

¹⁴A função de onda *bright soliton* é caracterizada por uma solução solitônica cujo há um pico de intensidade maior do que a vizinhança. O termo se origina da ótica, onde este *soliton* causa um pico de intensidade brilhante.

ligados que estabilizam as proteínas α -hélice. Em seu modelo ele analisa a propagação de um *éxciton* (uma quasipartícula), formado nas excitações das ligações peptídicas (um tipo de amida), que interage com vibrações longitudinais ao longo da proteína.

Figura 14 - Representação de uma proteína α -hélice. As ligações em preto indicam a direção da cadeia em formato de hélice. As linhas tracejadas representam as pontes de hidrogênio.



Fonte: Autor, 2020.

Representamos na Figura 14 uma proteína α -hélice. As excitações ocorrem nas ligações peptídicas, as ligações covalentes $C - N$, mas o grupo funcional amida é dado pela ligação $N - C = O$. Na representação, o nitrogênio são as esferas verdes, o oxigênio a rosa, o carbono as azuis, o hidrogênio as cinzas, o cálcio as pretas e as vermelhas um radical.

O hamiltoniano que descreve a dinâmica de um éxciton numa cadeia de grupos amidas como osciladores acoplados será dado como a soma de um hamiltoniano clássico para descrever a dinâmica da rede, o hamiltoniano para a dinâmica do éxciton e o hamiltoniano referente à interação entre o éxciton e a dinâmica da rede

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{latt} + \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{int}. \quad (36)$$

O hamiltoniano \mathcal{H}_{latt} descreve N osciladores clássicos acoplados de massa M com molas efetivas de constante elástica κ

$$\mathcal{H}_{latt} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^2 \right], \quad (37)$$

aqui \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M\dot{\hat{u}}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, do grupo amida n .

O hamiltoniano \mathcal{H}_{ex} descreve a dinâmica do éxciton, uma quasipartícula que pode ser descrita de forma discreta semelhante à aproximação *tight-binding* do elétron de pri-

meiros vizinhos

$$\mathcal{H}_{ex} = \sum_{n=1}^N \left(\varepsilon_n c_n^\dagger c_n - \gamma_{n,n+1} c_{n+1}^\dagger c_n - \gamma_{n,n-1} c_{n-1}^\dagger c_n \right), \quad (38)$$

onde c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação das excitações das ligações peptídicas no grupo amida n . Aqui o potencial *onsite* ε_n corresponde ao custo energético para manter a excitação no grupo amida n e o termo de *hopping* $\gamma_{n,n\pm 1}$ é a energia de acoplamento para transferir a excitação do grupo amida n para o grupo amida $n \pm 1$. Assumiremos que a cadeia que forma a proteína é uma estrutura cristalina e fazemos $\varepsilon_n = 0$ e $\gamma_{n,n\pm 1} = \gamma$.

Em estudos mais generalizados do modelo de Davydov, como o apresentado por Scott [50], é permitido três níveis excitados, mas não abordaremos neste trabalho por simplicidade. O hamiltoniano \mathcal{H}_{ex} pode ser rapidamente generalizável adicionando mais um índice (α), em que $\alpha = 1, 2, 3$.

A dinâmica do éxciton na cadeia sofre influência da dinâmica da rede de forma semelhante a de Holstein, no termo diagonal do hamiltoniano. Porém o \mathcal{H}_{int} no modelo de Davydov é proporcional à deformação simetrizada na rede, então escrevemos

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{n=1}^N B(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_{n-1})c_n^\dagger c_n, \quad (39)$$

onde B é um parâmetro de acoplamento energético éxciton-rede.

Este último termo mostra que uma excitação deforma a rede, contraindo as molas que acoplam os grupos amidas vizinhos e a deformação na rede altera a energia do éxciton. Assim, o éxciton interfere em si mesmo de forma indireta. Economou e colaboradores [51–54] apresentaram vários estudos do elétron sob influência dos modos vibracionais da rede com um hamiltoniano análogo a este de Davydov. Economou mostrou que ocorrem neste hamiltoniano alguns fenômenos semelhantes aos que são encontrados pelo modelo de Holstein como o de *self-trapping*, instabilidade modulacional e outros.

A partir do hamiltoniano da equação (36), podemos encontrar dois conjuntos de equações, um para a dinâmica da cadeia e outro para a dinâmica do éxciton. Estas duas soluções podem ser encontradas a partir da resolução da equação de Schroedinger e o método de lagrangiana.

Entretanto, trabalharemos mais uma vez na aproximação adiabática, em que $t_{ex} \ll t_{latt}$, onde $t_{ex} = \hbar/\gamma$ é o tempo característico do éxciton e $t_{latt} = \sqrt{M/\kappa}$ é o tempo característico da rede. Trabalharemos nesta aproximação com o intuito de encontrar uma equação efetiva que descreve a dinâmica do éxciton sob influência da dinâmica da rede. Apresentamos no Apêndice 2 a descrição detalhada da utilização desta aproximação e o

processo de minimização de energia para encontrar a relação de recorrência

$$i\hbar\dot{\psi}_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \gamma\chi^{(d)}(2|\psi_n|^2 + |\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2)\psi_n, \quad (40)$$

onde $\chi^{(d)} = B^2/\gamma\kappa$ é chamado de parâmetro efetivo éxciton-rede. Esta equação, encontrada por Economou [53, 54] está dentro de uma classe chamada de Equação de Schrodinger Não Linear Discreta Modificada (MDNLSE¹⁵).

Devido a semelhança da MDNLSE com a DNLSE do modelo de Holstein, é possível inferir que quando o desnível $\gamma\chi^{(d)}$ for grande o suficiente, o termo de *hopping* não promove a transição entre estados excitados de uma parte do pacote. De fato, Economou [54] mostrou que existe um valor crítico $\chi_c^{(d)}$ próximo de 1.85 que promove o autoaprisionamento do pacote no sítio inicial.

Economou [53] indica que a aproximação para o contínuo da equação (40) resulta na mesma equação diferencial que a equação (27). Assim, ele mostra que uma solução da MDNLSE é também um *bright soliton* dado por

$$|\psi_n|^2 = \frac{\chi^{(d)}}{2} \operatorname{sech}^2 [\chi^{(d)}(n - n_0)]. \quad (41)$$

Com isto, mostramos que os efeitos não lineares causados pelo acoplamento com a dinâmica da rede levam a soluções semelhantes. Assim, os fenômenos de *self-trapping* geram *solitons* e são soluções recorrentes em sistemas não lineares. Há também estudos que apresentam sistemas não lineares desordenados, mostrando que há uma competição entre regimes governados pela localização de Anderson e o autoaprisionamento, esta competição pode gerar o *enfraquecimento da localização de Anderson* [55] para fraca não linearidade. Também foi relatado em sistemas óticos não lineares desordenados um enfraquecimento do comprimento de localização [56]. Esta competição também pode apresentar um caráter subdifusivo à dinâmica do pacote [57–59].

A seguir, apresentamos as semelhanças entre o mágnon e o elétron para mais adiante ser apresentado uma proposta de não linearidade em sistemas magnéticos quando há mágnons não interagentes acoplados com a dinâmica da rede.

¹⁵Do inglês, *Modify Discrete Nonlinear Schrodinger Equation*.

3 MÁGNONS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

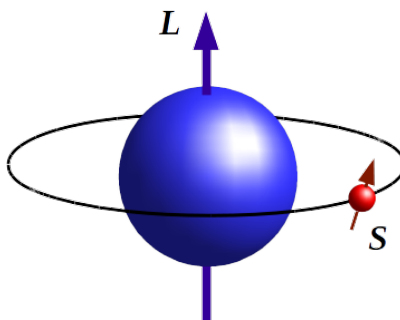
Os mágnons são quasi-partículas formadas por excitações coletivas nos materiais magnéticos. O conceito de mágnon foi introduzido por Felix Bloch [60] para explicar a redução da magnetização espontânea em um ferromagneto. Apesar da existência de alguns tipos de materiais magnéticos, como os materiais ferromagnéticos, antiferromagnéticos, ferrimagnéticos, diamagnéticos, paramagnéticos e outros¹⁶, há relatos de mágnons apenas nos três primeiros. Um material ferromagnético atinge o estado de menor energia na temperatura de zero absoluto, quando todos os momentos magnéticos alinham-se na mesma direção e a magnetização é máxima. A partir do estado de menor energia, uma excitação local pode promover excitações na sua vizinhança e isto gera uma propagação de ondas por excitações coletivas. Em temperaturas ligeiramente maiores, o sistema pode ser considerado como um gás de quasi-partículas massivas.

A semelhança das ondas de excitações coletivas geradas em sistemas ferromagnéticos com os elétrons aparece tanto no espectro de energia, tanto na dinâmica. Para descrever as ondas de excitações coletivas, ou também chamadas de ondas de *spins*, apresentamos nas próximas seções uma descrição do conceito de *spin* e a formulação do modelo de Heisenberg para descrever mágnons em sistemas ferromagnéticos.

3.1 Momento angular intrínseco e interação de troca entre dois elétrons

Os experimentos de Otto Stern e Walther Gerlach [61–63] comprovaram a existência de um novo momento angular, diferente do momento angular orbital. O momento angular orbital quântico é descrito pelo modelo atômico de Niels Bohr [64–66]. O novo momento foi chamado de *momento angular intrínseco*, ou momento angular de *spin*, ou simplesmente *spin*, que significa “giro” em inglês.

Figura 15 - Representação clássica do momento angular orbital L e o que seria esperado do spin S da partícula vermelha que orbita a partícula azul.



Fonte: Autor, 2018.

¹⁶Descrições mais detalhadas desses materiais podem ser encontradas no livro de Ashcroft [14]

O momento angular orbital tem um análogo clássico, o momento relacionado ao movimento de um corpo em rotação ao redor de um ponto. Apresentamos na Figura 15 uma representação clássica do momento angular orbital \mathbf{L} de uma partícula (vermelha) que orbita em torno de outra (azul). Porém, apesar de o termo *spin* ter se originado da ideia de o elétron rotacionar em torno de si mesmo, não há um análogo clássico equivalente. Na Figura 15 há uma representação do que seria o *spin* clássico da partícula vermelha. O momento angular intrínseco existe em todas as partículas, massivas e não massivas.

A teoria do momento angular é geral tanto para o orbital, tanto para o *spin*. O operador *spin* \mathbf{S} segue a seguinte relação de autovalor

$$\mathbf{S}^2|k, s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2|k, s, m\rangle \quad (42)$$

e a componente z do operador *spin* S_z segue

$$S_z|k, s, m\rangle = m\hbar|k, s, m\rangle, \quad (43)$$

onde $|k, s, m\rangle$ é o vetor de estado da partícula na base S_z . O índice k representa a energia cinética da partícula relacionado ao momento linear. O s é chamado de número quântico *spin* e está relacionado ao momento angular intrínseco total da partícula. Já o m é chamado de número do momento magnético e está relacionado à componente do *spin* no eixo z.

O número quântico *spin* s assume valores inteiros para bósons¹⁷ ($s = 0, 1, 2, \dots$) e assume valores semi-inteiros para férmions¹⁸ ($s = 1/2, 3/2, \dots$). O momento magnético *spin* m assume valores entre $-s$ e s , sempre somando uma unidade a partir de $-s$. Para o elétron, $s = 1/2$. A quantidade de valores que m pode assumir corresponde à dimensão do espaço vetorial para um dado s e pode ser calculado com $d_s = 2s + 1$ (no caso do elétron, $d_{\frac{1}{2}} = 2\frac{1}{2} + 1 = 2$).

Há também operadores que não seguem equações de autovalores, mas que são muito úteis: o operador levantamento S_+ e o operador abaixamento S_- , que quando aplicados no estado $|k, s, m\rangle$, levam ao estado $|k, s, m+1\rangle$ e $|k, s, m-1\rangle$, respectivamente

$$\begin{aligned} S_+|k, s, m\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m+1)}|k, s, m+1\rangle \\ S_-|k, s, m\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m-1)}|k, s, m-1\rangle \end{aligned} \quad (44)$$

¹⁷Partículas que seguem a estatística de Bose-Einstein e não seguem o princípio de exclusão de Pauli, isto é, é possível haver muitas partículas num único estado quântico. Elas recebem o nome em homenagem ao Satyendra Nath Bose, um dos físicos que descreveram a estatística destas partículas. O outro foi Albert Einstein.

¹⁸Partículas que seguem a estatística de Fermi-Dirac e seguem o princípio de exclusão de Pauli, isto é, não é permitido haver duas partículas num mesmo estado quântico. Elas recebem o nome em homenagem ao Enrico Fermi, ele e Paul Dirac foram os físicos que descreveram o comportamento estatístico destas partículas.

Estes operadores são definidos a partir de $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, onde S_x e S_y são as componentes x e y do vetor operador *spin*.

Para sistemas mais complexos, surgem resultados diferentes. Para um sistema formado por dois elétrons, por exemplo, o vetor de estado deve descrever as duas partículas, assim, escreveremos o vetor de estado com o conjunto de parâmetro dos três números para cada elétron, desta forma, o estado será escrito como $|k_1, k_2, s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$. Como $s_1 = s_2 = 1/2$ e m_1 e m_2 podem assumir dois valores ($1/2$ e $-1/2$), podemos representar o vetor de estado de forma mais simplificada, representando \uparrow para $m_n = 1/2$ e \downarrow para $m_n = -1/2$. A partir de agora não trabalharemos mais com a energia cinética dos elétrons nessa seção e os índices k_n serão omitidos.

Para o elétron, as duas equações anteriores, nessa nova representação, podem ser simplesmente escritas como:

$$\begin{aligned} S_+|\uparrow\rangle &= 0 & S_+|\downarrow\rangle &= \hbar|\uparrow\rangle \\ S_-|\downarrow\rangle &= 0 & S_-|\uparrow\rangle &= \hbar|\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (45)$$

Assim, o conjunto de estados que representa os *spins* de dois elétrons podem ser arranjados em dois grupos, o singlete e o tripleto

$$\text{tripleto: } |\phi_t\rangle = \begin{cases} |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\uparrow\uparrow\rangle \end{cases} \quad (46)$$

$$\text{singlete: } |\phi_s\rangle = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right\} , \quad (47)$$

onde o conjunto de estados $\{|\uparrow\uparrow\rangle\}$ representa os estados dos dois elétrons no espaço dos *spins*, sendo a primeira seta para um elétron e a segunda para o outro. O grupo é separado pois os estados tripleto têm *spin* resultante $s = 1$ (com $m = -1, 0, 1$) e é triplamente degenerado, já o estado singlete tem $s = 0$ (apenas $m = 0$) e é não degenerado. A dimensão do espaço vetorial do par de elétrons é dado por $d = d_0 + d_1 = (2 \cdot 0 + 1) + (2 \cdot 1 + 1) = 4$. Devido ao par ter *spin* inteiro, os estados compostos por dois elétrons se comportam como bósons.

Outra característica dos grupos é que os estados tripleto são estados simétricos e o estado singlete é um estado antissimétrico por troca de partículas. Os estados completos tripleto $|t\rangle$ e singlete $|s\rangle$ são um produto direto com o espaço real $\{|\psi\rangle\}$ e o espaço dos spins $\{|\phi\rangle\}$

$$|t\rangle = |\psi_t\rangle \otimes |\phi_t\rangle \quad (48)$$

$$|s\rangle = |\psi_s\rangle \otimes |\phi_s\rangle. \quad (49)$$

Estamos interessados num hamiltoniano que quando aplicado num estado tripleto ou singleto nos dê o autovalor de energia correspondente e a troca entre os *spins* dos elétrons. Essa troca de *spins* é a responsável pela propagação da excitação de um elétron ao outro. Então precisamos de um hamiltoniano que comute com

$$\mathcal{H} = E_t|t\rangle\langle t| + E_s|s\rangle\langle s|, \quad (50)$$

onde $\langle\psi_t|\mathcal{H}_r|\psi_t\rangle = E_t$ e $\langle\psi_s|\mathcal{H}_r|\psi_s\rangle = E_s$. Aqui $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ é o operador projeção diagonal.

Partiremos da relação

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (51)$$

sabendo que os autovalores de \mathbf{S}^2 é $s(s+1)\hbar^2$ e os de \mathbf{S}_1^2 e \mathbf{S}_2^2 são $1/2(1/2+1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$. Desta forma, vemos que os autovalores de $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ são

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{s(s+1)}{2}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 = \begin{cases} -3\hbar^2/4 & , \text{ se } s = 0 \text{ (singleto)} \\ \hbar^2/4 & , \text{ se } s = 1 \text{ (tripleto)} \end{cases} \quad (52)$$

e podemos escrever

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4}(E_s + 3E_t)\hbar^2 - (E_s - E_t)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (53)$$

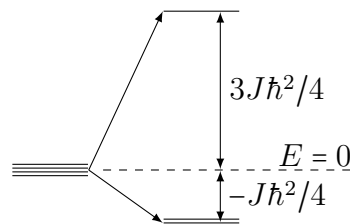
Este hamiltoniano retorna ao valor E_s quando $s = 0$ e E_t quando $s = 1$.

Definindo o $\frac{1}{4}(E_s + 3E_t)$ como referencial de energia, temos que o hamiltoniano que descreve a possibilidade de trocar o estado de dois elétrons entre o estado tripleto e singleto é

$$\mathcal{H} = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (54)$$

onde $J = E_s - E_t$ é o desnível entre os estados tripleto e singleto, chamado de *constante de troca* ou *exchange*.

Figura 16 - Representação dos níveis de energia do tripleto e singleto com desnível $J\hbar^2$.



Fonte: Autor, 2020.

Na Figura 16, mostramos uma representação dos níveis de energia do tripleto

$-J\hbar^2/4$, que é triplamente degenerado, e do singlete $3J\hbar^2/4$, que é não degenerado, para o hamiltoniano da equação (54).

Esta constante de troca foi a base utilizada por Heisenberg para construir um hamiltoniano que descrevesse a interação de troca de *spins* num cristal onde os elementos têm *spins* resultantes que interagem com os demais da rede. Heisenberg assume que as interações são feitas aos pares de forma semelhante à equação (54). Seguimos a próxima seção utilizando o hamiltoniano de Heisenberg para descrever sistemas magnéticos.

3.2 Mágns não interagentes em cadeias ferromagnéticas

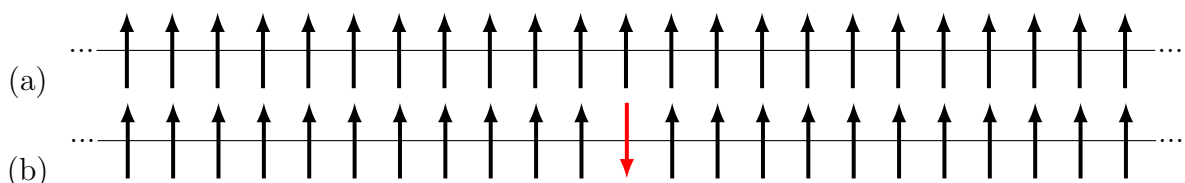
Os materiais magnéticos apresentam propriedades físicas ligadas aos seus arranjos magnéticos como propagação de mágns, magnetoresistência, magnetostricção, magnetocalorimetria, spintrônica e outros. A teoria mais aceita para descrição de sistemas magnéticos é que os átomos que compõem o material contêm *spins* cujo a interação com o campo magnético externo é muito maior que os gerados pelos momentos angulares orbitais. As descrições desses sistemas magnéticos são complicadas e um dos modelos que mais obteve sucesso em descrever estes materiais e suas propriedades é o modelo de Heisenberg. A partir deste modelo, podemos demonstrar o modelo de Ising e também podemos descrever a teoria de campo médio. Estas descrições estão detalhadas no livro de Ashcroft e Mermin [14].

Werner Heisenberg [67,68] apresentou um modelo para descrever um cristal magnético em que os elementos da rede têm *spins* resultantes e interagem entre si entre pares por uma interação de troca da forma da que foi descrita na seção anterior. O hamiltoniano baseado no modelo de Heisenberg \mathcal{H}_{mag} é definido como a soma de todas as interações de troca entre pares na rede:

$$\mathcal{H}_{mag} = - \sum_{\substack{n,m \\ m \neq n}} J_{n,m} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m. \quad (55)$$

Aqui \mathbf{S}_n é o vetor operador *spin* no sítio n e $J_{n,m}$ é a constante de troca entre os sítios n e m , ou *exchange*.

Figura 17 - Estado fundamental de uma cadeia ferromagnética (a), um estado ferromagnético excitado localizado com apenas um *spin* invertido (b).



Fonte: Autor, 2020.

Este hamiltoniano teve sucesso em descrever vários tipos de sistemas magnéticos, como sistemas ferromagnéticos, antiferromagnéticos, ferrimagnéticos e outros. Em especial, o *exchange* é positivo em sistemas ferromagnéticos ($J > 0$), que favorecem o alinhamento dos *spins*, e negativo em sistemas antiferromagnéticos ($J < 0$), que favorecem o antialinhamento.

Seguiremos a descrição de uma cadeia ferromagnética de N *spins* $s = 1/2$. No estado fundamental de uma rede ferromagnética, a magnetização é máxima e todos os *spins* se alinham em uma direção. Adotaremos o alinhamento preferencial do estado fundamental na direção do eixo z , como mostra a Figura 17a. Definiremos aqui um estado ferromagnético como sendo um estado com uma excitação localizada, isto é, um único *spin* excitado na rede, como na Figura 17b.

Para descrevermos esta cadeia, simplificaremos as interações para interações do tipo *spin-flip*, visto que o operador vetor tem três componentes e somente estamos interessados na projeção na direção z . Assim, usaremos os operadores já descritos na seção anterior: os operadores levantamento S_n^+ e abaixamento S_n^- na base que diagonaliza S_n^z , a componente z do vetor operador *spin*, definidos como $S_n^\pm = S_n^x \pm iS_n^y$, onde S_n^x e S_n^y são as componentes x e y do operador *spin*. O hamiltoniano de Heisenberg é dado por

$$\mathcal{H}_{mag} = - \sum_{\substack{n, m = 1 \\ m \neq n}}^N J_{n, m} \left[S_n^z S_m^z + \frac{1}{2} (S_n^+ S_m^- + S_n^- S_m^+) \right]. \quad (56)$$

Representaremos o estado fundamental como $|\emptyset\rangle$ e ao aplicarmos o hamiltoniano de Heisenberg, apenas contribui para a energia do estado fundamental o termo com as componentes z . Isto decorre pois como todos os *spins* na cadeia estão na direção z e, pelo conjunto de equações (45), os termos que contêm os levantamentos anulam-se. Logo

$$\mathcal{H}_{mag}|\emptyset\rangle = -S^2 \sum_{\substack{n, m = 1 \\ m \neq n}}^N J_{n, m}|\emptyset\rangle = E_0|\emptyset\rangle, \quad (57)$$

onde $S = \hbar/2$ é o autovalor do operador S_n^z , isto é, $S_n^z|\emptyset\rangle = S|\emptyset\rangle$. E_0 é a energia do estado fundamental e podemos ver que a equação (57) é uma equação de autovetor.

Atuando, agora, o hamiltoniano (56) num estado ferromagnético excitado no sítio l , isto é, $|l\rangle$ teremos

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{mag}|l\rangle = & - \underbrace{\sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N J_{n,m} S_n^z S_m^z |l\rangle}_A - \underbrace{\sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N \frac{J_{n,m}}{2} S_n^+ S_m^- |l\rangle}_B \\
& - \underbrace{\sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N \frac{J_{n,m}}{2} S_n^- S_m^+ |l\rangle}_C. \tag{58}
\end{aligned}$$

Para manipular A , B e C separadamente, utilizaremos da premissa de que o estado ferromagnético localizado l pode ser gerado a partir do estado fundamental da forma $|l\rangle = \hbar^{-1} S_l^- |\emptyset\rangle$ e usaremos as seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned}
[S_k^+, S_l^-] &= 2\hbar S_k^z \delta_{k,l} & [S_k^z, S_l^-] &= -\hbar S_k^- \delta_{k,l} & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0 \\
[S_k^x, S_l^y] &= i\hbar S_k^z \delta_{k,l} & [S_k^z, S_l^+] &= \hbar S_k^+ \delta_{k,l}
\end{aligned} \tag{59}$$

Utilizamos-as para que o operador S_n^z seja aplicado no estado fundamental $|\emptyset\rangle$:

$$\begin{aligned}
A &= - \sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N J_{n,m} (-S_m^- S_n^z \delta_{m,l} - S_n^- S_m^z \delta_{n,l} + \hbar^{-1} S_l^- S_n^z S_m^z) |\emptyset\rangle; \\
B &= - \sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N J_{n,m} S_m^- S_n^z \delta_{n,l} |\emptyset\rangle; \\
C &= - \sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N J_{n,m} S_n^- S_m^z \delta_{m,l} |\emptyset\rangle.
\end{aligned} \tag{60}$$

Aplicando o operador S_n^z no estado fundamental e depois aplicando os operadores de abaixamento respectivos, simplificamos para:

$$\begin{aligned}
A &= \left(S\hbar \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq l}}^N J_{n,l} + S\hbar \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq l}}^N J_{l,m} - S^2 \sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N J_{n,m} \right) |l\rangle; \\
B &= -S\hbar \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq l}}^N J_{l,m} |m\rangle; \\
C &= -S\hbar \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq l}}^N J_{n,l} |n\rangle.
\end{aligned} \tag{61}$$

Com a aproximação de que a interação entre os sítios ocorre apenas entre os dois primeiros vizinhos, isto é, o sítio n interage com $n + 1$ e $n - 1$, apenas existirá $J_{n,m}$ para $m = n \pm 1$. Voltando à (58) com $J_{n,m} = J_{m,n}$ pois os *exchange* são números reais e o hamiltoniano de Heisenberg é hermitiano, temos

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{mag}|l\rangle &= -S^2 \sum_{n=1}^N J_{n,n\pm 1}|l\rangle + 2\hbar S(J_{l,l+1} + J_{l,l-1})|l\rangle - 2\hbar S J_{l,l+1}|l+1\rangle \\
&\quad - 2\hbar S J_{l,l-1}|l-1\rangle.
\end{aligned} \tag{62}$$

O primeiro coeficiente corresponde exatamente à energia do estado fundamental, o mesmo coeficiente na equação (57) na aproximação para primeiros vizinhos. Desta forma, podemos escrever como

$$\mathcal{H}_{mag}|l\rangle = [E_0 + 2\hbar S(J_{l,l+1} + J_{l,l-1})]|l\rangle - 2\hbar S J_{l,l+1}|l+1\rangle - 2\hbar S J_{l,l-1}|l-1\rangle. \tag{63}$$

Esta não é uma equação de autovetor pois a aplicação do hamiltoniano no estado ferromagnético excitado no sítio l resulta em excitações nos sítios $l + 1$ e $l - 1$, seus primeiros vizinhos. Esta equação nos informa que as excitações locais são transferidas e portanto o mágnon é dado por uma onda de excitações coletivas. Aqui esta última equação já sugere a dinâmica do sistema e se assemelha muito ao hamiltoniano discreto do elétron no modelo *tight-binding* (8).

Para recuperarmos uma equação de autovetor, nos baseamos na solução de Bloch (9) tratada no capítulo anterior e efetuamos a somatória em todos os estados ferromagnéticos do sistema. Assim, o autoestado do hamiltoniano de Heisenberg é o estado de um *mágnon*, uma onda de *spin*

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n |n\rangle. \tag{64}$$

A semelhança do hamiltoniano com o do elétron e o estado ser semelhante ao do elétron de Bloch, nos diz que o mágnon no sistema ferromagnético é uma quasi-partícula massiva, pois se comporta como um elétron, tanto no espectro de energia, tanto na dinâmica. Theodore Holstein e Henry Primakoff [69] e Freeman Dyson [70] desenvolveram a teoria de ondas de *spins* quantizadas. Mais tarde, Bertram Neville Brockhouse [71] realizou uma detecção experimental direta de mágnons por meio da dispersão de nêutrons inelástica em ferrite.

Assim como fizemos para o elétron, tomaremos $J_{n,n\pm 1} = J$ e $\psi_n = Ae^{ikna}$ devido a simetria por translação, onde k é o número de onda do mágnon e a o vetor da rede. Desta forma, encontramos a equação de autovetor

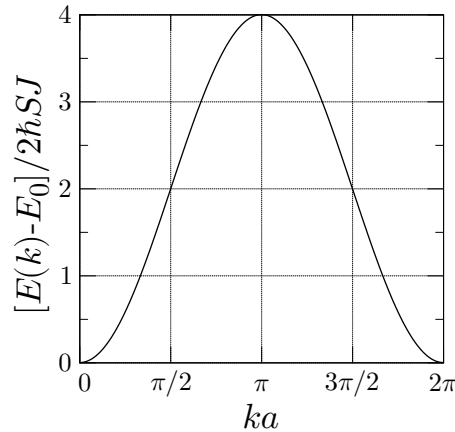
$$H|\Psi\rangle = E_0|\Psi\rangle + 4\hbar JS[1 - \cos(ka)]|\Psi\rangle \quad (65)$$

ao assumir as condições periódicas de contorno: $|n + N\rangle = |n\rangle$. Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} E(k) &= E_0 + 4\hbar JS[1 - \cos(ka)] \\ &= E_0 + 8\hbar JS \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right). \end{aligned} \quad (66)$$

Esta é a relação de dispersão para o mágnon numa cadeia ferromagnética.

Figura 18 - Relação de dispersão de um mágnon numa cadeia ferromagnética linear cristalina.

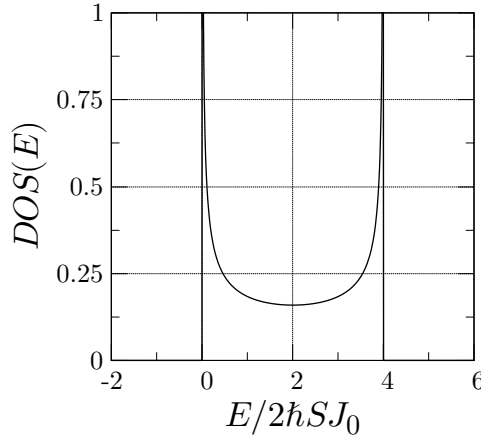


Fonte: Autor, 2020.

Os valores de energia permitidos pela relação de dispersão estão em uma faixa bem delimitada $0 \leq E(k) - E_0 \leq 8\hbar JS$, como é possível ver na figura 18. Essa largura de $8\hbar JS$ é conhecida como largura de banda. Nesta figura vemos que a relação de dispersão do mágnon é semelhante a do elétron (12). Vemos que quando $k \rightarrow 0$, temos que $E(k) - E_0 \sim k^2$, mostrando-nos que o mágnon ferromagnético se comporta como uma partícula massiva.

Construímos um algoritmo computacional para encontrarmos os autovalores do hamiltoniano dado pela equação (63) pela equação $\det(\mathcal{H}_{mag} - E\mathbf{1}) = 0$. A partir do

Figura 19 - Densidade de estados DOS de um mágnon numa cadeia ferromagnética cristalina na aproximação de primeiros vizinhos.



espectro de autovalores para o caso $N = 10^6$, encontramos a DOS apresentada na Figura 19. Esta mesma curva é possível obter diretamente pela relação de dispersão que encontramos. Aqui vemos a semelhança com a DOS do elétron de Bloch numa cadeia cristalina apresentada na Figura 1, onde apenas o referencial de energia as difere.

Podemos também resolver a equação de Schroedinger dependente do tempo a partir do hamiltoniano da equação (62) e encontramos, assim como fizemos no caso do elétron no capítulo anterior, a relação de recorrência que descreve a dinâmica do mágnon:

$$i\hbar\dot{\psi}_n = 2\hbar S(J_{n,n+1} + J_{n,n-1})\psi_n - 2\hbar S J_{n,n+1}\psi_{n+1} - 2\hbar S J_{n,n-1}\psi_{n-1}. \quad (67)$$

Não apresentaremos descrições mais detalhadas sobre esta equação, pois de nada difere do comportamento do elétron de Bloch quando $J_{n,n\pm 1} = J$ (vide as descrições a partir da equação (15) do comportamento do elétron de Bloch).

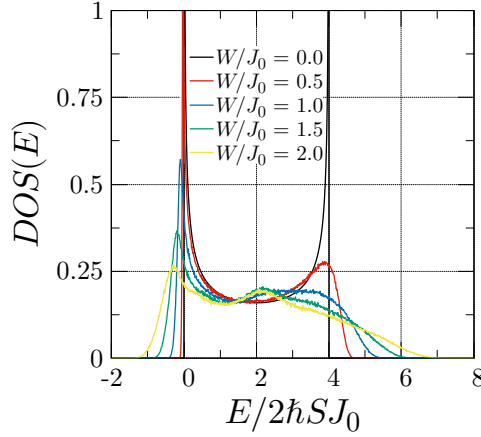
Porém, o sistema desordenado apresenta uma característica diferente do modelo de Anderson. Permitir que o termo diagonal assumira valores aleatórios resulta em os termos fora da diagonal assumirem valores aleatórios, devido a correlação de que os termos diagonais são exatamente a soma de seus dois termos fora da diagonal na mesma linha da matriz. Neste sistema, a desordem se dá em permitir que os *exchanges* possam ter flutuações aleatórias dJ em torno de um determinado valor J_0 , tal que $J_{n,n+1} = J_0 + dJ$ e $J_0 \neq 0$.

Como assumimos que para um sistema ferromagnético temos que $J_{n,n+1} > 0$, então temos uma restrição para a largura de desordem atribuída nesse sistema, onde $W < 2J_0$. Assim, temos que nesse sistema, a distribuição de probabilidade para sorteio do *exchange*

é dada por

$$\mathcal{P}(J_{n,n+1}) = \begin{cases} \frac{1}{W} & , \quad -\frac{W}{2} \leq dJ \leq \frac{W}{2} \\ 0 & , \quad |dJ| > \frac{W}{2} \end{cases} . \quad (68)$$

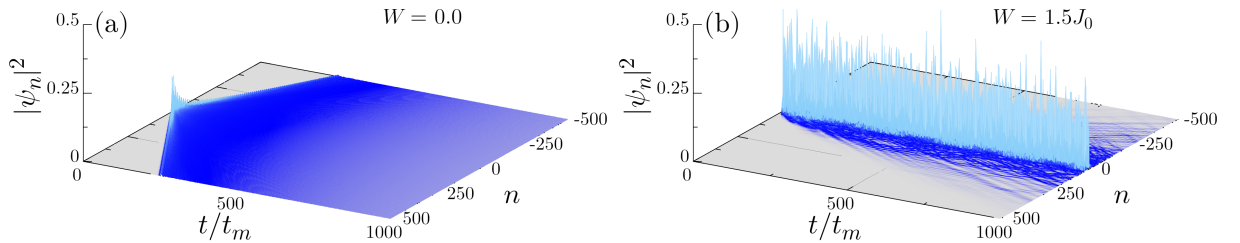
Figura 20 - Densidade de estados DOS de um mágnon numa cadeia ferromagnética desordenada na aproximação de primeiros vizinhos para alguns valores de largura de desordem W .



Fonte: Autor, 2020.

Apresentamos na Figura 20 a DOS para alguns valores de largura de desordem, de tal forma que é possível ver a quebra de simetria não existente no caso eletrônico, apesar de ainda haver um aumento na largura de banda com o aumento da largura de desordem. Porém, a DOS ainda não apresenta descontinuidade quando há presença de desordem, assim, a DOS sugere que os estados deste sistema são localizados. Estas curvas foram feitas com a média sobre 20 amostras cada para $N = 10^5$.

Figura 21 - Evolução temporal de um mágnon a partir da condição inicial do tipo delta numa cadeia ferromagnética (a) cristalina ($W = 0.0$) e (b) desordenada com $W = 1.5J_0$. Tamanho da cadeia é de $N = 2000$.



Fonte: Autor, 2020.

Para o sistema ferromagnético desordenado, fizemos a evolução temporal por integração numérica utilizando um algoritmo computacional baseado no método de Runge-Kutta de 4ª ordem a partir da condição inicial do tipo delta ($\psi_n = \delta_{n,0}$). Comprovamos na Figura 21a que o pacote no sistema cristalino ($W = 0.0$) tende ao estado estendido e na Figura 21b, para o caso $W = 1.5J_0$, que o pacote permanece localizado no centro da

cadeia para um valor de W não nulo, mesmo a DOS apresentando um comportamento diferente do modelo de Anderson. Aqui $t_m = 1/2SJ_0$ é o tempo característico do mágnon.

Já foi visto na literatura que essa correlação intrínseca causa estados difusivos [72] com um comportamento balístico em tempos curtos e caráter superdifusivo em tempos intermediários [73] em que a função de onda é resultado de uma superposição de uma porção localizada e a cauda que se espalha de forma difusiva. Devido a esse novo comportamento na DOS e a presença do comportamento difusivo, alguns efeitos diferenciados podem surgir com a presença de outros tipos de interações em sistemas desordenados. No próximo capítulo apresentamos um modelo para descrever efeitos não lineares que podem ocorrer em sistemas ferromagnéticos e, mais adiante, os resultados de efeitos não lineares em cadeias ferromagnéticas desordenadas.

4 MÁGNONS FERROMAGNÉTICOS ACOPLADOS À REDE HARMÔNICA

Mágnons interagentes podem gerar contribuições não lineares e estas interações mágnon-mágnon podem formar *solitons* no sistema [74]. Recentemente, a anisotropia local foi investigada como geradora desses efeitos não lineares como no trabalho de Wang [75], a competição dos efeitos não lineares causados pela anisotropia local e do potencial desordenado associado ao campo magnético aleatório leva a alguns regimes. Nesta competição é possível encontrar um regime localizado mediado pela desordem, um regime subdifusivo intermediário e um regime de autoaprisionamento ditado pela não linearidade.

Em contrapartida, alguns materiais magnéticos têm uma estrutura cristalina maleável, estes materiais magnetolásticos podem permitir a presença não somente de mágnons, mas também a presença de fônons. Em alguns casos, pode haver interação entre eles, como por exemplo o trabalho de Reutler [76] que descreve a dependência da relação de dispersão com o modo vibracional da rede de $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ na temperatura $T = 14$ K, isto é, em baixas temperaturas. Neste material, temos que a temperatura de Curie é $T_C = 181$ K. Körmann [77] apresentou que ao variar a temperatura numa rede bcc^{19} de Fe mudamos o regime magnético do limite ferromagnético ($T \rightarrow 0$) ao limite paramagnético ($T \rightarrow \infty$). Neste trabalho, é apresentado que ao variar a temperatura o espectro de energia dos fônons varia e principalmente quando $T > T_C$ há uma grande mudança na densidade de estados. Além disto, Holanda [78] mostra que em YIG^{20} há um acoplamento mágnon-fônon forte o suficiente para haver conversão de um tipo de partícula para a outra. Godejohann [79] mostra que sistemas ferromagnéticos podem apresentar *solitons* devido à presença de fônons e o acoplamento destes com os mágnons. Outros trabalhos experimentais apresentam outros sistemas em que há influência entre mágnons e modos vibracionais na rede [80–86].

No modelo de Heisenberg, os *exchanges* são definidos com uma dependência espacial, assim, quanto mais próximos os íons, mais forte o acoplamento *spin-spin*. Logo, o acoplamento mágnon-rede pode ser justificado quando os *exchanges* variam significativamente com as posições dos íons na rede [87–89]. Em sistemas com acoplamento mágnon-rede, o hamiltoniano de Heisenberg foi utilizado para descrever a conversão entre mágnons e fônons [90] e na descrição de resultados experimentais como a relação de dispersão do fônon [87, 91] e magnetização do sistema [88, 92].

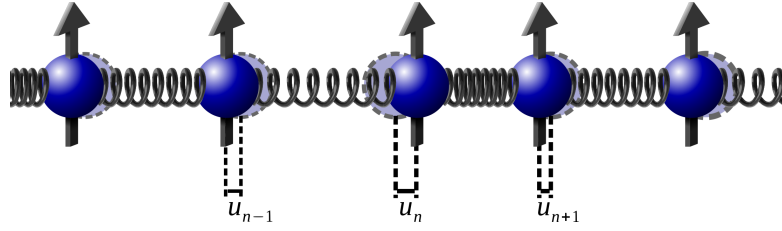
Devido a fenômenos como o de acoplamento *spin-órbita*, o hamiltoniano de Heisenberg pode deixar de assumir a forma isotrópica, definida como XXX. Uma situação muito comum em sistemas em que os efeitos do acoplamento *spin-órbita* não podem ser

¹⁹Sigla do inglês para *body centered cubic*.

²⁰Abreviação de Yttrium Iron Garnet ($\text{Y}_3\text{Fe}_2(\text{FeO}_4)_3$), um material ferrimagnético

desprezados é que uma das direções tenham um comportamento diferente e tenhamos um sistema anisotrópico do tipo XXZ, em que definimos a direção com anisotropia a direção z . Isto leva ao *exchanges* de uma das direções ser diferente das outras. Em sistemas mais complexos é possível que todas as direções terem comportamentos diferentes e teríamos um sistema anisotrópico XYZ, com os *exchanges* diferentes para cada direção.

Figura 22 - Representação de uma cadeia ferromagnética de spins representados por setas e íons por esferas idênticas cuja ligações químicas são representadas por molas harmônicas efetivas idênticas.



Fonte: Autor, 2019.

Abordaremos a partir de agora mágnons não interagentes numa cadeia ferromagnética anisotrópica XXZ de *spins* $1/2$, onde a componente anisotrópica tem uma forte dependência com a posição do íon. Assim como na Figura 22, a cadeia será formada por íons com *spins* e acoplados por molas efetivas. Assim, descreveremos o nosso sistema a partir de um hamiltoniano da forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{latt}} + \mathcal{H}_{\text{mag}}. \quad (69)$$

O hamiltoniano $\mathcal{H}_{\text{latt}}$ descreverá a dinâmica da rede como osciladores acoplados clássicos como

$$\mathcal{H}_{\text{latt}} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^2 \right], \quad (70)$$

onde \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M\dot{\hat{u}}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, do íon n . Esta descrição é válida quando $\hbar\omega_0 \ll k_B T$. Aqui k_B é a constante de Boltzman, T a temperatura, \hbar é a constante de Planck e $\omega_0^2 = \kappa/M$ é a frequência natural de oscilação da rede. Desta forma, a abordagem será dada em altas temperaturas.

Já o hamiltoniano \mathcal{H}_{mag} descreverá a dinâmica do mágnon na cadeia ferromagnética XXZ na representação de interação *spin-flip*

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{mag}} = & E_0 - g\mu_B N H (S - 1) \\ & + 2\hbar S \sum_{n=1}^N \left[(J_{n,n+1}^Z + J_{n,n-1}^Z) c_n^\dagger c_n - J_{n,n+1}^{XY} c_{n+1}^\dagger c_n - J_{n,n-1}^{XY} c_{n-1}^\dagger c_n \right]. \end{aligned} \quad (71)$$

Aqui $J_{n,n\pm 1}^Z$ é a componente anisotrópica do *exchange*, $J_{n,n\pm 1}^{XY}$ as componentes das ou-

tras direções. c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação do estado ferromagnético localizado no íon n . $S = \hbar/2$ o autovalor do operador S_n^z no estado fundamental, isto é, $S_n^z|\phi\rangle = S|\phi\rangle$. Descreveremos de forma geral com S pois o comportamento para outros valores arbitrários de *spin* é semelhante. No caso isotrópico (XXX), em que $J_{n,n\pm 1}^Z = J_{n,n\pm 1}^{XY} = J_{n,n\pm 1}$, temos o mesmo hamiltoniano da equação (63) com a presença de campo magnético.

A energia do estado fundamental é definida como $E_0 = -S^2 \sum_n J_{n,n\pm 1}^Z$ e corresponde à energia do estado em que todos os *spins* estão alinhados na mesma direção, que definimos como alinhados no sentido positivo de z . Como trataremos de um sistema em altas temperaturas, afim de atingirmos a maior magnetização possível, colocamos o termo de campo magnético $-g\mu_B NH(S-1)$ que representa um campo magnético externo H no sentido positivo de z . Usamos g para denotar a constante giroscópica e μ_B o magneton de Bohr.

Como mencionamos, a interação entre o mágnon e a dinâmica da rede será dada pela dependência das constantes de troca com a posição dos íons [87–89]. Assumiremos, então, a aproximação de que a componente anisotrópica depende significativamente em primeira ordem com a deflexão e as outras componentes são consideradas constantes e iguais ao termo de ordem zero da componente anisotrópica:

$$\begin{aligned} J_{n,n+1}^Z &\approx J_0 + \alpha(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n) \\ J_{n,n+1}^{XY} &\approx J_0 \end{aligned} \quad (72)$$

A partir desta transformação, analisaremos a energia do estado fundamental sabendo que $\hat{u}_n|\Psi\rangle = u_n|\Psi\rangle$:

$$\begin{aligned} E_0 &= -S^2 \sum_{n=1}^N (J_{n,n+1}^Z + J_{n,n-1}^Z) \\ E_0 &= -S^2 \sum_{n=1}^N [J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_n) + J_0 + \alpha(u_n - u_{n-1})] \\ E_0 &= -S^2 \sum_{n=1}^N [2J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_{n-1})], \end{aligned} \quad (73)$$

assumindo as condições periódicas de contorno, isto é, $u_{n+N} = u_n$, podemos ver que $\sum_{n=1}^N u_{n+1} = \sum_{n=1}^N u_{n-1}$. Então

$$E_0 = -2S^2 NJ_0 \quad (74)$$

e independe das deflexões da rede ou do acoplamento mágnon-rede, e portanto, é uma constante para a rede estática ou perturbada para qualquer intensidade de acoplamento. Escolhemos esta aproximação apresentada na equação (72) tendo em vista que a energia

do estado fundamental independe da dinâmica da rede ou da intensidade de acoplamento do mágnon com a mesma.

A partir deste hamiltoniano apresentado, seguimos uma estratégia muito semelhante à abordagem apresentada no Apêndice 2 e podemos encontrar o valor esperado de energia dado por

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle = & E_0 - g\mu_B N H (S - 1) \\ & + \sum_n \left\{ \frac{1}{2M} p_n^2 + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 + 2\hbar S [2J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_{n-1})] |\psi_n|^2 \right. \\ & \left. - 2\hbar S J_0 (\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n-1}^* \psi_n) \right\}. \end{aligned} \quad (75)$$

A partir deste hamiltoniano, podemos encontrar a relação de recorrência que descreve a dinâmica da rede

$$M\ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + 2\hbar S \alpha (|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2). \quad (76)$$

Podemos também utilizar as relações canônicas para a relação de Schroedinger dependente do tempo

$$i\hbar\dot{\psi}_n = \frac{\partial}{\partial \psi_n^*} \langle \mathcal{H} \rangle \quad \text{e} \quad i\hbar\dot{\psi}_n^* = \frac{\partial}{\partial \psi_n} \langle \mathcal{H} \rangle \quad (77)$$

para encontrar a equação que descreve a dinâmica do mágnon:

$$i\hbar\dot{\psi}_n = 2\hbar S [2J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_{n-1})] \psi_n - 2\hbar S J_0 (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (78)$$

Estes dois últimos conjuntos de equações acopladas, as equações (76) e (78), descrevem toda a dinâmica do sistema neste modelo. Em geral, os mágnons têm uma dinâmica mais lenta que a rede. Trabalhos informam que os fônons gerados por pulsos de lasers são geralmente da ordem de dezenas de giga-hertz, como em $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ [93]. Eles podem também atingir algumas centenas de GHz, como foi relatado materiais a base de silício [94, 95] e materiais utilizados em construção de bolômetros, como o NbN [96]. Em alguns casos, os fônons podem ter até algumas unidades de tera-hertz (THz) de frequência, como em cristais de telúrio [97, 98] e em GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As [99]. Já os mágnons gerados por pulsos foram relatados, por exemplo, em esferas de YIG [100] da ordem de uma dezena de GHz e em composto a base de Fe, como em CoFeB [101] com algumas unidades de GHz e filmes ultrafinos de Cr/Fe/GaAs [102] com algumas dezenas de GHz.

Alguns materiais apresentam mágnons ultrarrápidos de alta frequência (da ordem de THz), como em redes bidimensionais ferromagnéticas de CrI₃ [103], filmes ultrafinos de liga de paládio e ferro [104], em camadas de cristais magnéticos de ferro e cobalto [105]

e camadas magnéticas não colineares [106]. Nestes sistemas, a dinâmica do mágnon é muito rápida se comparadas à dinâmica da rede que geralmente apresenta a frequência da ordem de GHz.

Diante desse contexto, aplicamos a aproximação adiabática, em que o tempo característico da rede $t_l = \sqrt{M/\kappa}$ é muito maior que o tempo característico do mágnon $t_m = 1/2SJ_0$ e assim podemos tomar $\ddot{u}_n \approx 0$. Após seguir as considerações apresentadas no Apêndice 2, obtemos a equação efetiva que descreve o sistema:

$$it_m \dot{\psi}_n = 2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1} - \chi(2|\psi_n|^2 + |\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2)\psi_n. \quad (79)$$

Onde $\chi = 2\hbar S\alpha^2/J_0\kappa$ é a constante de acoplamento efetivo mágnon-rede e a definimos de forma a ser uma grandeza adimensional.

Abordaremos, nas próximas sessões, um estudo sobre a dinâmica encontrada por este modelo. Apresentamos primeiramente o estudo com o uso da aproximação adiabática não desordenado e posteriormente o desordenado, por último apresentamos o estudo sem a aproximação adiabática, com o conjunto de equações acopladas que descrevem a dinâmica da rede e do mágnon separados.

4.1 Transição para *self-trapping* e formação de *solitons*

Analisamos primeiramente o sistema em que a aproximação adiabática é válida. Logo, o sistema será regido pela equação não linear (79). Nós montamos um algoritmo computacional para fazer a integração numérica baseada no método de Runge-Kutta de 4^a ordem. Resolvemos a equação para $N = 4 \cdot 10^6$ definindo $n = 0$ no centro da cadeia.

Para a análise dos fenômenos atrelados ao mágnon, acompanhamos três grandezas muito conhecidas no ambiente acadêmico: A probabilidade de retorno ao sítio inicial, a função participação e a entropia de Shannon. Além disto, também analisamos o máximo do pacote de onda ($|\psi_{n_{max}}|^2$), correspondente ao valor mais provável de se encontrar a excitação ferromagnética no sistema.

A probabilidade de retorno é dada como a probabilidade de encontrar o pacote no centro da cadeia (definida com a posição $n = 0$), onde o pacote estava inicialmente localizado, então ela é definida por

$$R_0 = |\psi_0|^2. \quad (80)$$

Esta equação assume valores entre 0 e 1. Quando a probabilidade de retorno é evanescente no tempo, indica que o pacote não fica aprisionado na posição inicial e quando oscila em torno de um valor médio, significa que o pacote está localizado de alguma forma no centro da cadeia. No caso em que o pacote está totalmente localizado no sítio inicial, a

probabilidade de retorno é máxima, isto é, $R_0 = 1$. No caso em que o pacote de onda está estendido pela cadeia, isto é, igualmente distribuído em toda a cadeia, temos que $R_0 = 1/N$.

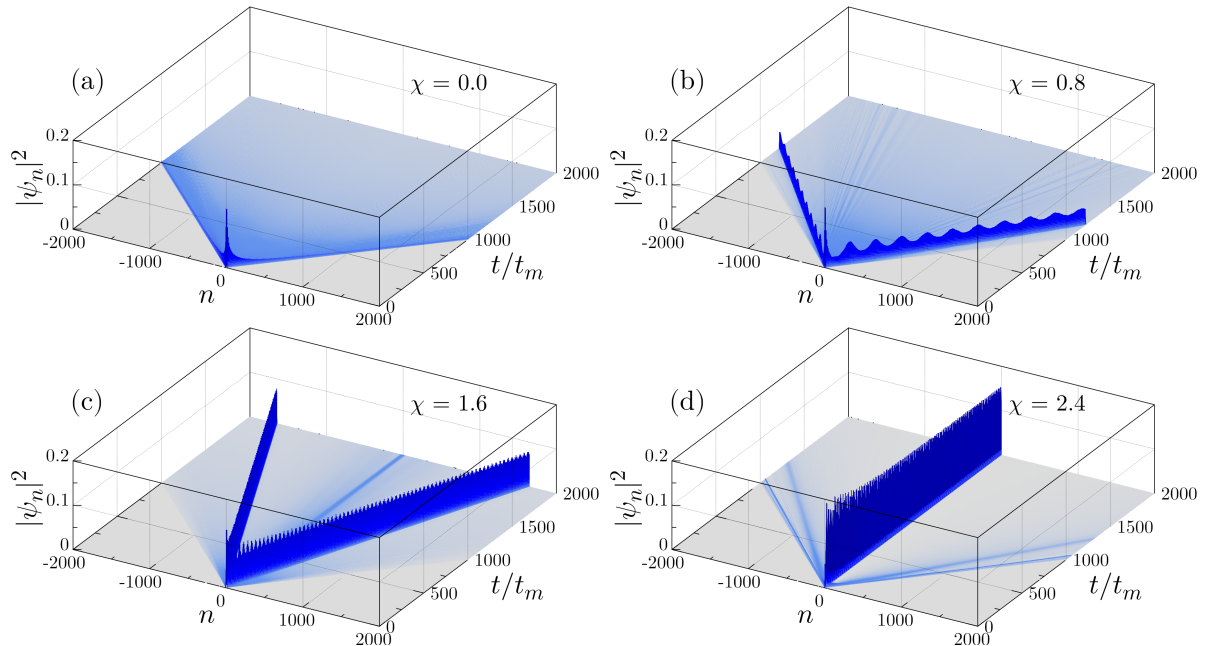
A função participação para o mágnon é definida por

$$\xi = \left(\sum_n |\psi_n|^4 \right)^{-1}. \quad (81)$$

Ela nos informa o quanto o pacote está estendido ou localizado espacialmente pela cadeia, pois os termos que contribuem no somatório são aqueles que diferem significativamente de zero. Esta função também nos fornece o comprimento de localização, quando o comprimento de localização é pequeno, o pacote está localizado, se é do tamanho da cadeia, o pacote tem caráter estendido. Quando o pacote está estendido pela cadeia, a participação assume valor máximo, pois $|\psi_n|^2 = 1/N$ e $\xi = (\sum_n |\psi_n|^4)^{-1} = [\sum_n (1/N)^2]^{-1} = (N/N^2)^{-1} = N$. Já no caso totalmente localizado, em que $|\psi_n|^2 = \delta_{n,0}$, a participação assume o menor valor possível, pois $\xi = (\sum_n |\psi_n|^4)^{-1} = (\sum_n \delta_{n,0}^2)^{-1} = 1$.

A entropia de Shannon [107] nos informa de forma indireta a quantidade de microestados compatíveis com o macroestado do sistema. Esta grandeza é uma forma de medir o grau médio da incerteza a respeito de fontes de informação. Ela é definida como

Figura 23 - Evolução temporal do pacote do mágnon para alguns valores de χ . Para (a) $\chi = 0.00$, o sistema linear, o pacote se estende pela cadeia. Para (b) $\chi = 0.80$ e (c) $\chi = 1.60$ há formação de estruturas do tipo solitônicas. E para (d) $\chi = 2.40$ aparece modos autoaprisionados na posição inicial no regime de forte intensidade da não linearidade.



Fonte: Autor, 2020.

$$S_T = - \sum_n |\psi_n|^2 \ln |\psi_n|^2. \quad (82)$$

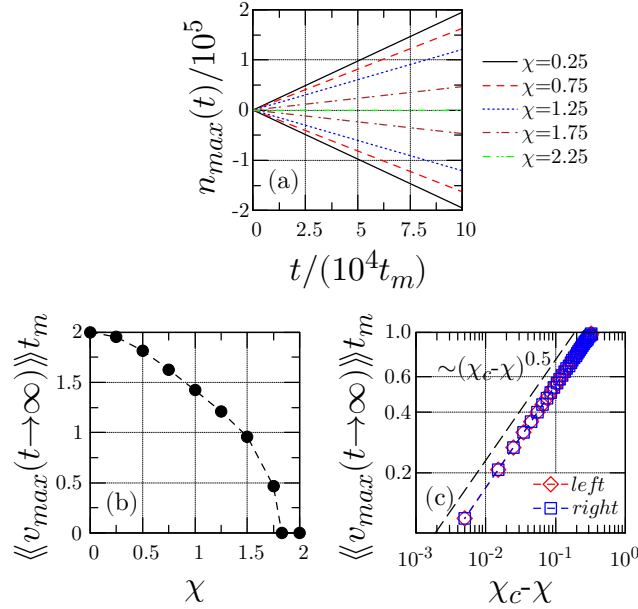
Assim, quando o pacote está localizado num único sítio, $S_T = 0$ pois quando $|\psi_n|^2 = 1$, $\ln |\psi_n|^2 = 0$ e quando $|\psi_n|^2 = 0$ já anula o termo, resultando em todos os termos do somatório nulos. Neste caso o grau de incerteza é nula. Quando o pacote está estendido pela cadeia, temos $S_T = - \sum_n (1/N) \ln(1/N) = -(N/N)(-\ln N) = \ln N$. Aqui o grau de incerteza é máxima.

Para o elétron de Bloch, o comportamento dessas funções no tempo é bem conhecido. Para o caso da evolução temporal a partir do pacote do tipo delta no centro da cadeia, a probabilidade de retorno oscila e tem um decaimento polinomial a partir de 1. A participação parte de 1 e para um tempo longo, tem um comportamento balístico, isto é, é proporcional a t . Já a entropia de Shannon parte de 0 e para um tempo longo é proporcional a $\ln t$.

Efetuamos a evolução temporal a partir do pacote totalmente localizado no centro da cadeia, que corresponde a um único *spin* excitado. A cadeia está inicialmente estática e durante toda a evolução temporal não haverá efeitos de cauda ou frente de onda das deformações na rede. Na Figura 23 apresentamos a evolução temporal da densidade de probabilidade (o perfil do pacote de onda magnônica $|\psi_n|^2$) para alguns valores de χ . Na Figura 23a, quando o sistema é linear ($\chi = 0.00$), o magnon se comporta como o elétron de Bloch e tende ao estado completamente estendido. Para os valores pequenos de χ , como nas Figuras 23b e 23c, há a formação de modos caminhantes não dispersivos. Além disso, vemos que com o aumento de χ , a velocidade desses modos diminui. Na Figura 23d é possível ver que a velocidade desses modos é nula. Logo, há algum valor crítico χ_c entre 1.6 e 2.4 que promove o autoaprisionamento do pacote no centro da cadeia, fenômeno já discutido e nomeado de *self-trapping*.

Para caracterizar com precisão o valor necessário de χ para haver a transição para *self-trapping*, decidimos investigar a posição e a velocidade do valor mais provável da distribuição de probabilidade, isto é, o pico do pacote de onda tanto à direita, tanto à esquerda do centro. Acompanhamos os picos destes modos não dispersivos no tempo na Figura 24a, onde n_{max} representa a posição dos modos caminhantes tanto pra direita, tanto pra esquerda da posição inicial ($n = 0$). Nesta figura é possível ver que a velocidade do modo para direita e para a esquerda são iguais, devido a simetria do hamiltoniano e da condição inicial do pacote. Vemos também que a velocidade do modo é menor quando aumentamos χ e os resultados sugerem que o ponto crítico está entre $\chi = 1.75$ e $\chi = 2.25$. Ao calcular a velocidade do modo caminhante $\langle\langle v_{max}(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ (a notação representa uma média temporal para um tempo longo), vemos na Figura 24b que ela é máxima no caso linear e assume um valor nulo a partir de um valor crítico inferior a $\chi = 2.0$. Através de uma análise de escala, vemos que segue uma lei de potência do tipo $\langle\langle v_{max}(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle \propto$

Figura 24 - (a) Trajetória das estruturas solitônicas para alguns valores de χ . (b) Comportamento da velocidade em função de χ e (c) a análise de escala da velocidade dos modos caminhantes para esquerda e direita do centro da cadeia. As velocidades das estruturas têm uma dependência por uma lei de potência do tipo $(\chi_c - \chi)^{0.5}$ com $\chi_c = 1.825$.



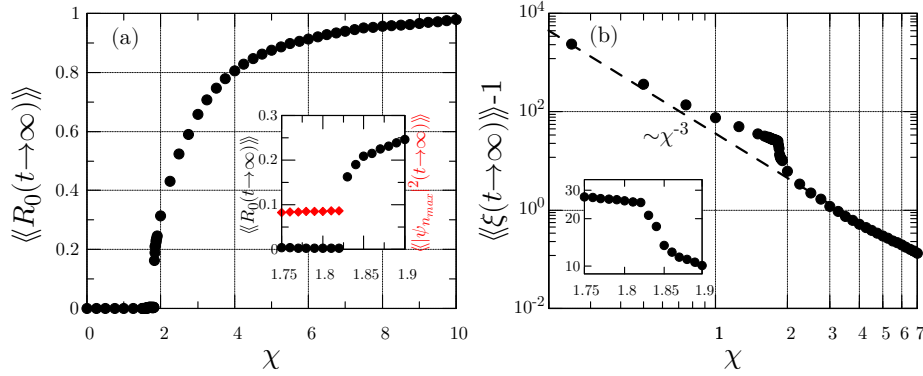
Fonte: Autor, 2020.

$(\chi_c - \chi)^\beta$ perto da transição e na Figura 24c mostramos que há um expoente de transição de $\beta = 1/2$, um expoente característico de sistemas unidimensionais. Além disto, foi encontrado o valor de $\chi_c = 1.825$ a partir desta análise, resultado semelhante ao reportado por Economou [54] para a dinâmica do elétron.

Ao medirmos a média temporal da probabilidade de retorno para um tempo longo $\langle\langle R_0(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$, vemos que ela é aproximadamente nula até $\chi = \chi_c$, onde ela passa a ser significativamente diferente de zero, como vemos na Figura 25a. Para valores de $\chi > \chi_c$, a probabilidade de retorno cresce e assintota o valor de 1, seu máximo. Isto demonstra que quando a velocidade é nula, uma grande parte do pacote está localizado na posição inicial. A probabilidade de retorno apresenta uma descontinuidade em torno da transição, pois quando os dois modos pra direita e para esquerda tem suas velocidades nulas, as porções são aprisionadas juntas na posição inicial. O gráfico interno na Figura 25a mostra que o valor da probabilidade de retorno após a transição ($\langle\langle R_0(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle \approx 0.16$ em $\chi = 1.83$) é dada pela soma dos valores médios da amplitude máxima dos modos para direita e para esquerda ($\langle\langle |\psi_{n_{max}}|^2(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle \approx 0.08$ em $\chi = 1.82$) pois eles passam a ter velocidades nula e se aprisionam juntos.

A função participação mostrada na Figura 25b, para valores de χ longe da transição, tem o mesmo comportamento dado por uma lei de potência, porém perto da transição é apresentado uma singularidade. No gráfico interno, é possível ver que quando há a transição, isto é, quando os dois modos caminhantes se juntam, a participação não apre-

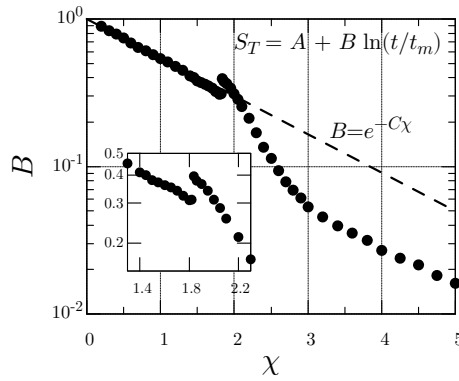
Figura 25 - (a) Média temporal da probabilidade de retorno para tempo longo em função de χ . O gráfico interno mostra a transição descontínua em χ_c e que o valor da probabilidade de retorno após a transição é o dobro da amplitude das estruturas caminhantes. (b) Comportamento da média temporal da participação para um tempo longo. Para valores de χ pequenos e grandes a participação se comporta por uma lei de potência do tipo χ^{-3} . Em torno da transição há uma singularidade e o gráfico interno mostra que não há descontinuidade na transição.



Fonte: Autor, 2020.

senta descontinuidade.

Figura 26 - Inclinação da entropia em função à $\ln t$ para um tempo longo dado por $S_T = A + B \ln(t/t_m)$. Na transição para *self-trapping* a entropia escala de forma diferente e apresenta uma descontinuidade vista no gráfico interno. Para valores grandes e para valores pequenos de χ , o comportamento pode ser bem descrito por uma lei exponencial do tipo $B = e^{-C\chi}$.

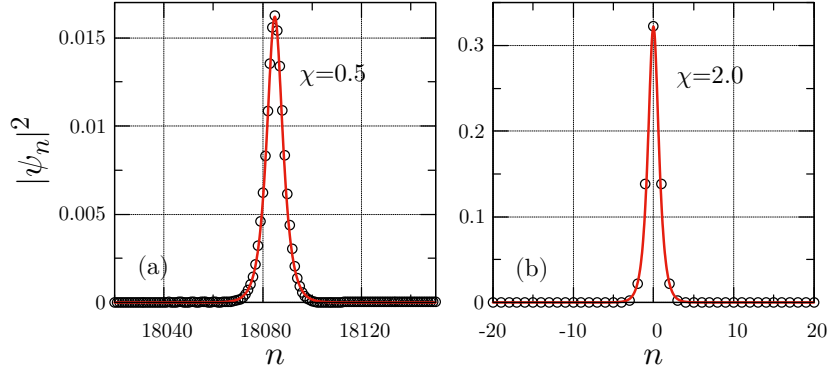


Fonte: Autor, 2020.

A entropia de Shannon para um tempo longo escala com inclinações diferentes em relação à $\ln t$. Desta forma, fizemos uma regressão do tipo $S_T = A + B \ln(t/t_m)$ e colocamos na Figura 26 $B \times \chi$, de forma que quando há formação dos modos caminhantes, a entropia escala, para um tempo longo, seguindo uma lei exponencial do tipo $B = e^{-C\chi}$, com $C > 0$. Todavia, com a junção dos modos caminhantes havendo a transição para *self-trapping*, há uma mudança no comportamento da entropia e no gráfico interno é possível ver uma descontinuidade na inclinação B em χ_c . Logo após a transição, o comportamento da entropia é diferenciado e, para valores de χ grande, ela retorna a se comportar com a mesma lei exponencial de antes à transição.

Para finalizar as características da formação de modos caminhantes e a transição

Figura 27 - Perfil do pacote de onda magnônico em torno do (a) modo caminhante para $\chi = 0.5$ e do (b) modo autoaprisionado na posição inicial para $\chi = 2.0$ em $t = 10^4 t_m$. Os círculos são o perfil do pacote dado pela evolução temporal e a curva preenchida em vermelho é dada pela solução de *breathing bright soliton*.



Fonte: Autor, 2020.

para *self-trapping*, analisamos o perfil espacial do pacote de onda. Tendo em vista todas as soluções do tipo *soliton* encontradas em sistemas não lineares eletrônicos, buscamos verificar se os modos não dispersivos são estruturas solitônicas. Na Figura 27 apresentamos a parte do perfil do pacote corresponde ao modo caminhante para $\chi = 0.50$ (Figura 27a) e o modo preso na posição inicial para $\chi = 2.00$ (Figura 27b) para $t = 10^4 t_m$, considerado um tempo longo. De fato, todos os modos caminhantes apresentados para $\chi < \chi_c$ são *solitons*, assim como os modos aprisionados na posição inicial para $\chi > \chi_c$. Devido ao caráter oscilatório medido a partir de $|\psi_{n_{max}}|^2$, dizemos que as soluções encontradas são *breathing bright solitons*²¹ e a equação que descreve esse pacote é dada por

$$|\psi_n(t)|^2 = |\psi_{n_{max}}(t)|^2 \cdot \text{sech}^2[\lambda |\psi_{n_{max}}(t)|^2 (n \pm v_{max} t)]. \quad (83)$$

As linhas sólidas em vermelho na Figura 27 são construídas a partir desta solução e os círculos são pela evolução temporal do pacote.

Os resultados apresentados nessa seção foram publicados na referência [108] e está apresentado no Anexo.

4.2 Enfraquecimento da localização no sistema desordenado

Partimos para a análise do sistema ainda regido pela aproximação adiabática, mas num cristal ferromagnético desordenado, onde os *exchanges* têm flutuações aleatórias dJ em torno de um valor médio J_0 , isto é, faremos $J_{n,n+1} = J_0 + dJ$. Definimos de largura de desordem W , o valor correspondente aos limites dos valores aleatórios, tal que $-W/2 > dJ > W/2$. Neste sistema, por estarmos descrevendo um sistema ferromagnético,

²¹O termo *breathing* se dá pelo caráter oscilatório tanto do pico, tanto da largura do *bright soliton*, que apresenta um comportamento semelhante à respirações.

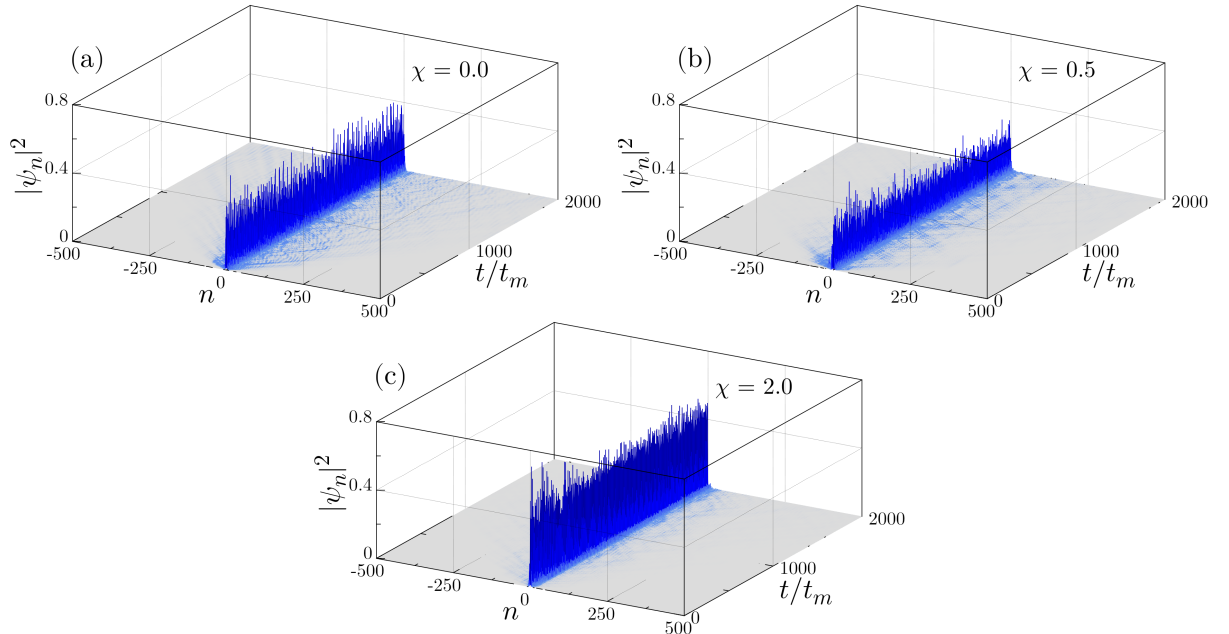
temos que $J_{n,n+1} > 0$, assim impomos a condição $W < 2J_0$.

Além de utilizarmos as funções já apresentadas na seção anterior, também analisaremos o desvio quadrático médio

$$\sigma = \sqrt{\sum_n (n - \langle n \rangle)^2 |\psi_n|^2} \quad (84)$$

que apresenta um grau de localização espacial. Aqui $\langle n \rangle = \sum_n n |\psi_n|^2$ é a posição média do pacote, também chamada de *centróide*. Para o estado completamente localizado, temos $\sigma = 0$ e para o estado totalmente estendido pela cadeia, temos $\sigma = \sqrt{\frac{2}{3}(N+1)(N+\frac{1}{2})}$ (no caso em que N é muito grande, temos $\sigma \approx \sqrt{\frac{2}{3}N}$). Esta grandeza é muito sensível ao perfil da cauda da função de onda longe do seu centróide.

Figura 28 - Evolução temporal do pacote de onda inicialmente totalmente localizado no centro de uma cadeia ferromagnética desordenada não linear. A largura de desordem utilizada é $W = 1.5J_0$. (a) Localização mediante à desordem num sistema não linear ($\chi = 0.0$), (b) enfraquecimento da localização mediante a desordem no regime de baixa não linearidade e (c) autoarmadilhamento perturbado pela desordem no regime de alta não linearidade.

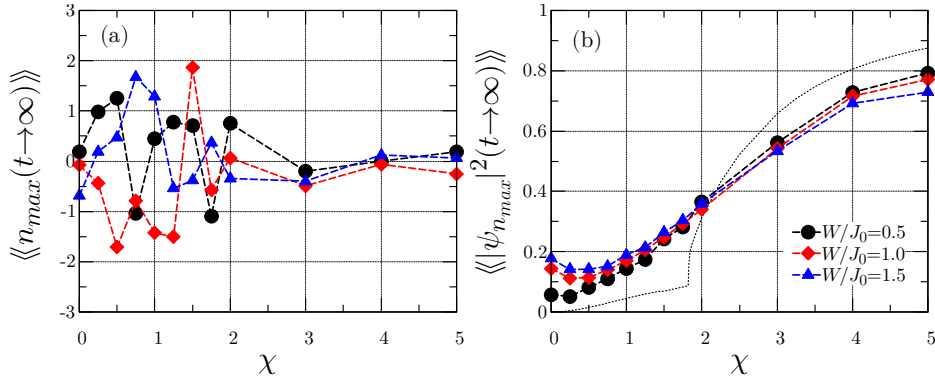


Fonte: Autor, 2020.

Fizemos a evolução temporal a partir do estado localizado no centro da cadeia para os sistema desordenado com largura de desordem $W = 1.5J_0$. Na Figura 28 vemos que quando o sistema é linear ($\chi = 0.0$ na Figura 28a), o pacote aparenta estar localizado mediante à desordem existente no sistema. Para fracos valores de não linearidade, é possível ver que o pacote ainda é predominantemente localizado pela desordem, como na Figura 28b com $\chi = 0.5$, mas os picos oscilam ligeiramente mais baixos do que em $\chi = 0.0$. Neste regime, aparentemente o número de sítios visitados pela porção significativa do pacote é ligeiramente maior após um transiente inicial. Porém, quando há grandes valores

de não linearidade, como apresentado na Figura 28c para $\chi = 2.0$, a figura sugere que o pacote é predominantemente autoarmadilhado, com um comprimento de localização muito menor do que em $\chi = 0.0$ (A discussão sobre comprimento de localização será abordada na função de participação logo à frente).

Figura 29 - (a) Média temporal da posição mais provável e (b) média temporal do valor mais provável para alguns valores de W . O valor mais provável não se afasta muito do centro da cadeia. O valor mais provável apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização mediante à desordem no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado pela desordem no regime de alta não linearidade. A linha pontilhada é o comportamento do valor mais provável no sistema cristalino.

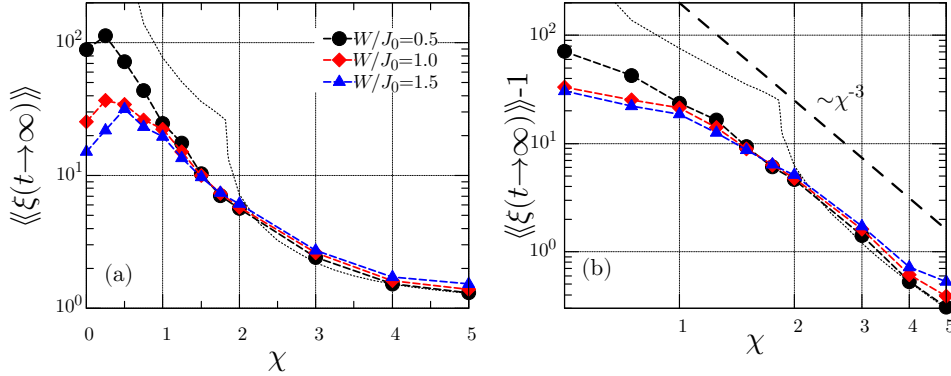


Fonte: Autor, 2020.

Medimos primeiramente o valor máximo do pacote, isto é, o valor mais provável de se encontrar a excitação ferromagnética. Computamos a média temporal de 20 realizações da dinâmica do valor mais provável $\langle\langle |\psi_{n_{max}}|^2(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ utilizando diferentes amostras e apresentamos seu comportamento na Figura 29. Devido à desordem e à não linearidade presente, a posição do valor mais provável permaneceu próxima do centro da cadeia para qualquer conjunto de parâmetros de W e χ . Temos na Figura 29a que a média temporal da posição do valor mais provável para qualquer valor de desordem e não linearidade é em torno do centro da cadeia ($\langle\langle n_{max}(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle \in [-2, 2]$). Para não linearidade baixa ($\chi < 1.0$), o valor de $\langle\langle |\psi_{n_{max}}|^2(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ na Figura 29b apresenta uma ligeira diminuição até um valor mínimo e volta a subir, mas ainda valores semelhantes ao caso linear. Para não linearidade alta ($\chi > 2.0$), o valor mais provável se comporta de forma semelhante ao caso cristalino (não desordenado) já discutido na seção anterior. A linha pontilhada corresponde ao valor de $\langle\langle |\psi_{n_{max}}|^2(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ (quando $\chi < \chi_c = 1.825$) e $\langle\langle R_0(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ (quando $\chi > \chi_c = 1.825$), os valores mais prováveis para o caso cristalino publicados na referência [108] (Ver Figura 25a).

A partir destes gráficos da Figura 29, vemos que no regime de não linearidade baixa a não linearidade serve como parâmetro perturbativo para a desordem e causa o enfraquecimento da porção localizada mediante à desordem, até que toma intensidade o suficiente para fortalecer a localização. Também é possível ver que no regime de não linearidade alta a desordem se torna um parâmetro perturbativo e enfraquece o autoar-

Figura 30 - Média temporal da função participação para alguns valores de W . (a) A participação apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado no regime de alta não linearidade. A linha pontilhada é o comportamento da participação no sistema cristalino. (b) No regime de alta não linearidade, a participação se comporta de forma semelhante ao caso cristalino.



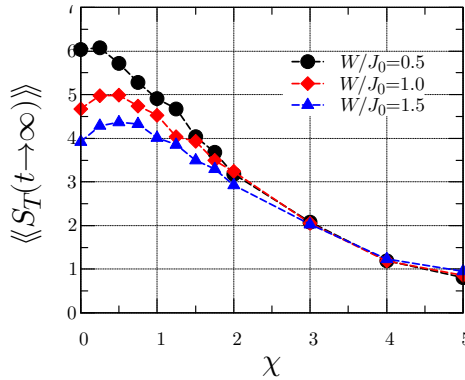
Fonte: Autor, 2020.

madilhamento. Como um todo, o valor mais provável apresenta um comportamento não monotônico, diferentemente do caso cristalino que era apenas crescente com o aumento de χ . No regime intermediário, tanto a desordem e a não linearidade promovem uma localização com características de ambas. Ainda é possível ver que para $\chi \approx 1.75$ o valor mais provável parece assumir o mesmo valor para todos os valores de largura de desordem W .

Medimos a média temporal da função participação obtida das 20 amostras para cada conjunto de parâmetros de W e χ e apresentamos na Figura 30. Esta função também pode ser interpretada como o valor do comprimento de localização no caso desordenado. Nesta figura, é possível ver que a participação também apresenta um caráter não monotônico, diferente do apresentado no caso cristalino que era apenas decrescente (Figura 30a). A linha pontilhada apresenta o comportamento do caso cristalino [108]. Para o regime de baixa não linearidade, vemos o enfraquecimento da localização mediada pela desordem na Figura 30a, onde o comprimento de localização (participação) aumenta a medida que χ cresce. Entretanto, este comportamento se inverte após determinado valor de χ . No regime de alta não linearidade, a desordem se torna mais uma vez, um parâmetro perturbativo e enfraquece o autoarmadilhamento, levando ao aumento do comprimento de localização e, por consequência, ao aumento da participação. Também podemos ver que para o valor de $\chi \approx 1.75$ a participação parece ser insensível à largura de desordem W . Vemos na Figura 30b que no regime de alta não linearidade a participação tem um decaimento semelhante ao caso cristalino, onde observamos uma dependência por lei de potência do tipo χ^{-3} .

Computamos posteriormente a entropia de Shannon obtida das 20 amostras para

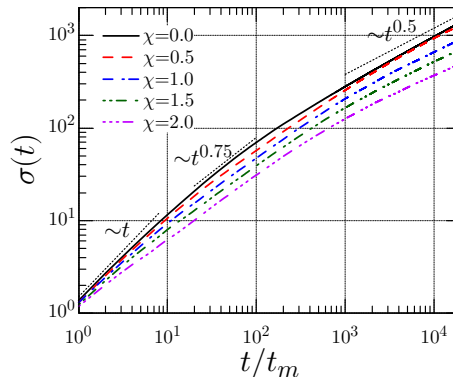
Figura 31 - Média temporal da entropia de Shannon para alguns valores de W . A entropia apresenta um caráter não monotônico, mostrando o enfraquecimento da localização no regime de baixa não linearidade e o autoarmadilhamento perturbado no regime de alta não linearidade.



Fonte: Autor, 2020.

cada conjunto de parâmetros de W e χ e ao contrário do caso cristalino, aqui ela oscila em torno de um determinado valor após um tempo longo. Na Figura 31 podemos ver que a média temporal da entropia de Shannon também apresenta o enfraquecimento da localização para o regime de fraca não linearidade ($\chi < 1.0$). Mas para o regime de alta não linearidade a entropia parece ser insensível à largura de desordem e converge para o mesmo valor, mostrando que há uma pequena incerteza nesse regime.

Figura 32 - Evolução temporal do desvio quadrático médio para alguns valores de χ para $W = 0.5J_0$. O desvio quadrático médio apresenta um comportamento balístico nos tempos iniciais e após um transiente inicial apresenta um comportamento difusivo para tempo longo.



Fonte: Autor, 2020.

Todas essas funções medidas estabilizaram após um tempo longo, indicando que o pacote magnônico está localizado no sistema desordenado com ou sem a presença da não linearidade. A medida do valor máximo $|\psi_{n_{max}}|^2(t)$ ocorre em torno da posição central vista pelo comportamento de $n_{max}(t)$, a função de participação $\xi(t)$ é sensível às amplitudes que diferem de forma significativa da sua vizinhança e a entropia $S_T(t)$ apresenta um grau da incerteza. A primeira mede o caráter localizado em torno do centro da cadeia e as duas últimas acabam não apresentando informações sobre a cauda do pacote. Mas como vimos no capítulo anterior [72,73], o sistema desordenado apresenta estados balísticos nos

tempos iniciais, superdifusivos em tempos intermediários e difusivos em tempos longos.

Analisamos o comportamento do desvio quadrático médio de 20 realizações para cada conjunto de valores de W e χ já citado e apresentamos exclusivamente para a largura de desordem $W = 0.5J_0$ na Figura 32. Podemos ver que para o caso linear, o desvio quadrático médio apresenta o comportamento já previsto pela literatura, em que tem um comportamento balístico ($\sigma \sim t$) nos tempos iniciais e após um transiente inicial de caráter superdifusivo ($\sigma \sim t^{0.75}$) apresenta um comportamento difusivo ($\sigma \sim t^{0.5}$) para um tempo longo. A presença da não linearidade diminuiu o tempo em que o sistema apresenta o comportamento balístico e, de forma geral, dificultou o crescimento atingindo valores menores para o mesmo tempo, mas após o transiente todos apresentam ainda um comportamento difusivo. Para os demais valores de W , os resultados são similares.

Por estes resultados vemos que sempre há uma solução formada por uma superposição de um grande porção localizada em torno do centro da cadeia e a cauda que se apresenta um caráter difusivo. Devido à presença da desordem, não foi encontrado estruturas solitônicas estáveis no sistema. A presença da não linearidade diminuiu o espalhamento da função de onda, embora o comportamento ainda ter permanecido difusivo. Não foi encontrado o comportamento subdifusivo da participação, como foi encontrado em alguns sistemas não lineares desordenados eletrônicos [57–59] e magnéticos [75].

4.3 Formação de *polarons*

Para analisar as estruturas de natureza mecânica formadas na rede, não trabalharemos com a aproximação adiabática, visto que ela despreza alguns efeitos na rede. Abordaremos o sistema formado pelo conjunto de equações acopladas dados pelas equações (76) e (78). Definiremos o parâmetro

$$\tau = \frac{t_m}{t_l} \quad (85)$$

que expressa a razão entre os tempos característicos do magnon ($t_m = 1/2SJ_0$) e o da rede ($t_l = \sqrt{M/\kappa}$). Utilizando o parâmetro de acoplamento efetivo magnon-rede

$$\chi = \frac{2\hbar S\alpha^2}{J_0\kappa} \quad (86)$$

e a razão entre os tempos característicos τ , podemos descrever todo o sistema.

Desta forma, as equações (76) e (78) podem ser reescritas como

$$\frac{t_m^2}{\tau^2} \ddot{x}_n = x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n - \sqrt{\chi}(|\psi_{n-1}|^2 - |\psi_{n+1}|^2) \quad (87)$$

$$it_m \dot{\psi}_n = 2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1} - \sqrt{\chi}(x_{n+1} - x_{n-1})\psi_n, \quad (88)$$

onde $x_n = \sqrt{\kappa/\hbar^2 J_0} u_n$. Em alguns sistemas [93–102] vimos que, na maioria, a dinâmica da rede é mais rápida do que as excitações coletivas. Mágns podem ser detectados em filmes finos de vanadium tetracyanotileno (V(TCBE)_x) [85], em que mágns ferrimagnéticos são acoplados à fônons mais energéticos, isto é, a dinâmica na rede é mais rápida do que as excitações coletivas no sistema. Este trabalho aborda um material com uma temperatura de Curie maior que a temperatura ambiente e na presença de um campo magnético externo. Diante deste contexto apresentado, abordaremos apenas a situação em que $\tau > 1$, que significa a dinâmica da rede ser mais rápida do que a dinâmica do mágns. Para efeitos associados à rede, investigaremos as trocas de energias, a deformação na rede no centro da cadeia ρ_0 e a participação da rede Ξ . Para efeitos associados ao mágns, seguiremos uma abordagem semelhante ao da seção 4.1

A energia adimensional do mágns será definida por

$$\begin{aligned} E_m &= \frac{\langle \mathcal{H}_{mag} \rangle}{2\hbar S J_0} = \sum_n \left\{ \left[2 + \frac{\alpha}{J_0} (u_{n+1} - u_{n-1}) \right] |\psi_n|^2 - \psi_{n+1}^* \psi_n - \psi_{n-1}^* \psi_n \right\} \\ &= \sum_n \left\{ [2 + \sqrt{\chi} (x_{n+1} - x_{n-1})] |\psi_n|^2 - \psi_{n+1}^* \psi_n - \psi_{n-1}^* \psi_n \right\} \end{aligned} \quad (89)$$

e a energia adimensional da rede será dada por

$$E_l = \frac{\langle \mathcal{H}_{latt} \rangle}{2\hbar S J_0} = \frac{\kappa}{4\hbar S J_0} \sum_n \left[\frac{M}{\kappa} \dot{u}_n^2 + (u_{n+1} - u_n)^2 \right] = \frac{1}{2} \sum_n \left[\frac{t_m^2}{\tau^2} \dot{x}_n^2 + (x_{n+1} - x_n)^2 \right]. \quad (90)$$

Aqui será considerado $E_0 - g\mu_B N H (S - 1)$ como referencial de energia.

Da nossa condição inicial do pacote do tipo delta ($\psi_n = \delta_{n,0}$) e a rede estática na posição de equilíbrio, teremos um pacote magnônico com energia inicial $E_m(t=0) = 2$ e energia da rede nula, isto é, $E_l(t=0) = 0$. Diante disto, abordaremos as trocas de energias $\Delta E_m = E_m - 2$ e $\Delta E_l = E_l$.

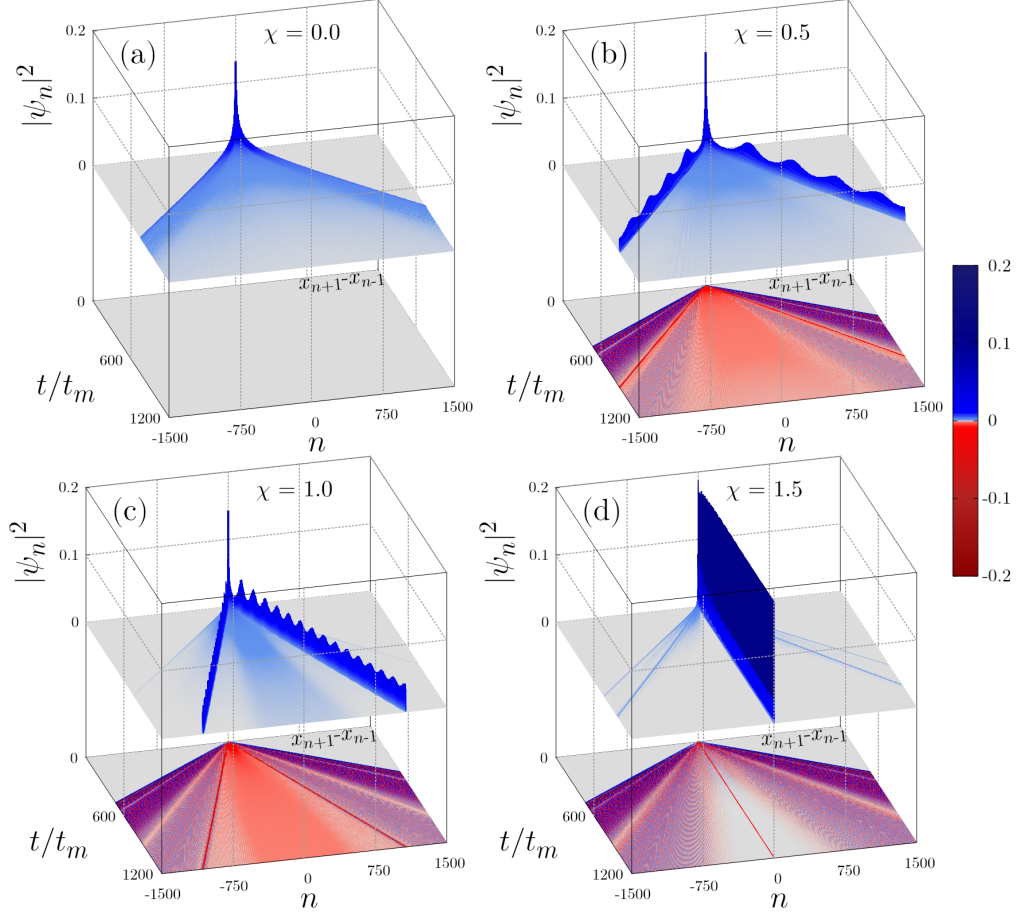
A função de retorno representa a deformação na rede no centro da cadeia e será definido de maneira adimensional como

$$\rho_0 = \sqrt{\frac{\kappa}{2\hbar S J_0}} |u_1 - u_{-1}| = |x_1 - x_{-1}|, \quad (91)$$

de tal forma que o módulo da energia potencial criada no centro da cadeia é dada por $2\hbar S J_0 \sqrt{\chi} \rho_0$. Quanto maior ρ_0 , maior a energia potencial sentida pelo mágns no centro da cadeia.

A função participação para a rede será definida em função das energias dos oscila-

Figura 33 - Evolução temporal do pacote magnônico $|\psi_n|^2$ inicialmente totalmente localizado no centro da cadeia ferromagnética e das deformações na rede $x_{n+1} - x_{n-1}$ inicialmente estática para $\tau = 10^{0.5}$. (a) Sem acoplamento ($\chi = 0.0$) com a rede ela permanece estática e mágnon se dispersa pela rede, (b) com um valor pequeno de acoplamento ($\chi = 0.5$), surgem modos não dispersivos caminhantes acoplados com a rede que também apresenta estruturas que os acompanha. (c) Com o aumento de χ ($= 1.0$), os estados ligados têm velocidade menor do que em $\chi = 0.5$ e (d) para grandes valores de χ ($= 1.5$), o pacote é predominantemente aprisionado no centro da cadeia com velocidade zero.



Fonte: Autor, 2020.

dores acoplados, assim como foi definido por Nazareno [109]:

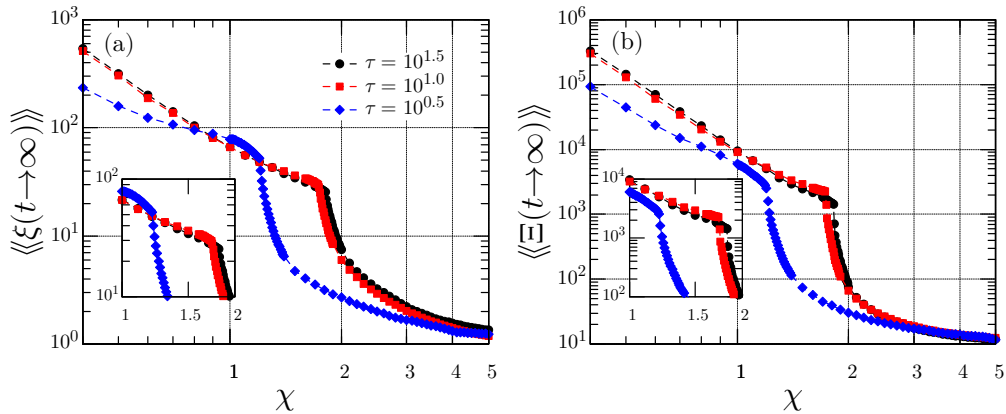
$$\begin{aligned}
 \Xi &= \frac{\left\{ \sum_n \left[\frac{M}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 \right] \right\}^2}{\sum_n \left[\frac{M}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{\kappa}{4} (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{\kappa}{4} (u_n - u_{n-1})^2 \right]^2} \\
 &= \frac{\left\{ \sum_n \left[\frac{t_m^2}{\tau^2} \dot{x}_n^2 + (x_{n+1} - x_n)^2 \right] \right\}^2}{\sum_n \left[\frac{t_m^2}{\tau^2} \dot{x}_n^2 + \frac{1}{2} (x_{n+1} - x_n)^2 + \frac{1}{2} (x_n - x_{n-1})^2 \right]^2}.
 \end{aligned} \tag{92}$$

Aqui, no numerador apenas é a energia total do sistema ao quadrado, mas no somatório do denominador, temos o quadrado da energia de apenas um oscilador. Como cada oscilador é acoplado com os primeiros vizinhos, definimos a energia de forma simetrizada de tal forma que a energia potencial em cada íon é dada pela média das energias potenciais

geradas com os pares acoplados a ele. Na situação em que apenas um único íon está deslocado ou tem uma velocidade inicial e o restante da rede está estática na posição de equilíbrio, então $\Xi = 1$, seu valor mínimo. Contudo, quando todos os íons têm exatamente a mesma energia, isto é, quando a onda de matéria está estendida pela rede no modo acústico, a função atinge seu valor máximo igual ao tamanho da cadeia ($\Xi = N$).

Acompanhamos a evolução do mágnon a partir da excitação local numa rede inicialmente estática por integração numérica usando com base o método de Runge-Kutta de 8^a ordem²². Para o parâmetro $\tau = 10^{0.5}$, apresentamos na Figura 33a que, na ausência de acoplamento ($\chi = 0$), o mágnon se dispersa pela rede que permanece estática. Nas Figuras 33b e 33c mostra que com o acoplamento mágnon-rede, a excitação inicial deforma a rede e cria duas frentes de onda e também uma porção do pacote magnônico é aprisionado e arrastado pela rede. Com o aumento do acoplamento (de $\chi = 0.5$ para $\chi = 1.0$) a velocidade destas estruturas não dispersivas diminui. Estas estruturas são *polarons* magnônicos, estados ligados entre o mágnon e a rede. Também são *solitons*, soluções desses sistemas já definidos nas seções anteriores [108]. A Figura 33d apresenta que há um valor χ_c menor que $\chi = 1.5$ que promove o autoarmadilhamento dos *polarons* na posição central, quando suas velocidades são nulas. Os *polarons* magnônicos ocorrem quando há uma deformação na rede que modifica a distribuição magnética do material e gera estados ligados do mágnon com a rede. Estes podem ou não ter velocidade, semelhante a uma

Figura 34 - Média temporal das funções participações para alguns valores de τ para um tempo muito longo. A participação do (a) mágnon e da (b) rede apresenta um decaimento com surgimento de uma singularidade que representa uma transição de fases. O comportamento da singularidade é mais abrupto com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede.



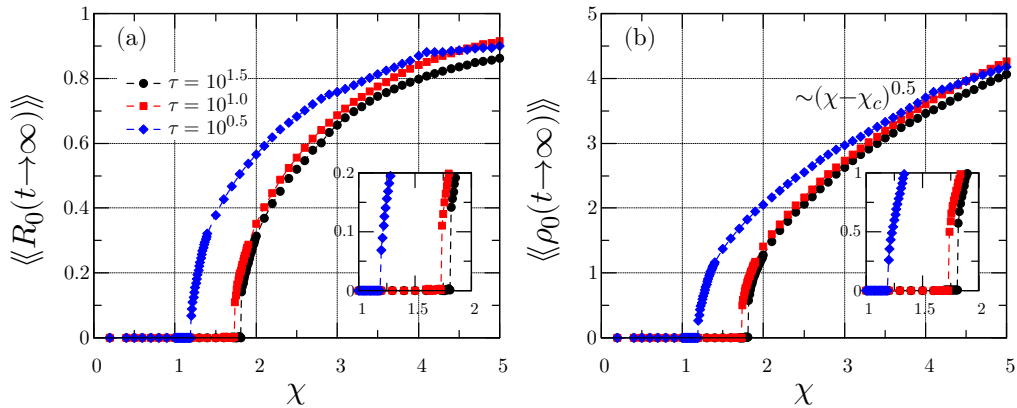
Fonte: Autor, 2020.

²²Em contrapartida à ordem utilizada nas seções anteriores, utilizamos um grau maior (de 4^a passamos para 8^a ordem) devido ao custo computacional maior. Neste sistema precisamos atingir, em certas configurações, tempos de até 100 vezes maiores, então para aumentar o step de integração sem perder a precisão da integração numérica, tornou-se necessário o uso de um método de integração mais preciso, mesmo que com mais etapas numéricas. Desta forma conseguimos atingir tempos da evolução maiores sem aumentar proporcionalmente o tempo real de execução do algoritmo.

partícula massiva.

Calculamos as médias temporais das participações do mágnon ($\langle\langle \xi(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$) e da rede ($\langle\langle \Xi(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$) para um tempo muito longo. Para qualquer valor de χ não nulo a participação oscila em torno de um valor determinado apresentado na Figura 34, que demonstra que o aumento do acoplamento promove uma maior localização tanto do pacote magnônico, tanto da rede. É possível ver nos gráficos internos que o comportamento da participação apresenta uma singularidade, isto é, uma transição contínua mas de derivada descontínua. Esta transição coincide com o apresentado na Figura 33, onde a partir de um valor crítico χ_c , há a transição de *polarons* viajantes para *polarons* estacionários na posição central. O valor de χ_c depende do valor de τ , de forma que a transição é deslocada para valores maiores com o aumento de τ . Também é possível ver que para $\tau = 10^{0.5}$, principalmente, o comportamento perto da transição é suavizado. Este comportamento é consequência da cauda da frente de onda gerado na rede, pois para este valor de τ a velocidade da frente de onda na rede ($v_l^{(f)} = \tau = \sqrt{10}$) é muito próxima da frente de onda do mágnon ($v_m^{(f)} = 2.0$). Desta forma, a estrutura apresentada na rede é muito perturbada pela cauda da frente de onda e modifica a formação do estado ligado.

Figura 35 - Média temporal da (a) probabilidade de retorno R_0 e a (b) função de retorno da rede ρ_0 para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Ambas são praticamente nulas até um valor χ_c e apresentam uma transição descontínua para valores altos, indicando a formação de *polarons* estacionários no centro da cadeia. A descontinuidade é maior com o aumento de τ . Após a transição, ρ_0 aumenta com uma lei de potência do tipo $(\chi - \chi_c)^{0.5}$. O comportamento de ambas as funções após a transição é mais suave com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede.



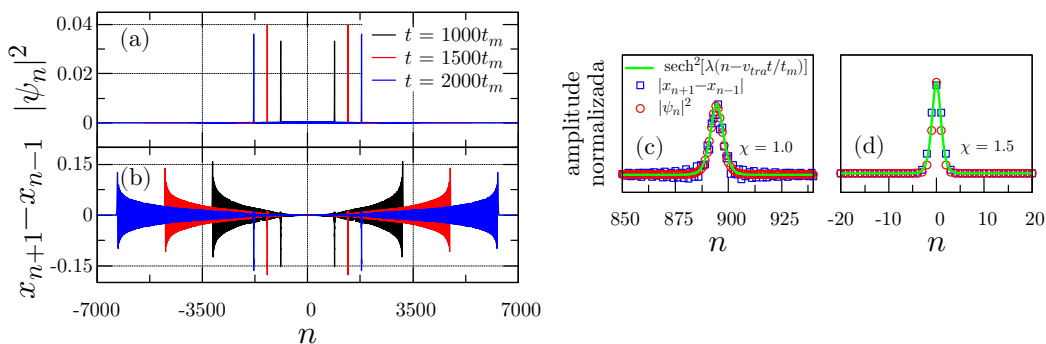
Fonte: Autor, 2020.

Acompanhamos também o comportamento da probabilidade de retorno $R_0 = |\psi_0|^2$ (que tem caráter oscilatório no tempo para esta condição inicial utilizada) e apresentamos na Figura 35a o comportamento da média temporal da probabilidade de retorno para um tempo muito longo em função de χ para os mesmos valores de τ utilizados anteriormente. A função é evanescente no tempo quando $\chi < \chi_c$, acima de χ_c a probabilidade de retorno começa a oscilar em torno de valores significativamente diferente de zero e quando $\chi \rightarrow \infty$

temos que $\langle\langle R_0(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle \rightarrow 1$. Este comportamento nos mostra que, a partir do valor crítico, há um autoaprisionamento do pacote no centro da cadeia após um transiente inicial, fenômeno conhecido como transição *self-trapping*, quando os *polarons* passam de viajantes para estacionários na posição inicial. É possível ver no gráfico interno que a transição apresentada na probabilidade de retorno é descontínua e o valor do salto da descontinuidade aumenta com o valor τ . Este comportamento é devido à soma dos dois *polarons* viajantes quando eles têm velocidade nula e passam a ser um único estacionário. Além disto, é possível ver um comportamento oscilatório na curva referente a $\tau = 10^{0.5}$, principalmente, causado pelos efeitos de cauda longa da frente de onda da rede que perturbam a formação dos estados ligados. Para valores de τ maiores, o comportamento é suavizado pois os efeitos de cauda são menores.

Também medimos a função de retorno para a rede: $\rho_0 = |x_1 - x_{-1}|$ (que também apresenta caráter oscilatório no tempo para esta condição inicial). De forma muito semelhante à probabilidade de retorno, esta função de retorno pra rede também é evanescente no tempo quando $\chi < \chi_c$ e oscila em torno de um valor significativamente diferente de zero acima de χ_c , como podemos ver na Figura 35b. No gráfico interno vemos que a descontinuidade apresentada na de *polarons* viajantes para estacionários também aumenta com o valor de τ , assim como apresentado na probabilidade de retorno, mas o valor de ρ_0 cresce com χ por uma lei de potência do tipo $(\chi - \chi_c)^{0.5}$ para $\chi > \chi_c$. Esta função também apresenta os efeitos de cauda longa para valores de τ pequenos e podemos ver uma leve oscilação na curva referente a $\tau = 10^{0.5}$. O conjunto das duas funções de retorno (R_0 e ρ_0) nos indicam que a solução são estados ligados pois os comportamentos apresentados em uma grandeza surgem na outra de forma similar.

Figura 36 - (a) Densidade de probabilidade do mágnon e (b) distribuição das deformações simétricas na rede nos tempos $t = 1000t_m$, $1500t_m$ e $2000t_m$ para $\tau = 10^{0.5}$ e $\chi = 1.0$. As duas funções apresentam estruturas não dispersivas caminhandes do tipo solitônicas na mesma posição. Na figura (b) vemos que nestes instantes de tempo a cauda longa praticamente não influencia mais o *polaron* viajante. As estruturas não dispersivas em $|\psi_n|^2$ e $|x_{n+1} - x_{n-1}|$ normalizadas ao pico para $\chi = 1.0$ (c), *polarons* viajantes, e $\chi = 1.5$ (d), *polarons* estacionários, é proporcional à $\text{sech}^2[\lambda(n \pm v_{tra}t/t_m)]$.

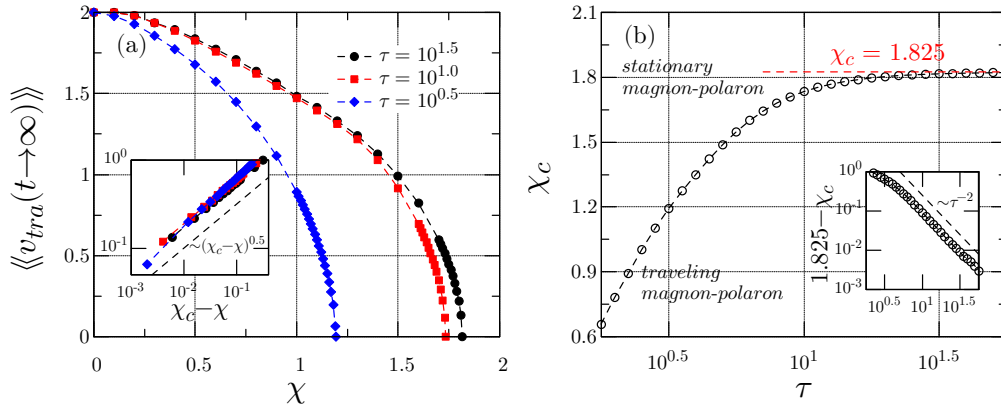


Fonte: Autor, 2020.

A partir do perfil do pacote de onda magnônico ($|\psi_n|^2$), podemos mostrar que os

polarons também são *solitons* [108] e também podemos mostrar que nas deformações na rede ($x_{n+1} - x_{n-1}$) também temos a formação da mesma estrutura solitônica. Esta é do tipo *breathing bright soliton*, onde há um pico maior que sua vizinhança e oscila no tempo, mas mantém a sua forma na média. Vemos nas Figuras 36a e 36b que as estruturas são formadas na mesma posição, mostrando que o *polaron* é um estado ligado do mágnon com a rede que apresenta características dos dois. A Figura 36b mostra também a presença da cauda longa da frente de onda gerada na rede, esta cauda pode modificar os efeitos de formação dos *polarons* em seus tempos iniciais. Os efeitos de cauda longa estão mais evidentes em valores de χ pequenos, em que os *polarons* são formados mais próximos da frente de onda da rede e em valores de χ grandes, em que as perturbações na rede são maiores na formação do estacionário. Vemos nas Figuras 36c e 36d que as estruturas solitônicas referentes aos *polarons* viajantes e os estacionários formadas no mágnon e na rede têm mesma largura, pois representam uma única quasipartícula. As duas funções normalizadas ao pico são proporcionais à $\text{sech}^2[\lambda(n + v_{tra}t/t_m)]$.

Figura 37 - (a) Média temporal da velocidade dos *polarons* viajantes para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Próximo à transição o comportamento da velocidade é dada por uma lei de potência do tipo $(\chi_c - \chi)^{0.5}$. (b) Espaço de fases dos valores de χ_c em função de τ . Acima desta curva há formação de *polarons* estacionários no centro da cadeia e abaixo há *polarons* viajantes. Para valores de $\tau > 10$ a dependência de χ_c pode ser representada por uma lei de potência do tipo τ^{-2} que tende a $\chi_c = 1.825$ para $\tau \rightarrow \infty$.

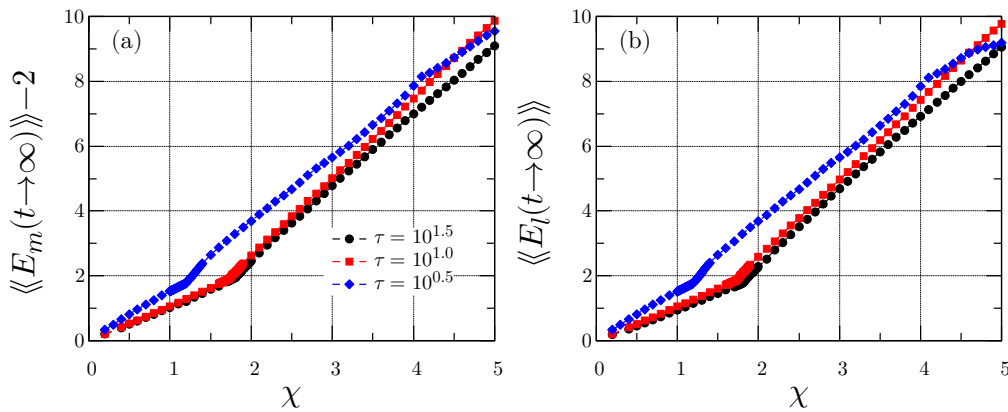


Fonte: Autor, 2020.

Calculamos a velocidade dos *polarons* viajantes acompanhando a posição do pico tanto à direita, tanto à esquerda do centro da cadeia, que coincidiam. Assim como apresentado na Figura 33, a velocidade diminui com o aumento de χ até o valor de χ_c , em que esta é nula e passamos para o regime dos estacionários. Medimos a média temporal da velocidade dos *polarons* viajantes para um tempo muito longo $\langle\langle v_{tra}(t \rightarrow \infty) \rangle\rangle$ e apresentamos na Figura 37a. A partir deste comportamento, fizemos uma análise de escala que apresentamos no gráfico interno. Nesta análise, vemos que, perto da transição, a velocidade é dado por uma lei de potência do tipo $(\chi_c - \chi)^{0.5}$ e, na mesma análise, encontramos os valores críticos da transição, que aumenta com o valor de τ . A Figura

37b mostra um espaço de fase com os valores de χ_c em função de τ a partir da análise da velocidade dos *polarons* viajantes. Para valores acima desta curva ($\chi > \chi_c$), temos a formação das estruturas estacionárias no centro da cadeia e abaixo desta curva, as viajantes. Quando há menos influência dos efeitos de cauda na transição, isto é, para valores grandes de τ , como mostramos no gráfico interno, a dependência do χ_c pode ser representada por uma lei de potência do tipo τ^{-2} que tende a $\chi_c = 1.825$ quando $\tau \rightarrow \infty$. Quando $\tau \rightarrow \infty$, a resposta da rede é praticamente instantânea e mesmo num intervalo de tempo pequeno, podemos considerar a aceleração da rede nula na média e, por isto, recuperamos os resultados anteriores apresentados em [108].

Figura 38 - Média temporal das variações das energias adimensionais dos mágnons (a) e da rede (b) para alguns valores de τ para um tempo muito longo. Elas apresentam uma mudança de comportamento na transição, mas aumentam com o valor de χ . O comportamento de ambas as funções após a transição é mais suave com valores maiores de τ , em que há menos efeitos de cauda longa das frentes de ondas geradas na rede. Para valores pequenos de χ , as energias têm uma dependência linear.



Fonte: Autor, 2020.

Por último medimos as energias do sistema. A energia adimensional do mágnon e da rede são definidas pelas equações (89) e (90), respectivamente. Sabemos que a presença do acoplamento entre o mágnon e a rede gera outros níveis de energia no espectro de energia do mágnon e da rede que representa os estados ligados. Apresentamos na Figura 38 a variação da energia do mágnon e da rede de forma que estas grandezas também apresentam uma mudança de comportamento na transição. Aqui fizemos $E_m = 2$ a energia do mágnon sem a influência da rede, isto é, quando $\chi = 0$. Eles apresentam comportamentos semelhantes e tendem a coincidir quando τ cresce, quando os estados ligados sofrem pouca superposição da cauda da frente de onda gerada na rede, o qual causa o caráter oscilatório que é atenuado com o aumento de τ . Quando $\chi < \chi_c$, as energias dos dois casos podem ser aproximadas por $E = C\chi$. Assumindo que a energia do mágnon (ou da rede), E , é dada pela parte livre $E^{(f)}$ mais os estados ligados, os dois

polarons viajantes, considerados partículas massivas $2 \cdot mv_{tra}^2/2$, podemos fazer

$$\begin{aligned}
 E &= C\chi = E^{(f)} + mv_{tra}^2 \\
 v_{tra}^2 &= \frac{C}{m} \left(\chi - \frac{E^{(f)}}{C} \right) \\
 v_{tra}^2 &= \frac{C}{m} (\chi - \chi_c) \\
 v_{tra} &\sim (\chi - \chi_c)^{0.5}.
 \end{aligned} \tag{93}$$

Desta forma, vemos uma justificativa para o comportamento em lei de potência para a velocidade dos modos caminhantes apresentados na Figura 37a.

5 CONCLUSÃO

O acoplamento de mágnons e fônons presentes em sistemas magnetolásticos pode ser representado pela dependência dos termos de acoplamento magnético, as constantes de troca, com a dinâmica da rede. Propomos, neste trabalho, um modelo que descreva a dinâmica de mágnons ferromagnéticos em redes harmônicas acopladas. A dependência linear da componente anisotrópica do termo de troca nos permite recuperar resultados experimentais conhecidos, como a formação de *polarons* magnéticos. Nosso modelo proposto foi situado num ambiente de altas temperatura, mas ainda abaixo da temperatura de Curie, de tal forma que a aproximação para dinâmica clássica para a rede como osciladores acoplados represente bem o sistema. Devido à estar abaixo da temperatura de Curie, há uma magnetização natural e com a presença de um campo magnético externo aplicado na direção anisotrópica, podemos tratar o sistema magnético como no estado fundamental. Desta maneira, nos atemos a descrever a dinâmica de mágnons ferromagnéticos não interagentes entre si acoplados à cadeias harmônicas a partir da condição inicial em que a rede está inicialmente estática e há uma excitação local.

Em nossos primeiros estudos, abordamos um sistema na aproximação adiabática, em que desprezamos o termo de aceleração tendo em vista que a dinâmica do mágnon é muito mais rápido que a dinâmica da rede. Nesta aproximação, encontramos uma equação não linear que descreve a dinâmica do mágnon sob a influência dos modos vibracionais. Neste contexto, perturbações na rede que não são causadas por estados ligados são desprezados, então não é considerado efeitos de cauda e frente de onda geradas na rede.

A partir da equação não linear que representa a dinâmica do mágnon sob a influência dos modos vibracionais, demonstramos e caracterizamos a transição *self-trapping* a partir do parâmetro adimensional χ que descreve a força de acoplamento mágnon-rede e a força da não linearidade presente (estes estudos foram publicados na referência [108] e está anexado no Anexo). Encontramos que o parâmetro crítico necessário para a transição para *self-trapping* é $\chi_c = 1.825$. No regime de baixa não linearidade $\chi < \chi_c$ há formação de *solitons* caminhantes que diminuem a velocidade com o aumento de χ e no regime de alta não linearidade $\chi > \chi_c$ há formação de *self-trapped solitons* no centro da cadeia com velocidade nula. Além disto, mostramos que a solução para qualquer valor não nulo de χ que representa os modos autoarmadilhados é *breathing bright soliton*, em que há picos de maior intensidade que sua vizinhança e apresenta um caráter oscilatório, mas mantém sua forma na média. O perfil da densidade de probabilidade, então, das estruturas armadilhadas, são proporcionais à $\text{sech}^2[\lambda|\psi_{n_{max}}|^2(n \pm v_{max}t)]$.

Nos estudos seguintes, abordamos o mesmo sistema na aproximação adiabática mas com flutuações aleatórias nos valores das constantes de troca dentro de uma largura de

desordem W . A presença da não linearidade promove o fenômeno de enfraquecimento da localização mediante à desordem. Vemos que no regime de fraca não linearidade ($\chi < 1.0$) há o enfraquecimento da localização com uma diminuição do pico e aumento do comprimento de localização e da incerteza pois a não linearidade serve de parâmetro perturbativo para a localização mediante à desordem. No regime de forte não linearidade ($\chi > 2.0$), em que a localização é predominantemente dada pelo fenômeno de *self-trapping*, a desordem atenua essa localização e serve de parâmetro perturbativo. No regime intermediário, a transição é suave e para $\chi \approx 1.75$, o sistema parece ser insensível à desordem. Constatamos que a solução desse sistema é dado por uma porção localizada em torno do centro da cadeia e uma cauda que espalha de forma difusiva evidenciada pelo comportamento da evolução temporal do desvio quadrático médio. Não foi encontrado estruturas solitônicas estáveis e nem comportamento subdifusivo na função de participação.

Nos últimos estudos vemos que quando a rede se move mais rápido que o mágnon, há formação de *polaron* viajantes para pequenos valores do acoplamento mágnon-rede χ e há formação de *polarons* estacionários na posição inicial para valores grandes de χ . Mostramos e descrevemos essa transição para alguns valores de $\tau > 1$ que representa o caso em que a rede é mais rápida que o mágnon. O parâmetro τ é dado pela razão entre os tempos característicos do mágnon e a rede. Descrevemos a formação do *polaron* como um estado ligado, apresentando mesma estrutura solitônica no mágnon e na rede. Para valores pequenos de τ ($\tau < 10$), podemos ver que surge efeitos de interferência da cauda criada pela frente de onda gerada na rede. Esse efeito de cauda longa modifica os efeitos de autoaprisionamento e formação dos estados ligados. A transição que ocorre no mágnon, ocorre também na rede de forma semelhante, mas com algumas diferenças que foram destacadas. Encontramos os valores críticos χ_c para alguns valores de τ e mostramos a dependência do parâmetro crítico χ_c com τ , de forma que para valores grandes de τ , quando não há influência do efeito de cauda longa na transição, tem uma dependência por lei de potência do tipo τ^{-2} e quando $\tau \rightarrow \infty$, o parâmetro crítico tende à $\chi_c = 1.825$.

Diante de todos os estudos apresentados, vemos que o modelo proposto foi capaz de apresentar modos não dispersivos caminantes e estacionários, que se tornou eficaz em descrever a formação de já detectados *polarons* magnônicos. A solução e caracterização de modos não dispersivos caminantes é de interesse no transporte de informação em sistemas magnéticos pois a informação está armazenada no perfil do pacote. Já a formação de modos não dispersivos estacionários é de interesse em construção de dispositivos de armazenamento de informação. O modelo proposto mostra que materiais magnéticos com fraco acoplamento mágnon-rede podem ser utilizados para construção de dispositivos voltados à transporte de informação. Já os materiais com forte acoplamento mágnon-rede ou com presença de flutuações aleatórias nos *exchanges*, podem ser utilizados para construção de dispositivos magnéticos de armazenamento de informação.

Podemos destacar que, para futuros estudos utilizando o modelo proposto, não é necessário utilizar τ enormes (da ordem de τ^2 ou superior), mesmo que estes represente um material em específico, pois o comportamento é similar para valores menores e pode, a depender da abordagem, reduzir o custo computacional para simulações de evoluções temporais. Mostramos que o valor crítico de transição decai com τ^{-2} para $\tau > 10$ e o comportamento é praticamente o mesmo tanto na transição, tanto em influência de efeitos de cauda longa.

REFERÊNCIAS

- [1] A. informática, “Hd de estado sólido ssd de 240gb corsair sata-iii.” <https://www.atera.com.br/produto/f240gbgt-bk/HD+de+estado+s%C3%B3lido+SSD+de+240GB+Corsair+SATA-III#:~:text=%2D%20HD%20estado%20s%C3%B3lido%20SSD%2C%20Corsair,e%20a%20resposta%20do%20sistema.> Acessado em 12 de Outubro de 2020.
- [2] Matron, “Gravador dvd e cd 22x interno sata has122-14 eu - preto - liteon - 0259.” https://www.matron.com.br/gravador_dvd_e_cd_22x_interno_sata_has120-04_xu_-_preto_-_li/p. Acessado em 12 de Outubro de 2020.
- [3] Inteliportal, “Comparação de velocidade de transferência de alguns dispositivos na área informática.” <http://www.inteliportal.com.br/VelocidadeTransferencia.aspx>. Acessado em 12 de Outubro de 2020.
- [4] P. Alves, “Novo hd da toshiba de 14 tb bate recorde de capacidade de armazenamento.” <https://www.techtudo.com.br/noticias/2017/12/novo-hd-da-toshiba-de-14-tb-bate-recorde-de-capacidade-de-armazenamento.ghhtml>, 2017. Acessado em 12 de Outubro de 2020.
- [5] A. Scola, “Hd ou ssd? confira as diferenças e vantagens de cada tecnologia.” <https://olhardigital.com.br/2018/05/22/dicas-e-tutoriais/hd-x-ssd-as-diferencas-e-vantagens-de-cada-tecnologia/>. Acessado em 12 de Outubro de 2020.
- [6] V. Demidov, S. Urazhdin, G. de Loubens, O. Klein, V. Cros, A. Anane, and S. Demokritov, “Magnetization oscillations and waves driven by pure spin currents,” *Physics Reports*, vol. 673, pp. 1–31, 2017.
- [7] H. Fulara, M. Zahedinejad, R. Khymyn, M. Dvornik, S. Fukami, S. Kanai, H. Ohno, and J. Åkerman, “Giant voltage-controlled modulation of spin hall nano-oscillator damping,” *Nature Communications*, vol. 11, no. 4006, p. 7, 2020.
- [8] J. Lan, W. Yu, R. Wu, and J. Xiao, “Spin-wave diode,” *Physical Review X*, vol. 5, no. 4, p. 041049(7), 2015.
- [9] M. Grassi, M. Geilen, D. Louis, M. Mohseni, T. Brächer, M. Hehn, D. Stoeffler, M. Bailleul, P. Pirro, and Y. Henry, “Slow-wave-based nanomagnonic diode,” *Physical Review Applied*, vol. 14, no. 024047, p. 14, 2020.
- [10] A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, “Magnon transistor for all-magnon data processing,” *Nature Communications*, vol. 5, no. 4700, p. 8, 2014.

- [11] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, “Magnon spintronics,” *Nature Physics*, vol. 11, pp. 453–461, 2015.
- [12] A. Bravais, “Mémoire sur les systèmes formés par les points distribués régulièrement sur un plan ou dans l’espace,” *J. Ecole Polytech*, vol. 19, p. 1–128, 1850.
- [13] *Etudes cristallographiques Mémoire sur les Auguste Bravais*. Gauthier-Villars, 1866.
- [14] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. 1976.
- [15] F. Bloch, “Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 52, no. 7-8, pp. 555–600, 1929.
- [16] E. Schrödinger, “Quantisierung als eigenwertproblem,” *Annalen der Physik*, vol. 394, no. 4, pp. 361–376, 1926.
- [17] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*. Addison-Wesley Publishing Company, rev. ed., 1994.
- [18] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical recipes in Fortran 90: the art of parallel scientific computing*, vol. 2. Press Syndicate of the University of Cambridge, 2 ed., 1997.
- [19] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical Review*, vol. 109, no. 5, pp. 1492–1505, 1958.
- [20] Y. Kati, X. Yu, and S. Flach, “Density resolved wave packet spreading in disordered gross-pitaevskii lattices,” *SciPost Physics Core*, vol. 3, no. 006, p. 13, 2020.
- [21] G. Czycholl and B. Kramer, “Numerical investigation of the conductivity and electron localization of a one dimensional disordered system,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 39, no. 3, pp. 193–206, 1980.
- [22] Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D. N. Christodoulides, and Y. Silberberg, “Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 1, p. 013906(4), 2008.
- [23] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, and M. Segev, “Transport and anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices,” *Nature*, vol. 446, pp. 52–55, 2007.
- [24] S. Skipetrov and R. Maynard, “Instabilities of waves in nonlinear disordered media,” *Physical Review Letters*, vol. 85, no. 4, pp. 736–739, 2000.

- [25] P. Dean, “Vibrations of glass-like disordered chains,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 84, pp. 727–744, 1964.
- [26] R. J. Bell and P. Dean, “Atomic vibrations in vitreous silica,” *Discussions of the Faraday Society*, vol. 50, pp. 55–61, 1970.
- [27] A. Dhar and J. L. Lebowitz, “Effect of phonon-phonon interactions on localization,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 13, p. 134301(4), 2008.
- [28] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, pp. 198–201, 1995.
- [29] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, “Theory of bose-einstein condensation in trapped gases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, no. 3, pp. 463–512, 1999.
- [30] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, “Bose-einstein condensate in a random potential,” *Physical Review Letters*, vol. 95, no. 7, p. 070401(4), 2005.
- [31] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, “Anderson localization of a non-interacting bose-einstein condensate,” *Nature*, vol. 453, pp. 895–899, 2008.
- [32] S. M. Bose and E.-N. Foo, “Density of spin wave states in disordered heisenberg ferromagnetic chains,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 5, pp. 1082–1088, 1972.
- [33] M. Cieplak and G. Ismail, “Localised spin waves in disordered ferromagnetic chains,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 20, pp. 1309–1314, 1987.
- [34] N. Laflorencie, S. Wessel, A. Laeuchli, and H. Rieger, “Random-exchange quantum heisenberg antiferromagnets on the square lattice,” *Physical Review B*, vol. 73, no. 6, p. 060403(4), 2006.
- [35] P. Bucek, S. Thomas, A. Marmodoro, N. Bucek, X. Zubizarreta, M. Hoffmann, T. Balashov, W. Wulfskel, K. Zakeri, and A. Ernst, “Spin waves in disordered materials,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 30, no. 42, p. 423001, 2018.
- [36] J. T. Edwards and D. J. Thouless, “Numerical studies of localization in disordered systems,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 5, no. 8, pp. 807–820, 1972.

- [37] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, “Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 10, pp. 673–676, 1979.
- [38] B. Kramer, Y. Ono, and T. Ohtsuki, “Inverse participation number and fractal dimensionality of electronic states in a two dimensional system in strong perpendicular magnetic field,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 58, no. 5, pp. 1705–1716, 1989.
- [39] D. H. Dunlap, H.-L. Wu, and P. W. Phillips, “Absence of localization in a random-dimer model,” *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 1, pp. 88–91, 1990.
- [40] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, “Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder,” *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 17, pp. 3735–3738, 1998.
- [41] T. Holstein, “Studies of polaron motion: Part i. the molecular-crystal model,” *Annals of Physics*, vol. 8, no. 3, pp. 325–342, 1959.
- [42] T. Holstein, “Studies of polaron motion: Part ii. the “small” polaron,” *Annals of Physics*, vol. 8, no. 3, pp. 343–389, 1959.
- [43] P. K. Datta and K. Kundu, “Time evolution of models described by a one-dimensional discrete nonlinear schrödinger equation,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 53, no. 22, pp. 14929–14936, 1996.
- [44] W.-P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “Solitons in polyacetylene,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 25, pp. 1698–1701, 1979.
- [45] W.-P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “Soliton excitations in polyacetylene,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 22, no. 4, pp. 2099–2111, 1980.
- [46] W. Królikowski, N. Akhmediev, and B. Luther-Davies, “Multimode structure of bright and dark vector solitons in photorefractive media,” *Optics Letters*, vol. 21, no. 11, pp. 782–784, 1996.
- [47] Z.-Y. Sun, Y.-T. Gao, X. Y. adn Wen-Jun Liu, and Y. Liu, “Bound vector solitons and soliton complexes for the coupled nonlinear schrödinger equations,” *Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 80, no. 6, p. 066608(11), 2009.
- [48] A. S. Davydov and N. I. Kislukha, “Solitary excitons in one-dimensional molecular chains,” *Basic Solid State Physics*, vol. 59, no. 2, pp. 465–470, 1973.

- [49] A. S. Davydov and N. I. Kislukha, “Solitons in one-dimensional molecular chains,” *Basic Solid State Physics*, vol. 75, no. 2, pp. 735–742, 1976.
- [50] A. Scott, “Davydov’s soliton,” *Physics Reports*, vol. 217, no. 1, pp. 1 – 67, 1992.
- [51] S. Pnevmatikos, O. Yanovitskii, T. Fraggis, and E. N. Economou, “Polaron formation in one-dimensional quasiperiodic systems,” *Physical Review Letters*, vol. 68, no. 15, pp. 2370–2373, 1992.
- [52] E. N. Economou, O. Yanovitskii, and T. Fraggis, “Polarons in a one-dimensional quasiperiodic model,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 47, no. 2, pp. 740–752, 1993.
- [53] G. Kopidakis, C. M. Soukoulis, and E. N. Economou, “Electron-phonon interactions and recurrence phenomena in one-dimensional systems,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 49, no. 10, pp. 7036–7039, 1994.
- [54] G. Kalosakas, G. P. Tsironis, and E. N. Economou, “Self-trapping properties and recurrence phenomena in a modified discrete non-linear schrodinger equation,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 6, no. 39, pp. 7847–7856, 1994.
- [55] A. S. Pikovsky and D. L. Shepelyansky, “Destruction of anderson localization by a weak nonlinearity,” *Physical Review Letter*, vol. 100, no. 9, p. 094101(4), 2008.
- [56] M. I. Molina, N. Lazarides, and G. P. Tsironis, “Optical surface modes in the presence of nonlinearity and disorder,” *Physical Review E*, vol. 85, no. 1, p. 017601(4), 2012.
- [57] I. García-Mata and D. L. Shepelyansky, “Delocalization induced by nonlinearity in systems with disorder,” *Physical Review E*, vol. 79, no. 2, p. 026205(8), 2009.
- [58] J. dos Santos, B. P. Nguyen, and F. de Moura, “Electronic transport in disordered chains with saturable nonlinearity,” *Physica A*, vol. 435, pp. 15–21, 2015.
- [59] M. Sales, W. Dias, A. R. Neto, M. Lyra, and F. de Moura, “Sub-diffusive spreading and anomalous localization in a 2d anderson model with off-diagonal nonlinearity,” *Solid State Communications*, vol. 270, pp. 6–11, 2017.
- [60] F. Bloch, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 61, no. 3-4, pp. 206–219, 1950.
- [61] W. Gerlach and O. Stern, “Der experimentelle nachweis der richtungsquantelung im magnetfeld,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 9, no. 1, pp. 349–352, 1922.

- [62] W. Gerlach and O. Stern, “Das magnetische moment des silberatoms,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 9, no. 1, pp. 353–355, 1922.
- [63] W. Gerlach and O. Stern, “Über die richtungsquantelung im magnetfeld,” *Annalen der Physik*, vol. 379, no. 16, pp. 673–699, 1924.
- [64] N. Bohr, “I. on the constitution of atoms and molecules,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 26, no. 151, pp. 1–25, 1913.
- [65] N. Bohr, “Lxxiii. on the constitution of atoms and molecules,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 26, no. 155, pp. 857–875, 1913.
- [66] N. Bohr, “Xxxvii. on the constitution of atoms and molecules,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 26, no. 153, pp. 476–502, 1913.
- [67] W. Heisenberg, “Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 38, no. 6-7, pp. 411–426, 1926.
- [68] W. Heisenberg, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 49, no. 9-10, pp. 619–636, 1928.
- [69] T. Holstein and H. Primakoff, “Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet,” *Physical Review*, vol. 58, pp. 1098–1113, 1940.
- [70] F. J. Dyson, “General theory of spin-wave interactions,” *Physical Review*, vol. 102, no. 5, pp. 1217–1230, 1956.
- [71] B. N. Brockhouse, “Scattering of neutrons by spin waves in magnetite,” *Physical Review*, vol. 106, no. 5, pp. 859–864, 1957.
- [72] S. Evangelou and D. Katsanos, “Super-diffusion in random chains with correlated disorder,” *Physics Letters A*, vol. 164, pp. 456–464, 1992.
- [73] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, and M. L. Lyra, “Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange,” *Physical Review B*, vol. 66, p. 014418, 2002.
- [74] A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, “Magnetic solitons,” *Physics Reports*, vol. 194, no. 3–4, pp. 117–238, 1990.
- [75] C. Wang, Y. Cao, X. R. Wang, and P. Yan, “Interplay of wave localization and turbulence in spin seebeck effect,” *Physical Review B*, vol. 98, p. 144417, 2018.

- [76] P. Reutler, F. Moussa, M. Hennion, F. Wang, and A. Revcolevschi, “Spin wave anomalies and phonons at low temperature in $La_{0.875}Sr_{0.125}MnO_3$,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 242-245, pp. 689–691, 2002.
- [77] F. Körmann, B. Grabowski, B. Dutta, T. Hickel, L. Mauger, B. Fultz, , and J. Neugebauer, “Temperature dependent magnon-phonon coupling in bcc fe from theory and experiment,” *Physical Review Letters*, vol. 113, no. 16, p. 165503 (5), 2014.
- [78] J. Holanda, D. S. Maior, A. Azevedo, and S. M. Rezende, “Detecting the phonon spin in magnon–phonon conversion experiments,” *Nature Physics*, vol. 14, pp. 500–506, 2018.
- [79] F. Godejohann, A. V. Scherbakov, S. M. Kukhtaruk, A. N. Poddubny, D. D. Yaremkevich, M. Wang, A. Nadzeyka, D. R. Yakovlev, A. W. Rushforth, A. V. Akimov, and M. Bayer, “Magnon polaron formed by selectively coupled coherent magnon and phonon modes of a surface patterned ferromagnet,” *Physical Review B*, vol. 102, no. 14, p. 144438, 2020.
- [80] W. Senghaphan and G. O. Zimmerman, “Direct spin-phonon interaction in solid he^3 ,” *Physical Review Letters*, vol. 20, no. 8, pp. 371–374, 1968.
- [81] S. J. Allen Jr. and H. J. Guggenheim, “Magnetic excitation in antiferromagnetic $cofe_2$. i. spin-optical-phonon interaction,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 4, no. 3, pp. 937–950, 1971.
- [82] P. Dai, H. Y. Hwang, J. Zhang, J. A. Fernandez-Baca, S.-W. Cheong, C. Kloc, Y. Tomioka, and Y. Tokura, “Magnon damping by magnon-phonon coupling in manganese perovskites,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 61, no. 14, pp. 9553–9557, 2000.
- [83] T. Fukuda, A. Q. R. Baron, H. Nakamura, S. Shamoto, M. Ishikado, M. Machida, H. Uchiyama, A. Iyo, H. Kito, J. Mizuki, M. Arai, and H. Eisaki, “Soft and isotropic phonons in $prfeo_{1-y}$,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 84, no. 6, p. 064504(13), 2011.
- [84] J. Hong, A. Stroppa, J. Íñiguez, S. Picozzi, and D. Vanderbilt, “Spin-phonon coupling effects in transition-metal perovskites: A dft + u and hybrid-functional study,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 85, no. 5, p. 054417(12), 2012.
- [85] H. Liu, C. Zhang, H. Malissa, M. Groesbeck, M. Kavand, R. McLaughlin, S. Jamali, J. Hao, D. Sun, R. A. Davidson, L. Wojcik, J. S. Miller, C. Boehme, and Z. V. Vardeny, “Organic-based magnon spintronics,” *Nature Materials*, vol. 17, pp. 308–312, 2018.

- [86] D. A. Bozhko, V. I. Vasyuchka, A. V. Chumak, and A. A. Serga, “Magnon-phonon interactions in magnon spintronics (review article),” *Low Temperature Physics*, vol. 46, pp. 383–399, 2020.
- [87] P. A. Deymier, J. O. Vasseur, K. Runge, A. Manchon, and O. Bou-Matar, “Phonon-magnon resonant processes with relevance to acoustic spin pumping,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 90, no. 22, p. 224421(13), 2014.
- [88] M. Mochizuki, N. Furukawa, , and N. Nagaosa, “Theory of spin-phonon coupling in multiferroic manganese perovskites $RMnO_3$,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 84, no. 14, p. 144409(14), 2011.
- [89] M. E. Gouvêa and A. S. T. Pires, “Effect of spin-phonon coupling on the haldane gap in antiferromagnetic heisenberg chains,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 75, no. 5, p. 052401(4), 2007.
- [90] S. C. Guerreiro and S. M. Rezende, “Magnon-phonon interconversion in a dynamically reconfigurable magnetic material,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 92, no. 21, p. 214437(12), 2015.
- [91] M. Malard and A. S. T. Pires, “Influence of magnon-phonon coupling on the phonon dynamics of one-dimensional antiferromagnets,” *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 76, no. 10, p. 104407(9), 2007.
- [92] Y. Huang, L. Pi, and Y. Zhang, “Effects of spin–phonon interaction on transport, magnetic properties and the oxygen isotope effect in $r_{1-x}a_xmno_3$,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 323, pp. 2774–2769, 2011.
- [93] Y. H. Ren, X. H. Zhang, G. Lüpke, M. Schneider, M. Onellion, I. E. Perakis, Y. F. Hu, and Q. Li, “Observation of strongly damped ghz phonon-polariton oscillations in $la_{0.67}ca_{0.33}mno_3$,” *Physical Review B*, vol. 64, no. 14, p. 144401, 2001.
- [94] O. Koblinger, J. Mebert, E. Dittrich, S. Döttinger, W. Eisenmenger, P. V. Santos, and L. Ley, “Phonon stop bands in amorphous superlattices,” *Physical Review B*, vol. 35, no. 17, pp. 9372–9375, 1987.
- [95] E. Pontecorvo, M. Ortolani, D. Polli, M. Ferretti, G. Ruocco, G. Cerullo, and T. Scopigno, “Visualizing coherent phonon propagation in the 100 ghz range: A broadband picosecond acoustics approach,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, p. 011901, 2011.
- [96] J. H. Kawamura, C.-Y. E. Tong, R. Blundell, D. C. Papa, T. R. Hunter, G. Gol’tsman, S. Cherednichenko, B. Voronov, and E. Gershenzon, “An 800 ghz

- nbm phonon-cooled hot-electron bolometer mixer receiver,” *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, vol. 9, no. 2, pp. 3753–3756, 1999.
- [97] T. Dekorsy, H. Auera, H. J. Bakker, H. G. Roskos, and H. Kurz, “Thz electromagnetic emission by coherent infrared-active phonons,” *Physical Review B*, vol. 53, no. 7, pp. 4005–4014, 1996.
- [98] M. Tani, R. Fukasawa, H. Abe, S. Matsuura, K. Sakai, and S. Nakashima, “Terahertz radiation from coherent phonons excited in semiconductors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 83, no. 5, pp. 2473–2477, 1998.
- [99] B. S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar, Q. Hu, and J. L. Reno, “3.4-thz quantum cascade laser based on longitudinal-optical-phonon scattering for depopulation,” *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 7, pp. 1015–1017, 2003.
- [100] Y. Tabuchi, S. Ishino, T. Ishikawa, R. Yamazaki, K. Usami, and Y. Nakamura, “Hybridizing ferromagnetic magnons and microwave photons in the quantum limit,” *Physical Review Letters*, vol. 113, no. 8, p. 083603, 2014.
- [101] T. Devolder, J. Hayakawa, K. Ito, H. Takahashi, S. Ikeda, P. Crozat, N. Zerounian, J.-V. Kim, C. Chappert, and H. Ohno, “Single-shot time-resolved measurements of nanosecond-scale spin-transfer induced switching: Stochastic versus deterministic aspects,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 5, p. 057206, 2008.
- [102] R. Urban, B. Heinrich, G. Woltersdorf, K. Ajdari, K. Myrtle, J. F. Cochran, and E. Rozenberg, “Nanosecond magnetic relaxation processes in ultrathin metallic films prepared by mbe,” *Physical Review B*, vol. 65, no. 2, p. 020402, 2001.
- [103] W. Jin, H. H. Kim, Z. Ye, S. Li, P. Rezaie, F. Diaz, S. Siddiq, E. Wauer, B. Yang, C. Li, S. Tian, K. Sun, H. Lei, A. W. Tsen, L. Zhao, and R. He, “Raman fingerprint of two terahertz spin wave branches in a two-dimensional honeycomb ising ferromagnet,” *Nature Communications*, vol. 9, no. 5122, p. 7, 2018.
- [104] H. Qin, K. Zakeri, A. Ernst, L. M. Sandratskii, P. Buczek, A. Marmodoro, T.-H. Chuang, Y. Zhang, and J. Kirschner, “Long-living terahertz magnons in ultrathin metallic ferromagnets,” *Nature Communications*, vol. 6, no. 6126, p. 8, 2015.
- [105] H. J. Qin, S. Tsurkan, A. Ernst, and K. Zakeri, “Experimental realization of atomic-scale magnonic crystals,” *Physical Review Letter*, vol. 123, no. 25, p. 257202(6), 2019.
- [106] M. L. M. Laliu, R. Lavrijsen, R. A. Duine, and B. Koopmans, “Investigating optically excited terahertz standing spin waves using noncollinear magnetic bilayers,” *Physical Review B*, vol. 99, no. 18, p. 184439(6), 2019.

- [107] C. E. Shannon, “A mathematical theory of communication,” *The Bell System Technical Journal*, vol. 27, no. 3, pp. 379–423, 1948.
- [108] D. Morais, M. Lyra, F. de Moura, and W. Dias, “The self-trapping transition of one-magnon excitations coupled to acoustic phonons,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 506, p. 166798, 2020.
- [109] H. Nazareno and P. de Brito, “Bloch oscillations as generators of polarons in a 1d crystal,” *Physica B*, vol. 494, pp. 1–6, 2016.
- [110] W. R. Hamilton, “On the application to dynamics of a general mathematical method previously applied to optics,” *British Association Report*, pp. 513–518, 1834.

APÊNDICE A - DNLSE no modelo de Holstein

Neste apêndice utilizaremos o hamiltoniano do modelo de Holstein na sessão 2.3.1 para encontrarmos uma equação não linear que descreva a dinâmica do elétron na cadeia molecular sob influência dos modos vibracionais internos das moléculas.

O hamiltoniano que usaremos é o das equações (24), (25) e (26):

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} \hat{u}_n^2 + \varepsilon |n\rangle \langle n| - \gamma (|n+1\rangle \langle n| + |n-1\rangle \langle n|) + A \hat{u}_n |n\rangle \langle n| \right]. \quad (94)$$

Aqui \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M \dot{\hat{u}}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, da molécula n de massa M e constante efetiva κ . No modelo *tight-binding* para uma cadeia cristalina, $|m\rangle \langle n|$ é o operador projeção do elétron da molécula n para a m . ε é o potencial *onsite* de custo energético do elétron para permanecer na molécula (que assumiremos o referencial de energia $\varepsilon = 0$ sem perdas de generalidade) e γ o termo de *hopping* referente ao custo energético do elétron saltar da molécula n para seus primeiros vizinhos. A é chamado de constante de acoplamento energético elétron-rede e representa a interação entre a dinâmica do elétron e a da rede.

Utilizamos a aproximação adiabática em que o tempo característico do elétron $t_{el} = \hbar/\gamma$ é muito menor que o tempo característico de oscilação da rede $t_{latt} = \sqrt{M/\kappa}$. Nesta aproximação, a dinâmica do elétron ocorre mais rápido do que o oscilador completa uma oscilação, assim, a rede está praticamente parada e podemos tomar que $\dot{\hat{u}}_n \approx 0$ e consequentemente $\hat{p}_n \approx 0$. Desta forma, podemos desprezar o termo cinético da rede.

Calculamos o valor esperado da energia $\langle \mathcal{H} \rangle = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$, onde $|\Psi\rangle = \sum_p \psi_p |p\rangle$ e consequentemente $\langle \Psi | = \sum_q \langle q | \psi_q^*$:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{n,p,q} \left[\frac{\kappa}{2} u_n^2 \psi_q^* \psi_p \delta_{p,q} - \gamma \psi_q^* \psi_p (\delta_{p,n} \delta_{q,n+1} + \delta_{p,n} \delta_{q,n-1}) + A u_n \psi_q^* \psi_p \delta_{p,n} \delta_{q,n} \right], \quad (95)$$

aqui usamos $\langle n | m \rangle = \delta_{n,m}$ e $\hat{u}_n |\Psi\rangle = u_n |\Psi\rangle$.

Assumindo que $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$, podemos fazer

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n \left[\frac{\kappa}{2} u_n^2 - \gamma (\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n-1}^* \psi_n) + A u_n |\psi_n|^2 \right]. \quad (96)$$

Tendo em vista o método variacional, minimizamos $\langle \mathcal{H} \rangle$ em relação ao conjunto de parâmetros $\{u_n\}$, então encontramos os u_n que minimizam o valor esperado da energia. Desta forma, assumindo que as amplitudes de probabilidade ψ_n (e consequentemente ψ_n^*)

dependam de forma arbitrária dos elementos do conjunto $\{u_n\}$, faremos:

$$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \kappa u_p + A|\psi_p|^2 + \sum_n \left\{ \frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} [Au_n \psi_n - \gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \lambda \psi_n] + \frac{\partial \psi_n}{\partial u_p} [Au_n \psi_n^* - \gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) - \lambda \psi_n^*] \right\}, \quad (97)$$

onde λ são os multiplicadores de lagrange.

Já pela equação de Schroedinger independente do tempo ($\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$), podemos encontrar

$$E\psi_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Au_n \psi_n + \frac{\kappa}{2} \psi_n \sum_q u_q^2 \quad (98)$$

e seu complexo conjugado

$$E\psi_n^* = -\gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + Au_n \psi_n^* + \frac{\kappa}{2} \psi_n^* \sum_q u_q^2. \quad (99)$$

Podemos escrever estas equações como

$$\left(E - \frac{\kappa}{2} \sum_q u_q^2 \right) \psi_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Au_n \psi_n \quad (100)$$

$$\left(E - \frac{\kappa}{2} \sum_q u_q^2 \right) \psi_n^* = -\gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + Au_n \psi_n^*. \quad (101)$$

Logo, a equação (97) pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \kappa u_p + A|\psi_p|^2 + \sum_n \left[\frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} \left(E - \frac{\kappa}{2} \sum_q u_q^2 - \lambda \right) \psi_n + \frac{\partial \psi_n}{\partial u_p} \left(E - \frac{\kappa}{2} \sum_q u_q^2 - \lambda \right) \psi_n^* \right]. \quad (102)$$

Aqui é fácil ver que $\sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} \psi_n + \frac{\partial \psi_n}{\partial u_p} \psi_n^* \right)$ é nulo pois é o mesmo que $\sum_n \frac{\partial}{\partial u_p} (\psi_n^* \psi_n) = \frac{\partial}{\partial u_p} \sum_n |\psi_n|^2 = \frac{\partial}{\partial u_p} 1 = 0$. Assim, temos simplesmente

$$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \kappa u_p + A|\psi_p|^2. \quad (103)$$

Como pretendemos encontrar u_n que minimize o valor esperado de energia, fizemos

$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = 0$ e encontramos

$$u_n = -\frac{A}{\kappa} |\psi_p|^2. \quad (104)$$

Ao substituimos esta soluçao na equaao (96) com o intuito de minimizar o valor esperado, temos:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \sum_n \left[-\frac{A^2}{2\kappa} |\psi_n|^4 - \gamma(\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n-1}^* \psi_n) \right]. \quad (105)$$

Utilizamos as relaoes canonicas para a equaao de Schroedinger dependente do tempo

$$i\hbar \dot{\psi}_n = \frac{\partial}{\partial \psi_n^*} \langle \mathcal{H} \rangle \quad \text{e} \quad i\hbar \dot{\psi}_n^* = \frac{\partial}{\partial \psi_n} \langle \mathcal{H} \rangle \quad (106)$$

e podemos encontrar

$$i\hbar \dot{\psi}_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \gamma\chi^{(h)} |\psi_n|^2 \psi_n, \quad (107)$$

onde $\chi^{(h)} = A^2/\gamma\kappa$ e chamado de constante de acoplamento efetivo eletron-rede e definimos de forma a ser uma grandeza adimensional. Esta e a DNLSE apresentada no modelo de Holstein na equaao (27).

APÊNDICE B - MDNLSE no modelo de Davydov

Neste apêndice utilizamos o hamiltoniano do modelo de Davydov na sessão 2.3.3 para encontrar uma outra equação não linear diferente da DNLSE que descreva a dinâmica do éxciton na cadeia de proteínas α -hélice sob influência dos modos vibracionais ao longo da cadeia.

Partimos do hamiltoniano das equações (37), (38) e (39), isto é,

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{p}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_n)^2 + \varepsilon |n\rangle\langle n| - \gamma (|n+1\rangle\langle n| + |n-1\rangle\langle n|) + B(\hat{u}_{n+1} - \hat{u}_{n-1}) |n\rangle\langle n| \right]. \quad (108)$$

Aqui \hat{u}_n e $\hat{p}_n = M\dot{\hat{u}}_n$ são os operadores posição e momento, respectivamente, do grupo amida n de massa M e constante elástica efetiva κ de acoplamento com os primeiros vizinhos. Na parte do éxciton no modelo *tight-binding* para uma cadeia cristalina, $|m\rangle\langle n|$ é o operador projeção do éxciton do grupo amida n para o m . $\varepsilon = 0$ é o potencial *onsite* de custo energético do éxciton para permanecer no grupo amida e γ o termo de *hopping* referente ao custo energético do éxciton saltar do grupo amida n para seus primeiros vizinhos. B é chamado de constante de acoplamento energético éxciton-rede e representa a interação entre a dinâmica do éxciton e a da rede.

Calculamos o valor esperado da energia $\langle \mathcal{H} \rangle = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$, sabendo que $|\Psi\rangle = \sum_p \psi_p |p\rangle$ e conseqüentemente $\langle \Psi | = \sum_q \langle q | \psi_q^*$:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{n,p,q} \left[\frac{1}{2M} p_n^2 \psi_q^* \psi_p \delta_{p,q} + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 \psi_q^* \psi_p \delta_{p,q} - \gamma \psi_q^* \psi_p (\delta_{p,n} \delta_{q,n+1} + \delta_{p,n} \delta_{q,n-1}) + B(u_{n+1} - u_{n-1}) \psi_q^* \psi_p \delta_{p,n} \delta_{q,n} \right]. \quad (109)$$

Aqui usamos $\langle n | m \rangle = \delta_{n,m}$, $\hat{u}_n | \Psi \rangle = u_n | \Psi \rangle$ e $\hat{p}_n | \Psi \rangle = p_n | \Psi \rangle$.

Assumindo que o estado $|\Psi\rangle$ é normalizado, então $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$. Desta forma, podemos fazer

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n \left[\frac{1}{2M} p_n^2 + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 - \gamma (\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n-1}^* \psi_n) + B(u_{n+1} - u_{n-1}) |\psi_n|^2 \right]. \quad (110)$$

Para encontrar a equação que rege a dinâmica da rede, derivamos o valor esperado em relação à u_n e p_n . Assim como no Apêndice 1, permitimos que as amplitudes de

probabilidade dependam de u_n , mas também de p_n . Desta forma, temos que

$$\frac{\partial}{\partial p_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{M} p_p + \sum_n \left\{ \frac{\partial \psi_n^*}{\partial p_p} [B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n - \gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \lambda\psi_n] \right. \\ \left. + \frac{\partial \psi_n}{\partial p_p} [B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n^* - \gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) - \lambda\psi_n^*] \right\} \quad (111)$$

$$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \kappa(2u_p - u_{p+1} - u_{p-1}) + B(|\psi_{p-1}|^2 - |\psi_{p+1}|^2) \\ + \sum_n \left\{ \frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} [B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n - \gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \lambda\psi_n] \right. \\ \left. + \frac{\partial \psi_n}{\partial u_p} [B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n^* - \gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) - \lambda\psi_n^*] \right\}, \quad (112)$$

onde λ são os multiplicadores de lagrange.

Já pela equação de Schroedinger independente do tempo ($\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$), podemos encontrar

$$E\psi_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n + \left\{ \sum_q \left[\frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \right\} \psi_n \quad (113)$$

e seu complexo conjugado

$$E\psi_n^* = -\gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n^* + \left\{ \sum_q \left[\frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \right\} \psi_n^* \quad (114)$$

Podemos reescrever estas equações da seguinte forma:

$$\left\{ E - \sum_q \left[\frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \right\} \psi_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n \quad (115)$$

$$\left\{ E - \sum_q \left[\frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \right\} \psi_n^* = -\gamma(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + B(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n^*. \quad (116)$$

Desta forma, as equação (111) e (112) podem ser reescritas como

$$\frac{\partial}{\partial p_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{M} p_p + \sum_n \left\{ \frac{\partial \psi_n^*}{\partial p_p} \left[E - \lambda - \sum_q \frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \psi_n \right. \\ \left. + \frac{\partial \psi_n}{\partial p_p} \left[E - \lambda - \sum_q \frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \psi_n^* \right\} \quad (117)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle &= \kappa(2u_p - u_{p+1} - u_{p-1}) + B(|\psi_{p-1}|^2 - |\psi_{p+1}|^2) \\
&+ \sum_n \left\{ \frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} \left[E - \lambda - \sum_q \frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \psi_n \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial \psi_n}{\partial \hat{u}_p} \left[E - \lambda - \sum_q \frac{1}{2M} p_q^2 + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_{q+1} - \hat{u}_q)^2 \right] \psi_n^* \right\}. \tag{118}
\end{aligned}$$

Como mostramos também em Apêndice 1, $\sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial u_p} \psi_n + \frac{\partial \psi_n}{\partial u_p} \psi_n^* \right) = 0$ (o mesmo com as derivadas em p_p pela mesma demonstração). Logo, temos que

$$\frac{\partial}{\partial p_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{M} p_p \tag{119}$$

$$\frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \kappa(2u_p - u_{p+1} - u_{p-1}) + B(|\psi_{p-1}|^2 - |\psi_{p+1}|^2). \tag{120}$$

Usando agora, as relações de Hamilton [110]

$$\frac{\partial}{\partial p_p} \langle \mathcal{H} \rangle = \dot{u}_p \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial u_p} \langle \mathcal{H} \rangle = -\dot{p}_p, \tag{121}$$

podemos encontrar a equação que rege a dinâmica da rede

$$M\ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + B(|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2). \tag{122}$$

Podemos ver aqui, que na ausência de influência do éxciton na dinâmica da rede, isto é, $B = 0$, a rede tem como solução modos acústicos de vibração como discutido na seção 2.3.

Utilizamos, aqui, a aproximação adiabática, assim como em [53,54], em que $t_{ex} \ll t_{latt}$, onde $t_{ex} = \hbar/\gamma$ e $t_{latt} = \sqrt{M/\kappa}$. Nesta aproximação, a dinâmica do éxciton ocorre mais rápido do que o oscilador naturalmente completa uma oscilação, assim, a rede está praticamente parada e podemos tomar que $\dot{u}_n \approx 0$ e consequentemente $\ddot{u}_n \approx 0$. Assim, temos que uma das soluções dessa última equação é

$$u_n - u_{n-1} = -\frac{B}{\kappa} (|\psi_n|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \tag{123}$$

$$u_{n+1} - u_n = -\frac{B}{\kappa} (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_n|^2), \tag{124}$$

pois ao subtrair a primeira da segunda, temos a equação (122) quando o $\ddot{u}_n = 0$. Esta solução também respeita a transformação ao fazer $n \rightarrow n + 1$, em que levamos da solução de cima para a de baixo diretamente. Ao somar estas duas últimas equações, também

temos

$$u_{n+1} - u_{n-1} = -\frac{B}{\kappa} (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2 + 2|\psi_n|^2). \quad (125)$$

Ao substituir estas soluções encontradas na equação (110) com $p_n = 0$, encontramos o valor esperado mínimo na aproximação adiabática:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \sum_n \left[-\gamma (\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n-1}^* \psi_n) - \frac{B^2}{\kappa} (|\psi_n|^4 + |\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2) \right]. \quad (126)$$

Utilizamos novamente aqui as relações canônicas para a equação de Schroedinger dependente do tempo

$$i\hbar\dot{\psi}_n = \frac{\partial}{\partial \psi_n^*} \langle \mathcal{H} \rangle \quad \text{e} \quad i\hbar\dot{\psi}_n^* = \frac{\partial}{\partial \psi_n} \langle \mathcal{H} \rangle \quad (127)$$

para encontrar

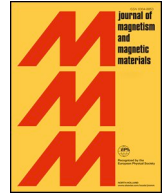
$$i\hbar\dot{\psi}_n = -\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \gamma\chi^{(d)}(2|\psi_n|^2 + |\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2)\psi_n, \quad (128)$$

onde $\chi^{(d)} = B^2/\gamma\kappa$ é conhecido como constante de acoplamento efetivo éxciton-rede. Definimos aqui de forma a ser uma grandeza adimensional. Esta é a equação apresentada em (40), uma equação de Schroedinger discreta não linear diferente da DNLSE. Economou a classifica em um grupo de equações modificadas (MDNLSE) que na aproximação para o contínuo correspondem à mesma equação que a DNLSE:

$$i\dot{\psi}(x) = \bar{\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - \bar{\chi} |\psi(x)|^2 \psi(x). \quad (129)$$

ANEXO A - Artigo publicado

Apresentação do artigo da referência [108] publicado.



The self-trapping transition of one-magnon excitations coupled to acoustic phonons

D. Morais^a, M.L. Lyra^a, F.A.B.F. de Moura^a, W.S. Dias^{a,*}

^a Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:
Magnon
Phonon
Self-trapping
Nonlinearity

MSC:
82D40
93C10

ABSTRACT

We study the dynamics of one-magnon states coupled to the underlying harmonic oscillations of a linear lattice. We consider that small amplitude oscillations affect linearly the exchange couplings. Within an adiabatic approximation, the magnon dynamics is governed by an effective modified nonlinear Schrödinger equation. We provide a detailed numerical study of the magnon self-trapping transition. We accurately determine the critical nonlinearity χ_c above which a finite fraction of an initially localized spin excitation remains trapped. To this end, we analyze relevant quantities such as the return probability, participation number and Shannon entropy. We also follow the soliton dynamics showing that its velocity vanishes as $v \propto (\chi_c - \chi)^{1/2}$. The return probability is shown to be discontinuous at χ_c while the participation number displays a kink singularity.

1. Introduction

The dynamics of spin waves in complex magnetic systems under influence of interactions with magnetic fields or lattice vibrations has been a key condensed matter topic within the last decades [1–3]. According to the recent literature, the presence of elasticity as well as interaction between magnons and phonons were shown to be relevant within the context of distinct magnetic compounds [4–10]. Several works have shown experimentally that the presence of vibrational modes affects substantially the dynamics of spin excitations [4–7]. The presence of spin-phonon coupling, as well as its effects on the magnetic properties, was also reported to take place in some semiconductors [8,9]. In Ref. [10], the authors investigated films of the ferrimagnetic insulator Yttrium-Iron garnet under a non-uniform magnetic field. They demonstrated the conversion of coherent magnons generated by a microwave field into phonons that carries a net spin.

In which concerns the theoretical description of several magnetic systems, the Heisenberg Hamiltonian [11,12] has a successful trajectory [13–19]. In general, the exchange spin-spin coupling that is considered within the Heisenberg formalism can depend on the spin's positions as well as on their relative displacement. The role played by the magnon-phonon coupling has been explored in several systems [20–22]. The Heisenberg Hamiltonian was used, for example, to describe the conversion between magnons and phonons [23]. Moreover, it was also used to explain experimental data related to the phonon dynamics in magnetic systems [24] and the effect of spin-phonon coupling on the

colossal magneto-resistance of magnetic compounds [25].

In this work, we will study the dynamics of spin-waves in an anisotropic one-dimensional ferromagnetic system of spins $S = 1/2$. We will take in account the influence of vibrational modes on the spin-waves propagation, i.e., the coupling between one-magnon and acoustic phonon excitations. Within an adiabatic approximation, and considering that lattice vibrations can be treated according to the classical mechanics formalism, the magnon dynamics is governed by a modified discrete nonlinear Schrödinger equation (MDNLSE). In this sense, it depicts some similarities with the polaron phenomenon for electronic systems [26–32]. We will solve numerically the dynamic equation and follow the time evolution of an initially localized spin deviation. Some relevant quantities such as the return probability, participation number and Shannon entropy will be used to characterize the dynamic regimes. In particular, we will show that a finite fraction of the magnon-excitation remains trapped around its initial location above a critical nonlinear strength χ_c . For weaker nonlinearities, the magnon-excitation develops soliton-like fronts that propagate with a constant velocity v . The soliton velocity will be shown to vanish as a power-law when from below. The singular behavior of the return probability and participation number will be also unveiled.

2. Magnon-Phonon Hamiltonian and the effective MNLSE

We will consider a Heisenberg Hamiltonian in the anisotropic form $XXZ (H_{mag})$ to describe the spin-spin interactions along a linear lattice.

* Corresponding author.

E-mail address: wandearley@fis.ufal.br (W.S. Dias).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166798>

Received 2 October 2019; Received in revised form 18 February 2020; Accepted 21 March 2020

Available online 23 March 2020

0304-8853/ © 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

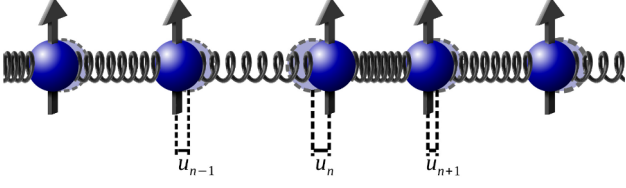


Fig. 1. Schematic representation of a spin linear lattice with effective harmonic springs coupling nearest-neighbor spins. The exchange interaction along the field direction is considered to be affected by the relative displacement of the pair of nearest-neighbor spins.

Classical harmonic oscillations will be considered to account for the lattice dynamics described by a Hamiltonian H_{latt} . The complete effective Hamiltonian is given by $H = H_{mag} + H_{latt}$. In Fig. 1 we show a schematic representation of the present model system. Each spin is coupled with its nearest neighbors by harmonic springs. u_n represents the position of spin n . The classical Hamiltonian describing the lattice dynamics is given by:

$$H_{latt} = \sum_{n=1}^N \left[\frac{M}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 \right]. \quad (1)$$

M and κ represent the ion's mass and the spring constant respectively. We will consider that the $\omega \hbar \ll k_B T$ where $\omega = \sqrt{\kappa/M}$, k_B is the Boltzmann constant and T is the temperature. In this regime, the lattice dynamics can be treated within the classical mechanics formalism. We will consider the action of an external magnetic field H to promote a saturated ferromagnetic ground state. The magnetic field will be assumed to be large enough so that thermal fluctuations mainly produce states with single spin flips. In what follows, we will be interested in investigating how the dynamics of these one-magnon states are affected by the underlying lattice oscillations. In the sub-space of single spin-flip excitations, the Heisenberg Hamiltonian can be written as:

$$H_{mag} = E_0 + 2g\mu_B HS + \sum_{n=1}^N \{ 2S\hbar(J_{n,n+1}^Z + J_{n,n-1}^Z)c_n^\dagger c_n - 2S\hbar J_{n,n+1}^{XY}c_{n+1}^\dagger c_n - 2S\hbar J_{n,n-1}^{XY}c_{n-1}^\dagger c_n \}, \quad (2)$$

where $S = 1/2$ and $J_{n,m}^{Z(XY)}$ represent the exchange couplings between spins n and m along the Z direction and XY plane. The ground-state energy is given by $E_0 = -S^2 \sum_m J_{m,m\pm 1}^Z - g\mu_B N H S$. c_n^\dagger and c_n are the spin-flip creation and annihilation operators at site n . Whenever the creation operator is applied to the ground-state, it leads to the excited state with the spin at site n flipped. In the present model, we will consider that the exchange coupling depends on the distance between nearest neighbor spins. We assume that, in the regime of small amplitude oscillations, this dependence is given by:

$$\begin{aligned} J_{n,n+1}^Z &\approx J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_n), \\ J_{n,n+1}^{XY} &\approx J_0, \end{aligned} \quad (3)$$

where α is the effective spin-lattice coupling affecting the longitudinal spin-spin interactions. In what follows, an adiabatic approximation will be employed in order to solve the classical lattice motion equations. Within this approach, the time scale associated with the magnon dynamics is considered to be smaller than the time scale associated with the lattice vibrations.

Although this regime is usually not reached in ferromagnetic insulators, the recent advent of advanced materials exhibiting high-frequency terahertz magnons has impelled the development of a new class of ultrafast spintronic devices. Terahertz magnons have been reported, for example, in the 2D Ising honeycomb ferromagnet CrI_3 [33],

ultrathin film of ironpalladium alloys [34], layered iron-cobalt magnonic crystals [35] and noncollinear magnetic bilayers [36]. In this class of systems presenting high-frequency ferromagnetic magnons, the adiabatic integration over the phonon degrees of freedom can fairly incorporate the main influence of the underlying magnon-phonon coupling on the spin-wave dynamics.

Therefore we can consider $\dot{u}_n \approx 0$ and $\ddot{u}_n \approx 0$. It results in a direct relation between the lattice deformations and the magnon wave-function. Using this formalism, one can write an effective nonlinear Schrödinger equation for the magnon dynamics as:

$$i\hbar \dot{a}_n = -\hbar^2 J_0 a_{n+1} - \hbar^2 J_0 a_{n-1} - \hbar^2 J_0 \chi (2|a_n|^2 + |a_{n+1}|^2 + |a_{n-1}|^2) a_n, \quad (4)$$

from which a linear diagonal term has been omitted because it does not have any impact on the magnon dynamics. $|a_n|^2 = a_n^* a_n$ represents the probability of finding a spin deviation at site n . Moreover, the quantity $\chi = \alpha^2 \hbar^2 / \kappa J_0$ is a nonlinear parameter that measures the strength of the magnon-lattice coupling. In general lines, this equation represents a *modified discrete nonlinear Schrödinger equation (MDNLSE)* associated with the magnon dynamics.

Nonlinear contributions to the magnon dynamics also arise from magnon-magnon interactions and shown to induce the formation of magnetic solitons [37]. Recently, the competition between the nonlinear contribution resulting from a local anisotropy and disorder associated to a random magnetic field was investigated [38]. It has been demonstrated that large nonlinearities lead to the self-trapping of magnetic excitations which is anticipated by a sub-diffusive phase. Although self-trapping was shown to take place when the nonlinearity strength is much larger than the spectrum bandwidth, no precise bound between the sub-diffusion and the self-trapping phases was established. It is important to stress that while a local anisotropy leads to a nonlinear correction that depends only of the local magnon probability density [38], the present nonlinearity resulting from the magnon-phonon coupling also brings contributions from the magnon density at the neighboring sites. A generalization of the nonlinear term to account for a variable relative contribution of local and neighboring densities would simultaneously incorporates effects from both magnon-magnon and magnon-phonon interactions.

We will solve numerically Eq. (4) to follow the time-evolution of spin excitations. For the initial condition, we will use a single spin flip at the chain center ($n = 0$ will be taken as the center of chain). We will consider $t_m = 1/(\hbar J_0)$ as the relevant time unit. To analyze the main features of the spin-wave dynamics, we will compute the return probability defined as:

$$R_0 = |a_0|^2 \quad (5)$$

and the participation number defined as:

$$\xi = \frac{\sum_n |a_n|^2}{\sum_n |a_n|^4} \quad (6)$$

R_0 and ξ are two relevant quantities that can probe both the localization and self-trapping phenomena. If $R_0 > 0$ after a long-time run, a fraction of the initial spin excitations remains trapped around its initial location. ξ is an estimation of the number of sites over which the wave-packet is predominantly distributed. ξ remaining finite in the long-time regime signals the formation of stable localized wave-packets.

We will also compute the Shannon entropy associated to the evolving wave-packet defined as

$$S = - \sum_n |a_n|^2 \ln |a_n|^2, \quad (7)$$

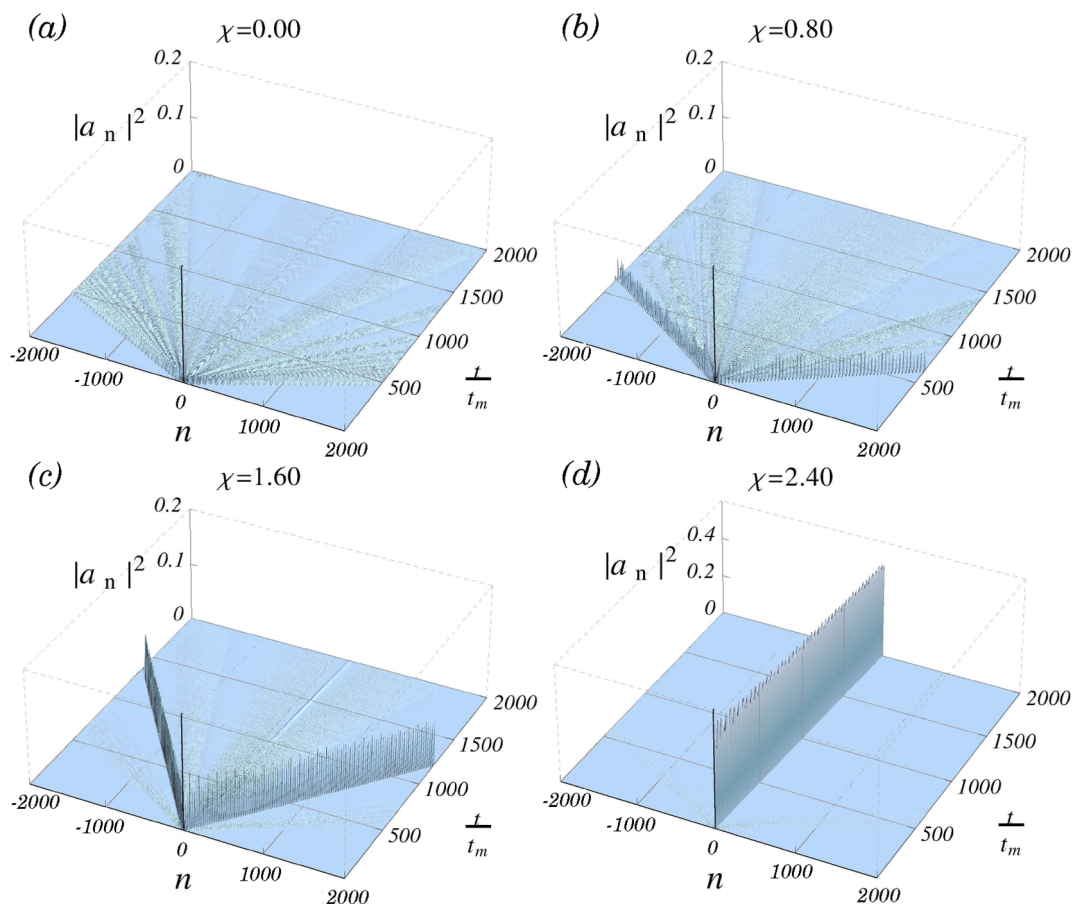


Fig. 2. Time evolution of the wave-function profile ($|a_n(t)|^2$) on a chain with sites indexed by n for (a) $\chi = 0.0$, (b) $\chi = 0.80$, (c) $\chi = 1.60$, (d) $\chi = 2.40$. While in absence of nonlinearity the wave function spreads over the lattice (see fig.a), the emergence of a soliton-like propagating structure characterizes the intermediate regime (see fig.b-c). Self-trapping is observed for strong nonlinearities (see fig.d).

which can give additional information regarding the wave-packet dynamics.

3. Results

We solved the set of discrete nonlinear Schrödinger equations using a standard Runge-Kutta algorithm. The numerical integration was performed considering a self-expanding algorithm of the chain size in order to avoid finite-size and border effects. The position $n = 0$ was taken as the chain center. All calculations were done by considering the initial condition $a_n(t = 0) = \delta_{n,0}$.

In Fig. 2 we plot the wave-function profile ($|a_n(t)|^2$) versus time t and spin position n for some representative values of the nonlinear parameter χ . In the linear case ($\chi = 0$) the initially localized spin excitation radiates over the chain evolving to a fully delocalized state. For large nonlinearities, a finite fraction of the spin excitation remains trapped around its initial location. For weak nonlinearities, breathing propagating soliton-like modes are developed, while a fraction of the magnon wave radiates. The velocity of the propagating solitons decreases as the nonlinearity is increased. In Fig. 3 we illustrate the transition between these two regimes. For $\chi = 1.82$, as shown in Fig. 3a, the moving breathing soliton has a very small velocity. Slightly above this point (see. eg. Fig. 3b), it remains trapped.

To precisely locate the self-trapping transition point, we will explore the behavior of the soliton velocity as a function of the nonlinear strength. At first, we followed the time-evolution of the position of the

wave-function maxima for several values of χ , as shown in Fig. 4a. Both maxima at the left and right branches are reported. They have the same velocity as expected due to the parity symmetry of the Hamiltonian and of the initial wave-function. This figure shows that the soliton velocity continuously decreases, vanishing above some characteristic nonlinearity. This feature is more clearly reported in Fig. 4b where the estimated values of the soliton velocity are plotted as a function of χ . We also performed a scaling analysis of the soliton velocity to provide an accurate estimate of the critical nonlinearity. In the vicinity of the critical point, the velocity shall decrease as a power-law $v \propto (\chi_c - \chi)^\beta$. The best power-law fit is achieved for $\chi_c = 1.825$ providing the decay exponent $\beta = 1/2$ (see Fig. 4c). This value is of the same order of magnitude of the critical nonlinearity for the transition from sub-diffusion to self-trapping of magnetic excitations that takes place in the presence of a random magnetic field acting together with a local anisotropy [38]. In such system, nonlinearity effectively accounts for the magnon-magnon interaction promoted by the local anisotropy. The present result gives further support to the general picture that self-trapping occurs when the nonlinearity strength sufficiently exceeds the spectrum bandwidth.

The return probability can also be used to signal the self-trapping transition. In Fig. 5 we report the return probability after a long time run as a function of χ . It is vanishing small below the critical point and becomes finite above χ_c . However, in contrast to the continuous vanishing of the soliton velocity, the return probability is discontinuous at the transition, with a jump $\Delta R_0(\chi_c) \approx 0.16$. The emergence of a

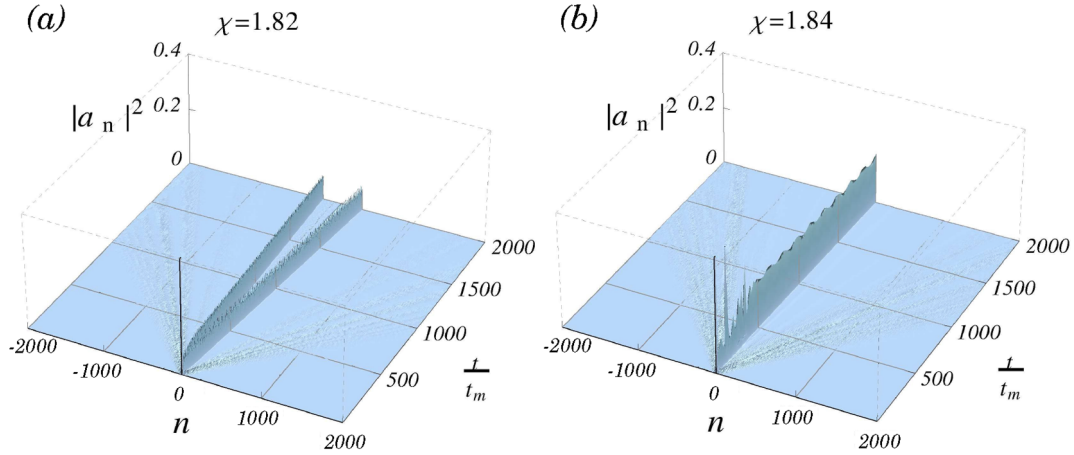


Fig. 3. Time evolution of the wave-function profile ($|a_n(t)|^2$) on the lattice sites n for (a) $\chi = 1.82$ and (b) $\chi = 1.84$. Notice the transition between the regimes of slowly propagating solitonic modes to self-trapping.

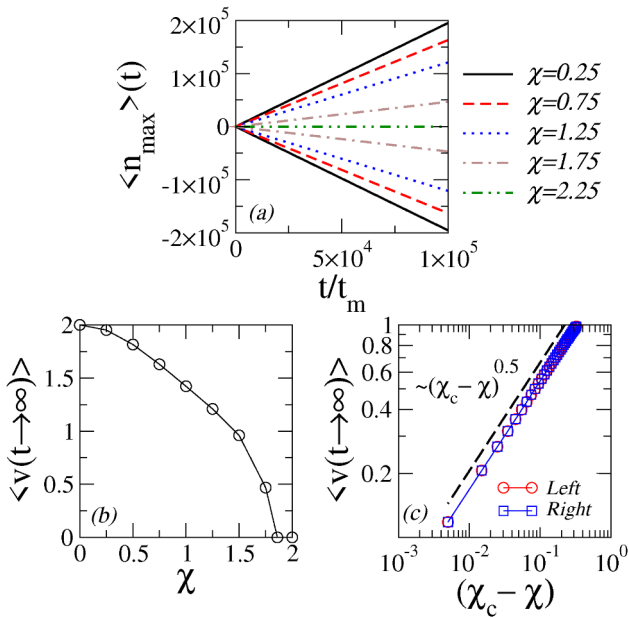


Fig. 4. Dynamics of soliton-like structures, with (a) the position of the solitonic waves ($\langle n_{max} \rangle(t)$) versus t for several values of χ , (b) the soliton velocity versus χ and (c) the scaling analysis of the velocity of both travelling solitons. The best fit to a power-law decay provides $\chi_c = 1.825$ and $v \propto (\chi_c - \chi)^{1/2}$.

discontinuous jump in the return probability is a direct consequence of the soliton trapping phenomenon. In the inset of Fig. 5, we plot the wave-function probability at the peak position of one of the travelling solitons slightly below χ_c . At the transition, both left and right solitons are trapped in the initial position, giving rise to a return probability which is twice as larger as the peak probability of each individual merging soliton.

The self-trapping transition leads to a distinct singularity in the wave-function spatial extension. In Fig. 6 the participation number dependence on the nonlinearity parameter χ is shown. It displays an overall $1/\chi^3$ decay, thus confirming the expected trend of strong localization promoted by nonlinearity. At the self-trapping critical point, the participation number develops a kink singularity. The merging of the two solitonic branches at χ_c does not result in a discontinuity of the

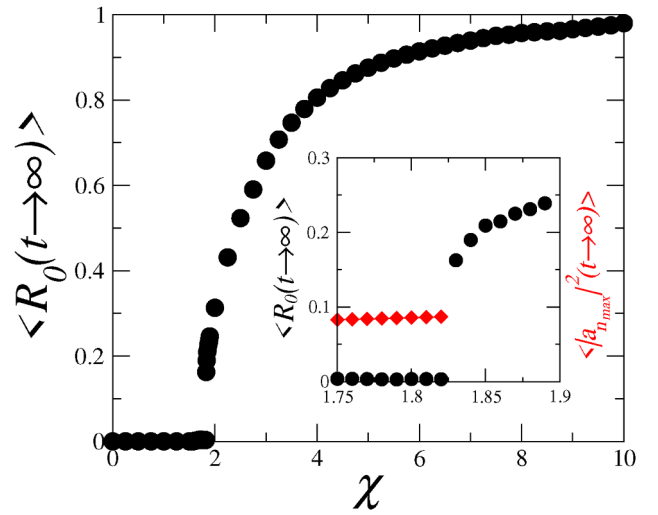


Fig. 5. Data of the long-time behavior of the return probability ($\langle R_0(t \rightarrow \infty) \rangle$) versus χ corroborates the transition for self-trapped waves at $\chi_c = 1.825$. The inset describes the χ -dependence of both return probability R_0 and the wave function probability at the center of the travelling soliton-like structures $|a_{max}|^2$. The merging of the two travelling solitons at χ_c leads to a discontinuous jump in R_0 .

participation number itself but in the rate it varies with χ .

The time-evolution of the Shannon entropy associated to the evolving wave-packet also signals the distinct dynamical regimes. To illustrate this aspect, we plot in Fig. 7a the time-dependence of the entropy for distinct values of the nonlinearity strength. It clearly depicts two scaling regimes. At short-times its logarithmic growth is fairly independent of χ for weak nonlinearities. This regime is associated with the initial spreading of the wave-packet and is suppressed for strong nonlinearities. After this transient regime, the entropy develops a slower increase. This feature results from the formation of the solitonic wave with a breathing pattern. In this regime, only the radiative component of the wave-packet contributes to the entropy overall increase. The slope of the $S \times \ln t$ curve can be used as an estimate of the wave-packet fraction carried by the radiating wave. It decreases exponentially with χ when the nonlinearity strength is enlarged, showing also a jump singularity at χ_c , as shown in Fig. 7b. This singularity is directly related to the merging of the solitonic branches at the self-

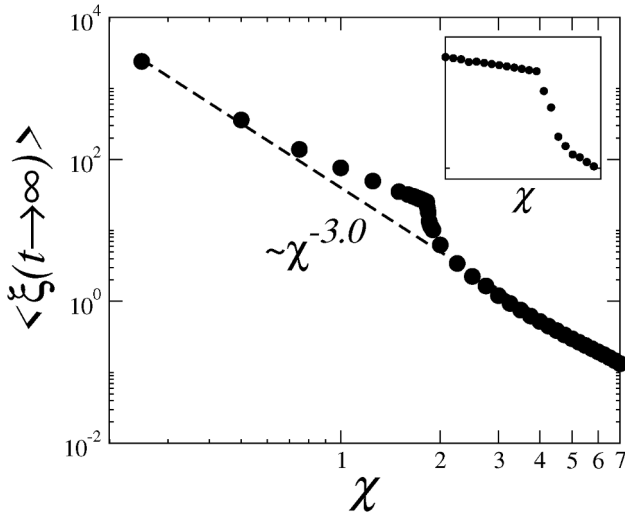


Fig. 6. Data of the long-time participation number ($\langle \xi(t \rightarrow \infty) \rangle$) versus χ . A kink singularity is developed at χ_c . The overall $1/\chi^3$ decay signals the strong localization promoted by nonlinearity.

trapping transition.

Before finishing, we would like to stress that the localized fraction of the wave-function, both above and below the self-trapping transition, has indeed a solitonic profile. In Fig. 8 we plot the spatial profiles of these localized structures for two representative values of the nonlinearity. For $\chi = 0.5$, we focus on one of the travelling soliton-like structures while for $\chi = 2$ we show a trapped mode localized around the initial position ($n = 0$). Both modes follow the well known soliton-like spatial profile proposed in Refs. [28,29] i.e., $|a_n(t)|^2 = |a_{n_{max}}|^2(t) \cdot \text{sech}^2[\gamma |a_{n_{max}}|^2(t)(n \pm vt)]$. The solid lines in Figs. 8 represent fittings using this profile, thus confirming the solitonic nature of these localized modes.

4. Summary

In this work we investigated the influence of lattice oscillations in the dynamics of initially localized one-magnon excitations in an anisotropic Heisenberg ferromagnetic chain. The magnon-lattice coupling was introduced by considering the longitudinal spin-spin exchange coupling as a linear function of the relative displacement between nearest-neighbor spins. Treating the lattice oscillations within a classical mechanics formalism and using an adiabatic approximation, the spin-wave dynamics is effectively described by a modified discrete nonlinear Schrödinger equation where the nonlinear parameter χ is proportional to the underlying spin-lattice coupling.

We showed that the nonlinearity promotes the wave-packet localization with the participation number presenting an overall $1/\chi^3$ decay. For weak nonlinearities, the wave-packet depicts both radiating and localized modes. The localized modes are left and right travelling breathing solitons. The soliton velocity decreases with χ , vanishing at $\chi_c = 1.825$. Above this point, the localized mode becomes self-trapped around the position of the initial excitation. We showed that the soliton velocity decays continuously as $(\chi_c - \chi)^{1/2}$. On the other hand, the return probability and participation number develop jump and kink singularities, respectively. The Shannon entropy was also shown to signal these distinct dynamical regimes. The present numerical results provide accurate estimates of the critical point and respective singularities of the relevant quantities associated with the presently reported nonlinear-induced self-trapping transition. It would be interesting to have these results derived from an analytical framework. It would bring valuable new insights to the overall wave dynamics in discrete nonlinear lattices.

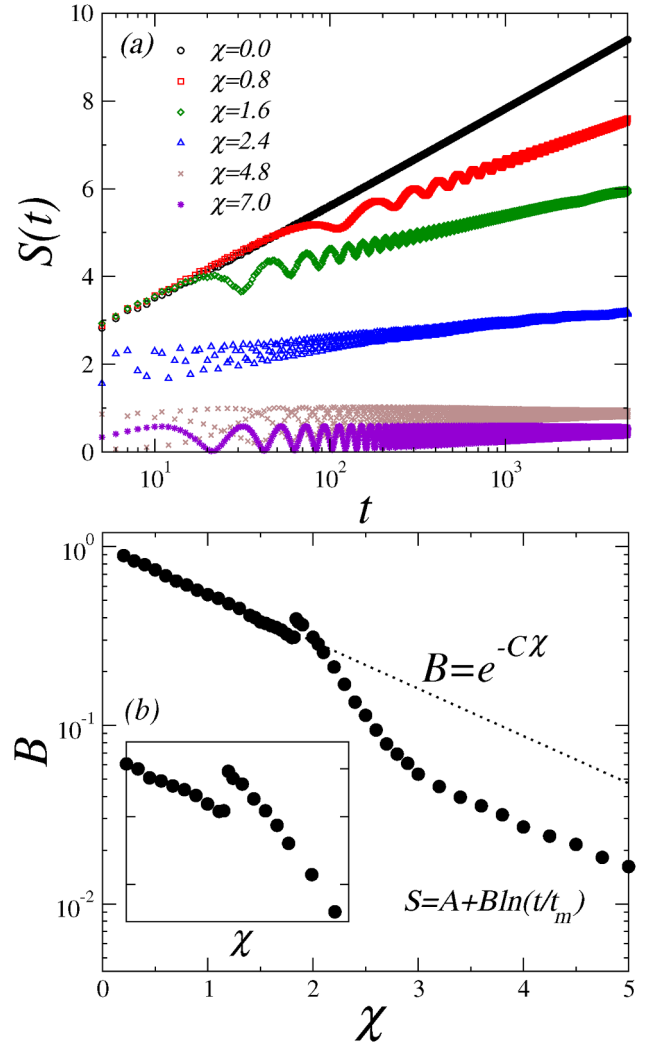


Fig. 7. (a) Time evolution of the Shannon entropy S for distinct values of the nonlinearity strengths χ . The logarithmic growth captures the wave-packet spreading. Notice that the slope changes at a characteristic time scale associated to the soliton formation. (b) The asymptotic slope of the entropy curves (in logarithmic time scale) as a function of the nonlinear strength. It gives an estimate of the radiative wave-packet fraction. The asymptotic slope changes discontinuously at the self-trapping transition.

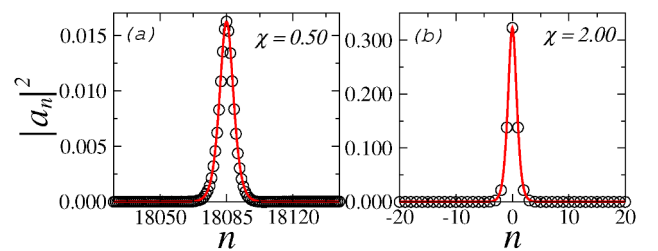


Fig. 8. The spatial profile of the wave-function around (a) travelling and (b) trapped solitonic modes. The solid lines represent a fitting curve, which corroborates a spatial profile $|a_n(t)|^2 = |a_{n_{max}}|^2(t) \cdot \text{sech}^2[\gamma |a_{n_{max}}|^2(t)(n \pm vt)]$ of breathing bright solitons.

CRediT authorship contribution statement

D. Morais: Conceptualization, Data curation, Investigation. **M.L. Lyra:** Writing - original draft, Supervision. **F.A.B.F. de Moura:** Validation, Writing - original draft. **W.S. Dias:** Methodology, Writing - review & editing, Data curation, Supervision.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), and FAPEAL (Alagoas State Agency).

Appendix A. Supplementary data

Supplementary data associated with this article can be found, in the online version, at <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166798>.

References

- [1] E. Pytte, Spin-phonon interactions in a heisenberg ferromagnet, *Ann. Phys.* 32 (3) (1965) 377–403, [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(65\)90139-9](https://doi.org/10.1016/0003-4916(65)90139-9) URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491665901399>.
- [2] C.F. Kooi, Interaction of phonons and spin waves, *Phys. Rev.* 131 (1963) 1070–1075, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.131.1070>.
- [3] R. Pradip, P. Piekarz, A. Bosak, D.G. Merkel, O. Waller, A. Seiler, A.I. Chumakov, R. Rüffer, A.M. Ole, K. Parlinski, M. Krisch, T. Baumbach, S. Stankov, Lattice dynamics of EUO: evidence for giant spin-phonon coupling, *Phys. Rev. Lett.* 116 (2016) 185501, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.185501>.
- [4] P. Dai, H.Y. Hwang, J. Zhang, J.A. Fernandez-Baca, S.-W. Cheong, C. Kloc, Y. Tomioka, Y. Tokura, Magnon damping by magnon-phonon coupling in manganese perovskites, *Phys. Rev. B* 61 (2000) 9553–9557, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.9553>.
- [5] P. Reutler, F. Moussa, M. Hennion, F. Wang, A. Revcolevschi, Spin wave anomalies and phonons at low temperature in $\text{LaO}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$, *J. Magn. Magn. Mater.* 242–245 (2002) 689–691, [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(01\)01022-8](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(01)01022-8) proceedings of the Joint European Magnetic Symposia (JEMS'01). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885301010228>.
- [6] H. Man, Z. Shi, G. Xu, Y. Xu, X. Chen, S. Sullivan, J. Zhou, K. Xia, J. Shi, P. Dai, Direct observation of magnon-phonon coupling in yttrium iron garnet, *Phys. Rev. B* 96 (2017) 100406, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.100406>.
- [7] X. Li, D. Labanowski, S. Salahuddin, C.S. Lynch, Spin wave generation by surface acoustic waves, *J. Appl. Phys.* 122 (4) (2017) 043904, <https://doi.org/10.1063/1.4996102>.
- [8] A. Milosavljević, A. Olaji, J. Pei, Y. Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, Evidence of spin-phonon coupling in CrS_2 , *Phys. Rev. B* 98 (2018) 104306, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.104306>.
- [9] P.C. Lou, L. de Sousa Oliveira, C. Tang, A. Greaney, S. Kumar, Spin phonon interactions and magneto-thermal transport behavior in p-si , *Solid State Commun.* 238 (2018) 37–42, <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2018.08.008> URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109818304526>.
- [10] J. Holanda, D.S. Maior, A. Azevedo, S.M. Rezende, Detecting the phonon spin in magnon-phonon conversion experiments, *Nat. Phys.* 14 (5) (2018) 500–506, <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0079-y>.
- [11] W. Heisenberg, Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik, *Zeitschrift für Physik* 38 (6) (1926) 411–426, <https://doi.org/10.1007/BF01397160>.
- [12] W. Heisenberg, Zur theorie des ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik* 49 (9) (1928) 619–636, <https://doi.org/10.1007/BF01328601>.
- [13] V.L. Líbero, K. Capelle, Spin-distribution functionals and correlation energy of the heisenberg model, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 024423, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024423>.
- [14] M. Belhadi, S. Kheffache, Magnons heat transport at an integrated nanostructure in ultrathin heisenberg ferromagnetic films, *Surf. Rev. Lett. (SRL)* 18 (06) (2011) 241–248, <https://doi.org/10.1142/S0218625X1101459X> URL: <https://ideas.repec.org/a/wsi/srlxxx/v18y2011i06ns0218625x1101459x.html>.
- [15] H. Wijesinhe, K.A.I.L. Wijewardena Gamalath, Spin waves in two and three dimensional magnetic materials, *Int. Lett. Chem., Phys. Astron.* 49 (2015) 35–47, <https://doi.org/10.18052/www.scipress.com/IJLCPA.49.35>.
- [16] D.C. Mattis, *The Theory of Magnetism I: Statics and Dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1981.
- [17] L. Liao, Y. Chen, Spin-wave theory applied to the low-temperature properties of the spin-1/2 ferromagnetic chain with the y-direction exchange anisotropy, *Superlattices Microstruct.* 73 (2014) 82–97, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2014.05.016> URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S074960361400161X>.
- [18] N. Lafloré, D.J. Luitz, F. Alet, Spin-wave approach for entanglement entropies of the J₁-J₂ heisenberg antiferromagnet on the square lattice, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 115126, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.115126>.
- [19] D. Maiti, D. Dey, M. Kumar, Frustrated spin-1/2 ladder with ferro- and antiferromagnetic legs, *J. Magn. Magn. Mater.* 446 (2018) 170–176, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.09.025> URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317311964>.
- [20] P.A. Deymier, J.O. Vasseur, K. Runge, A. Manchon, O. Bou-Matar, Phonon-magnon resonant processes with relevance to acoustic spin pumping, *Phys. Rev. B* 90 (2014) 224421, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224421>.
- [21] M. Mochizuki, N. Furukawa, N. Nagaosa, Theory of spin-phonon coupling in multiferroic manganese perovskites Rmno_3 , *Phys. Rev. B* 84 (2011) 144409, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.144409>.
- [22] M.E. Gouvêa, A.S.T. Pires, Effect of spin-phonon coupling on the haldane gap in antiferromagnetic heisenberg chains, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 052401, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.052401>.
- [23] S.C. Guerreiro, S.M. Rezende, Magnon-phonon interconversion in a dynamically reconfigurable magnetic material, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 214437, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.214437>.
- [24] M. Malard, A.S.T. Pires, Influence of magnon-phonon coupling on the phonon dynamics of one-dimensional antiferromagnets, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 104407, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.104407>.
- [25] Y. Huang, L. Pi, Y. Zhang, Effects of spin-phonon interaction on transport, magnetic properties and the oxygen isotope effect in r1-xaxmno_3 , *J. Magn. Magn. Mater.* 323 (22) (2011) 2764–2769, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.05.043> URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488531100312X>.
- [26] J. Zhao, D.T. Adroja, D.-X. Yao, R. Bewley, S. Li, X.F. Wang, G. Wu, X.H. Chen, J. Hu, P. Dai, Spin waves and magnetic exchange interactions in CaFe_2As_2 , *Nat. Phys.* 5 (8) (2009) 555–560, <https://doi.org/10.1038/nphys1336>.
- [27] K. Shen, G.E.W. Bauer, Laser-induced spatiotemporal dynamics of magnetic films, *Phys. Rev. Lett.* 115 (2015) 197201, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.197201>.
- [28] T. Holstein, Studies of polaron motion: Part i. the molecular-crystal model, *Ann. Phys.* 8 (3) (1959) 325–342, [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8) URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491659900028>.
- [29] T. Holstein, Studies of polaron motion: Part ii. the "mall" polaron, *Ann. Phys.* 8 (3) (1959) 343–389, [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90003-X](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X) URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000349165990003X>.
- [30] W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, Solitons in polyacetylene, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 1698–1701, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698>.
- [31] W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, Soliton excitations in polyacetylene, *Phys. Rev. B* 22 (1980) 2099–2111, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.22.2099>.
- [32] A.S. Davydov, N.I. Kislukha, Solitons in one-dimensional molecular chains, *Phys. Status Solidi (b)* 75 (2) (1976) 735–742, <https://doi.org/10.1002/psb.2220750238> URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/psb.2220750238>.
- [33] W. Jin, H.H. Kim, Z. Ye, S. Li, P. Rezaie, F. Diaz, S. Siddiq, E. Wauer, B. Yang, C. Li, S. Tian, K. Sun, H. Lei, A.W. Tsen, L. Zhao, R. He, Raman fingerprint of two terahertz spin wave branches in a two-dimensional honeycomb insulating ferromagnet, *Nat. Commun.* 9 (2018) 5122, <https://doi.org/10.1038/s41467-018-07547-6>.
- [34] H.J. Qin, K. Zakeri, A. Ernst, L.M. Sandratskii, P. Buczek, A. Marmodoro, T.H. Chuang, Y. Zhang, J. Kirschner, Long-living terahertz magnons in ultrathin metallic ferromagnets, *Nat. Commun.* 6 (2015) 6126, <https://doi.org/10.1038/ncomms7126>.
- [35] H.J. Qin, S. Tsurkan, A. Ernst, K. Zakeri, Experimental realization of atomic-scale magnonic crystals, *Phys. Rev. Lett.* 123 (2019) 257202, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.257202>.
- [36] M.L.M. Laliou, R. Lavrijsen, R.A. Duine, B. Koopmans, Investigating optically excited terahertz standing spin waves using noncollinear magnetic bilayers, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 184439, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.184439>.
- [37] A. Kosevich, B. Ivanov, A. Kovalev, Magnetic solitons, *Phys. Rep.* 194 (3) (1990) 117–238, [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90130-T](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90130-T) URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037015739090130T>.
- [38] C. Wang, Y. Cao, X.R. Wang, P. Yan, Interplay of wave localization and turbulence in spin seebeck effect, *Phys. Rev. B* 98 (2018) 144417, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.144417>.