

RICARDO JUNIOR CAMPOS LOPES

**NANOMAGNETISMO: UM ESTUDO SOBRE TRANSIÇÕES
DE FASE, ORDENAMENTO TOPOLÓGICO E SEUS
EFEITOS EM SPINTRÔNICA**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

Orientador: Winder Alexander de Moura Melo

Coorientador: Antônio Ribeiro de Moura

VIÇOSA – MINAS GERAIS
2021

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

L864n
2021
Lopes, Ricardo Junior Campos, 1992-
Nanomagnetismo: um estudo sobre transições de fase,
ordenamento topológico e seus efeitos em spintrônica / Ricardo
Junior Campos Lopes. – Viçosa, MG, 2021.
1 tese eletrônica (87 f.): il. (algumas color.).

Orientador: Winder Alexander de Moura Melo.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2021.

Referências bibliográficas: f. 79-87.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2021.214>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Magnetismo. 2. Materiais bidimensionais.
3. Transformações de fase (Física estatística). I. Melo, Winder
Alexander de Moura, 1973-. II. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física
Aplicada. III. Título.

CDD 22. ed 538

Bibliotecário(a) responsável: Renata de Fátima Alves CRB6/2578

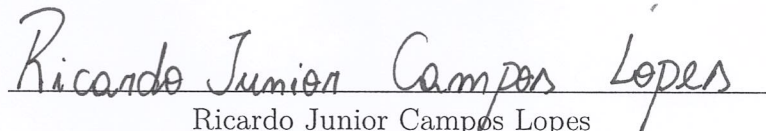
RICARDO JUNIOR CAMPOS LOPES

NANOMAGNETISMO: UM ESTUDO SOBRE TRANSIÇÕES
DE FASE, ORDENAMENTO TOPOLOGICO E SEUS
EFEITOS EM SPINTRÔNICA

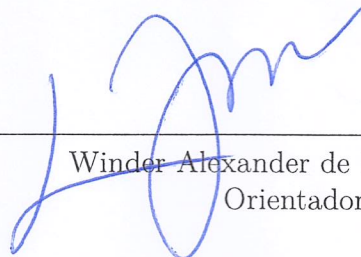
Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 07 de outubro de 2021.

Assentimento:



Ricardo Junior Campos Lopes
Autor



Winder Alexander de Moura Melo
Orientador

*Aos meus Pais,
Mario e Maria.*

AGRADECIMENTOS

Um grande agradecimento a todos os professores do Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, em especial;

Ao Professor Winder A. de Moura-Melo por sua brilhante orientação, liberdade de discussão e trabalho, bem como sua constante disponibilidade em ajudar naquilo que se fizesse necessário a qualquer momento;

Ao Professor Antônio R. de Moura por sua também brilhante e incansável orientação, sempre disposto a discutir sobre trabalho e resultados, a qualquer dia e qualquer horário;

Ao Professor Afrânio R. Pereira pelas inúmeras discussões e ensinamentos sobre Física e política;

Aos Professores Silvio Jr. e Daniel Franco, os quais ministraram a maior parte dos cursos referentes à minha formação, em especial a parte matemática e computacional, sempre exigindo o maior rigor necessário à boa execução de qualquer trabalho e, também, sempre solícitos ao diálogo;

Aos Professores Rodrigo e Ricardo, lotados na UFES São Mateus, pelas diversas colaborações em alguns trabalhos desenvolvidos ao longo de meu mestrado e doutorado;

Ao Professor Lucas Mól, lotado na UFMG, por ser o primeiro a me orientar nessa caminhada e me ajudar enormemente nos meus passos iniciais na Física.

Um profundo agradecimento aos meus Pais, Mario e Maria, que sempre me apoiaram em minhas escolhas e decisões, sempre curiosos com o andamento e desenvolvimento do curso e da pós-graduação.

Um grande agradecimento ao meu irmão Carlos, que sempre me ajudou naquilo que fosse necessário para a melhor realização do curso, da graduação ao doutorado.

Um grande agradecimento à Juliana, minha companheira há 10 anos, sempre me incentivando e ajudando naquilo que fosse necessário.

Um grande agradecimento à Pedro e Mariana. Pela inabalável amizade de décadas (é, estamos ficando bem velhos). *‘Tamo Junto’*

Pela também amizade de décadas, meu agradecimento à Mateus, inquestionavelmente o melhor baterista deste país.

Um grande agradecimento ao Nathann e Ismael, pelas diversas discussões, algumas inclusive acaloradas, sobre os mais diversos temas, principalmente na salinha da Pós-

Graduação. Saibam que cada uma dessas discussões me ajudou enormemente em meu processo de formação.

Um grande agradecimento ao Erik Procópio, pelas constantes discussões sobre Física e pelas diversas ajudas, em especial, nas dúvidas com a língua inglesa.

Um grande agradecimento ao José Roberto de Toledo, pelas diversas discussões sobre Física desde nosso primeiro semestre no curso bem como pelas diversas horas de gargalhadas.

Um grande agradecimento ao Mestre Paulo, pelas constantes discussões sobre Física e pelas diversas ajudas, em especial, nas dúvidas com o LaTeX.

Um agradecimento à todos os funcionários e ex-funcionários do Departamento de Física.

À Universidade Federal de Viçosa, pela oportunidade de realizar a pós-graduação.

Meu agradecimento à CAPES. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Meu agradecimento ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo aporte financeiro na compra de equipamentos e computadores para o Núcleo de Simulação do Departamento de Física e por eventuais reembolsos para participação em eventos e congressos científicos.

Meu também agradecimento ao Google e à equipe do Google Drive, que foram extremamente solícitos em um momento crítico do meu doutorado.

Um agradecimento a todos que fizeram e fazem parte desta jornada e que aqui não foram citados.

“Is the purpose of theoretical physics to be no more than a cataloging of all the things that can happen when particles interact with each other and separate? Or is it to be an understanding at a deeper level in which there are things that are not directly observable (as the underlying quantized fields are) but in terms of which we shall have a more fundamental understanding?”

(Julian Schwinger in Quantum Mechanics - Symbolism of Atomic Measurements (2001) pag. 24)

RESUMO

LOPES, Ricardo Junior Campos, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, outubro de 2021. **Nanomagnetismo: Um estudo sobre transições de fase, ordenamento topológico e seus efeitos em spintrônica.** Orientador: Winder Alexander de Moura Melo. Coorientador: Antônio Ribeiro de Moura.

Na presente tese, desenvolvemos diversos trabalhos cujo foco central é o estudo de sistemas nanomagnéticos (ou magneticamente nano estruturados) em sua grande maioria bidimensionais ou quasi-bidimensionais. Em nosso caso, os sistemas quasi-bidimensionais são compostos por camadas bidimensionais fracamente acopladas entre si. Os estudos perpassam desde a descrição e caracterização de transições de fase magnéticas, ordenamento topológico, excitações coletivas em regimes de baixa energia, dinâmica de spins e de domínios magnéticos e spintrônica mediada por magnons (também conhecida como magnônica). Dentro dos temas supracitados, pudemos descrever a influência de uma transição de fase topológica do tipo BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) no processo de injeção de correntes de spin em junções compostas por metais normais e ferromagnetos isolantes, observando um efeito switch térmico nesta injeção na exata temperatura em que o material sofre a transição de fase, além de observarmos o efeito de saturação do processo de injeção da corrente de spins bem como a grande acurácia na obtenção da temperatura de transição para sistema reais [1]. Também descrevemos a possível extinção de uma transição de fase BKT em sistemas magnéticos com interações diagonais [2]. Por fim, observamos a cíclica conversão entre diferentes excitações topológicas do tipo Skyrmion [3].

Palavras-chave: Nanomagnetismo. Bidimensional. Transição de fase. Excitações coletivas

ABSTRACT

LOPES, Ricardo Junior Campos, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, October, 2021. **Nanomagnetism: A study of phase transitions, topological ordering, and their effects on spintronics.** Adviser: Winder Alexander de Moura Melo. Co-Adviser: Antônio Ribeiro de Moura.

In this thesis, we develop several works whose central focus is the study of nanomagnetic (or magnetically nanostructured) systems, which are mostly two-dimensional or quasi-two-dimensional. In our case, quasi-two-dimensional systems are composed of layered two-dimensional systems that are weakly coupled. The studies vary from the description and characterization of magnetic phase transitions, topological ordering, collective excitations in low energy regimes, dynamics of spins and magnetic domains, and magnon-mediated spintronics (also known as magnonics). Within the aforementioned topics, we were able to describe the influence of a BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) topological phase transition in the spin current injection process in junctions composed of normal-metals and insulating-ferromagnets, observing a thermal switch effect in this injection at the exact temperature the material undergoes the phase transition, as well as the saturation effect of the spin current injection process, together with the great accuracy in obtaining the transition temperature for real systems [1]. We also describe the possible extinction of a BKT phase transition in magnetic systems with diagonal interactions [2]. We observe the cyclic conversion between different topological excitations of the Skyrmion-type [3].

Keywords: Nanomagnetism. Two-dimensional. Phase transition. Collective excitation

LISTA DE FIGURAS

1.1	Representação gráfica de uma onda de spin.	19
1.2	Representação gráfica de um vórtice em um sistema magnético.	19
1.3	Representação gráfica de um Skyrmion em um sistema magnético	20
2.1	Diagrama representando a injeção de magnons	24
2.2	Estrutura de camadas do K_2CuF_4	27
2.3	Decomposição em coord. cilíndricas para o spin	28
2.4	Processo esquemático para injeção de corrente de spin	31
2.5	Corrente de spin vs. Temperatura	35
2.6	Corrente de spin vs. Potencial Químico	36
3.1	Rede Checkerboard	47
3.2	Correções a 2-loops	50
3.3	Energia do núcleo do vórtice E_c vs η	53
3.4	Temperatura reduzida da transição BKT t_{BKT} vs η	54
3.5	η_c vs D	55
3.6	Energia do núcleo do vórtice E_c vs D	56
3.7	Temperatura reduzida t_{BKT} vs D^{-1}	57
4.1	Configurações de skyrmion para diferentes condições de fronteira.	67
4.2	Energia do Skyrmion em função de $1/L$	68
4.3	Tamanho do skyrmion $R(t)$ vs. tempo de simulação t	68
4.4	Componente z do spins (a) para dois instantes de tempo distintos bem como a configuração inicial (b) da textura 2CS utilizada na simulação.	70

SUMÁRIO

1. Introdução	12
1.1 Física da Matéria Condensada	13
1.2 Modelo de Heisenberg	16
1.2.1 Ondas de Spin ou Magnons	19
1.2.2 Vórtices	19
1.2.3 Skyrmions	20
1.3 Transições de Fase	20
1.4 Transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless	22
2. Efeitos da transição BKT na injeção de correntes de spin em junções NM/FI	23
2.1 Métodos	25
2.1.1 Termo condutor não-magnético	26
2.1.2 Termo ferromagnético isolante	26
2.1.3 Termo de Interação entre camadas	30
2.1.4 Corrente de Spin	31
2.2 Resultados	35
2.3 Conclusões	37
3. Possível extinção da uma transição BKT por interação diagonais em uma rede checkerboard.	47
3.1 Métodos	48
3.1.1 Tratamento Teórico	48
3.1.2 Simulação Computacional	51
3.2 Resultados	53
3.3 Conclusões	58
4. Skyrmions e Merons em sistemas antiferromagnéticos bidimensionais	66
4.1 Resultados e Conclusão	68
4.1.1 Energia do Skyrmion 2CS	68
4.1.2 Colapso de Skyrmions 2CS	68

4.1.3	Conversão de Skyrmions 2CS em 1CS	69
5.	Considerações Finais	76
	Bibliografia	79

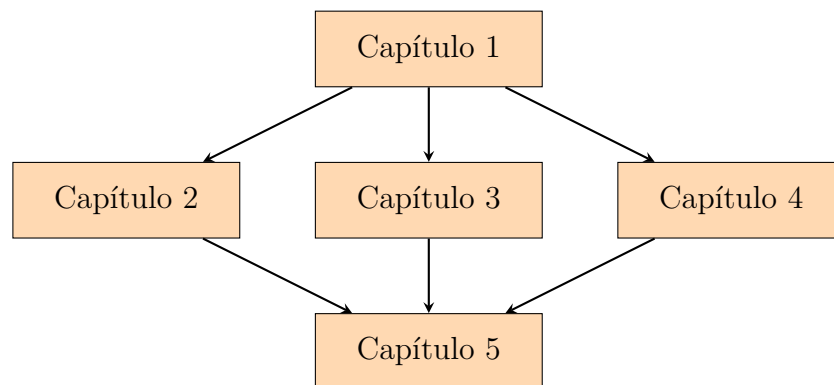
Capítulo 1

Introdução

O foco central desta tese reside no estudo e descrição de sistemas magnéticos micro- ou nanoestruturados, ou seja, cujas dimensões espaciais não ultrapassem poucos micrômetros ou frações de micrômetro. Além disso, damos grande atenção a sistemas magnéticos com baixa dimensionalidade onde, na maioria das situações, podemos considerar que os sistemas são bidimensionais ($2D$) ou quasi-bidimensionais ($q2D$). Ao longo dos capítulos e seções subsequentes, descreverei diversos trabalhos desenvolvidos ao longo deste doutorado, que compreendem temas que vão desde a descrição de transições de fase até a dinâmica de domínios e excitações magnéticas. Também descreverei alguns dos métodos utilizados e desenvolvidos ao longo deste período. Apesar do amplo espectro de problemas rapidamente resumido anteriormente, todos estes problemas compartilham um simples, porém poderoso, tipo de interação, a interação de troca de Heisenberg, $J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, que permeará e nos condizirá ao longo de todos os trabalhos.

No restante desta introdução, descreverei o campo do magnetismo sob o prisma da física da matéria condensada, ou seja, focando principalmente em sistemas de muitos corpos, bem como darei descrições gerais sobre métodos numéricos e computacionais recorrentemente utilizados nesta tese. Os demais capítulos serão escritos em formato de "*artigo fechado*", ou seja, cada capítulo será um artigo desenvolvido ao longo do doutorado. Ao longo do cap.[2], discutiremos a influência de uma transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) no processo de injeção de corrente de spin (em nosso caso, tal corrente de spins será mediada via magnons) em um ferromagneto isolante quasi-bidimensional, levando ao cancelamento da corrente de spin injetada no sistema, acima da temperatura crítica da transição BKT, além de observamos a saturação no processo de injeção desta corrente [1]. No cap.[3], estudamos a possível extinção de uma transição BKT devido à interações diagonais em uma rede checkerboard (rede obtida a partir da planificação de uma rede pirocloro) [2]. Por fim, no cap.[4], estudamos skyrmions formados por dois

merons (também chamados de skyrmions de dois núcleos) em sistemas antiferromagnéticos. Além da interação e aniquilação destas estruturas por defeitos da rede, mostramos a conversão do skyrmion de dois núcleos em skyrmion de apenas um núcleo através da aplicação de campos externos [3]. Desta forma, após a Introdução, os capítulos podem ser lidos em qualquer ordem sem perda de contexto ou generalidade por se tratarem de artigos já publicados em periódicos, de forma que a próxima convergência entre os capítulos se dará no último capítulo, referente às conclusões, como representado diagramaticamente abaixo.



1.1 Física da Matéria Condensada

Sob linhas gerais, esta tese encontra-se imersa no campo da Física da Matéria Condensada, que pode ser definida como o estudo do comportamento de grandes coleções de partículas, em um regime onde estas não estejam se movendo muito rápido e nem encontrem-se em altíssimas temperaturas. Ao dizermos "*grandes coleções*", estamos em geral tratando sistemas que possuem aproximadamente 10^{23} partículas¹. Para efeitos práticos, sistemas desta ordem de grandeza são considerados como infinitos e recorrentemente chamaremos este regime de limite termodinâmico. Estas partículas podem ser moléculas, átomos ou até elétrons.

Dado o amplo espectro anteriormente descrito para a Física da Matéria Condensada, torna-se fácil notar que a mesma engloba diversas áreas da Física em geral, passando pela física do estado sólido, ciência de materiais, ótica, estudo de transições de fase, dentre outros. A Física da Matéria Condensada fornece o ferramental para descrever e responder questões como: Por que determinados materiais apresentam magnetização espontânea à

¹De maneira um pouco mais rigorosa, estamos lidando com números da ordem da constante de Avogadro que é aproximadamente igual à 6.022×10^{23} .

temperatura ambiente? Como se dá a transição entre as fases líquida e sólida de um mesmo material? Por que determinados materiais apresentam supercondutividade/superfluidade em baixas temperaturas? Como explicar o efeito Hall quântico? Como aumentar a densidade de transistores em um processo litográfico, fabricando assim, melhores e mais rápidos processadores?² Dentre um infinidade de outras perguntas que envolvam o comportamento coletivo em sistemas de muitos corpos.

Apesar da necessidade de, em muitas das situações descritas acima, ser necessário um profundo conhecimento das leis de força fundamentais entre os átomos e moléculas que compõem o sistema, grandes coleções de partículas interagentes podem apresentar **fenômenos emergentes**, que em sua maioria não são consequências diretas das leis fundamentais que descrevem o comportamento de seus entes mais fundamentais. Como brilhantemente descrito por P. W. Anderson, em seu trabalho *More is Different* [4];

*"A habilidade em reduzir tudo a simples leis fundamentais não implica na habilidade em iniciar destas mesmas leis e reconstruir o universo. De fato, quanto mais os físicos de partículas nos dizem sobre a natureza das leis fundamentais, menos relevância elas parecem ter para o restante dos reais problemas da ciência, muito menos para aqueles da sociedade.(...) esta hierarquia não implica que a ciência X é "apenas Y aplicado". Em cada estágio, inteiramente novas leis, conceitos e generalizações são necessárias, requerendo inspiração e criatividade em um grau tão grande quanto no estágio anterior. Psicologia não é biologia aplicada, nem biologia é química aplicada."*³ Tradução livre realizada por Ricardo J. C. Lopes.

Esta afirmação de P. W. Anderson é intimamente relacionado ao conceito de decidibilidade em matemática. Sob linhas gerais, como mostrado por Kurt Gödel [5,6], é possível demonstrar que a matemática é indecidível, ou seja, não existe nenhum algoritmo capaz de determinar se dada afirmação ou comportamento é derivável de seus axiomas. Uma das implicações práticas deste teorema é que, mesmo que conheçamos todos os detalhes microscópicos de um problema, bem como as leis físicas que os regem, somos incapazes de auferir se determinado comportamento ocorrerá ou não neste sistema. Um belíssimo e elegante exemplo deste problema é mostrado no artigo [7] onde os autores mostram que o problema do gap espectral, em mecânica quântica de muitos corpos, é indecidível.

Ao longo desta tese, nos depararemos com diferentes fenômenos emergentes, que vão

²Este exemplo foi intencionalmente colocado para mostrar como a física da matéria condensada está amplamente presente no dia-a-dia, em especial no desenvolvimento tecnológico.

³*The ability to reduce everything to simple fundamental laws does not imply the ability to start from those laws and reconstruct the universe. In fact, the more the elementary particle physicists tell us about the nature of the fundamental laws, the less relevance they seem to have to the very real problems of the rest of science, much less to those of society. (...) this hierarchy does not imply that science X is just applied Y. At each stage entirely new laws, concepts, and generalizations are necessary, requiring inspiration and creativity to just as great a degree as in the previous one. Psychology is not applied biology, nor is biology applied chemistry.* - citação original presente em [4].

desde transições de fase até diversas excitações coletivas, como magnons, vórtices, skyrmions e merons. Apesar de algumas destes fenômenos guardarem fortes semelhanças com contrapartes presentes em teorias mais fundamentais (a exemplo do skyrmion em modelos que descrevem campos em interações nucleares [8, 9]), muitos dos fenômenos emergentes são extremamente difíceis de se prever, partindo apenas das leis fundamentais de interação. Um exemplo trata-se da ocorrência de transições de fase onde simetrias, muitas vezes presentes nas leis fundamentais de interação do sistema, são espontaneamente quebradas, levando a comportamentos que independem dos detalhes microscópicos do sistema.

Apesar de já termos enfatizado em alguns momentos do texto até aqui, é importante ressaltar que, tamanha riqueza em detalhes e comportamentos não seria possível de se observar em sistemas não-interagentes. O comportamento de regimes idealizados onde as partículas não interagem entre si, como o gás ideal e o paramagneto ideal por exemplo, podem ser estudados e explicados a partir do comportamento e dinâmica de uma única partícula. Isso se resume no fato da função de partição de sistemas não-interagentes poder ser escrita à partir da função de partição de uma única partícula do sistema, ou seja, $\mathcal{Z}_{sistema} = (\mathcal{Z}_1)^N$, onde \mathcal{Z}_1 é a função de partição de uma única partícula e N é o número total de partículas [10].

Já no caso em que as partículas podem interagir entre si, o problema torna-se muito mais complicado além de raramente ser solúvel. Tomemos como exemplo, um sistema composto por N -elétrons que interagem via lei de força de Coulomb. Este sistema possui um total de $3N$ equações de movimento acopladas, uma vez que a equação de movimento para um elétron depende da posição dos $(N-1)$ elétrons restantes. Como é bem conhecido na literatura [11](p.121-126), sistemas com três ou mais corpos, interagindo via lei de força dependente do inverso do quadrado da distância, não possuem nenhuma solução geral conhecida, tendo apenas soluções particulares. E aqui, cabe-nos ressaltar que, mesmo se houvesse soluções para problemas de muitos corpos interagentes, isto não é uma garantia de que tal solução seja prática e/ou útil. Desta forma, para estudarmos os fenômenos emergentes presentes nesta tese, será de extrema importância a descrição destes fenômenos bem como de diversas excitações coletivas, como veremos ao longo das próximas seções.

1.2 Modelo de Heisenberg

Ao longo do tempo, diversos modelos e teorias para explicar fenômenos magnéticos foram criados. Um dos mais proeminentes e conhecidos trata-se do modelo de Heisenberg, descrito pelo Hamiltoniano abaixo;

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

onde \vec{S}_i representa o spin (ou operador de spin) localizado na posição i , J_{ij} fornece a intensidade da interação entre os spins i e j e $\langle i, j \rangle$ denota que esta interação ocorre apenas entre os primeiros vizinhos em uma rede. Este modelo também é conhecido como modelo da interação de troca. Para $J_{ij} > 0$, temos uma interação que favorece a orientação antiferromagnética dos spins enquanto para $J_{ij} < 0$ temos o favorecimento à configurações ferromagnéticas.

Uma das razões para a ampla difusão deste modelo, deu-se pela sua capacidade em prever temperaturas de transições magnéticas da ordem de centenas de Kelvin, fato este que apenas a interação dipolar entre os spins eletrônicos é incapaz de obter dado que esta interação é extremamente fraca ($\sim 10^{-5} eV$ ou $< 1K$). Apesar de não demonstrarmos aqui, uma vez que este é um tema amplamente difundido na literatura [12–19], os principais mecanismos que dão origem à interação de troca, podem ser obtidos das seguintes propriedades do elétron: (i) O spin do elétron, (ii) Princípio de exclusão de Pauli, (iii) Repulsão Coulombiana entre os elétrons e, (iv) Delocalização eletrônica. Sob linhas gerais, elétrons cujas funções de onda estão espacialmente localizadas, sobrepondo-se, e que estão interagindo repulsivamente (interação de Coulomb) terão acoplamento magnético do tipo ferromagnético se suas funções de onda forem ortonormais e estiverem ocupando aproximadamente a mesma região do espaço, desta forma, o alinhamento dos spins reduz a energia total da interação e, terão acoplamento antiferromagnético se suas funções de onda não forem ortonormais, de forma que o princípio de exclusão de Pauli impede a formação de um estado cujos spins estejam alinhados, logo, o anti-alinhamento dos spins reduz a energia total da interação.

Em diversas ocasiões, a intensidade de J_{ij} é praticamente constante, de tal forma que podemos desprezar suas pequenas flutuações no espaço e assumir um valor constante para

o mesmo, deixando o Hamiltoniano anterior da seguinte forma;

$$H = \pm |J| \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad , \quad (1.2)$$

entretanto, este hamiltoniano pode apresentar-se de diversas formas à depender das propriedades e valores de J_{ij} . Alguns exemplos, principalmente associados a esta tese, mas não limitados à mesma, estão listados à baixo:

(i) Hamiltonianos com interações espacialmente anisotrópicas:

Neste caso, a interação entre os primeiros vizinhos em determinada direção espacial pode diferir das demais. Um caso particular é para $J_{ij}^x = J_{ij}^y \neq J_{ij}^z$.

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{xy} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^z \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.3)$$

Este tipo de fenômeno pode ocorrer, por exemplo, em sistemas cujo parâmetro de rede é diferente para direções espaciais distintas. Um modelo similar foi utilizado no trabalho referente ao PRB **102** 184422 (2020) [1] que será apresentado no cap.2.

(ii) Hamiltonianos com interações entre primeiros e segundos vizinhos:

Aqui, a interação também ocorrerá entre sítios mais afastados em uma rede e é geralmente representada da seguinte forma:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J'_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad , \quad (1.4)$$

onde $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ denota que está interação ocorre apenas entre os segundos vizinhos em uma rede. Em sua grande maioria, as constantes J_{ij} e J'_{ij} são diferentes entre si, sendo a constante de interação entre primeiros vizinhos comumente maior que a constante de interação entre os segundos. Um modelo similar foi utilizado no trabalho referente ao PLA **382** 1492 (2018) [2] que será apresentado no cap.3.

(iii) Hamiltoniano de Haldane-Shastry [20, 21]:

Trata-se de um modelo de Heisenberg antiferromagnético com interações de troca de longo alcance do tipo $1/r^2$.

$$H = |J| \sum_{i \neq j} \frac{1}{(x_i - x_j)^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad . \quad (1.5)$$

Dentre suas características, este modelo é completamente integrável além de suas energias e autoestados serem exatamente computáveis.

(iv) Hamiltoniano com spins na presença de um campo externo:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i \vec{B}_i^{ext} \cdot \vec{S}_i \quad (1.6)$$

Campos externos podem ser usados com diversos propósitos em sistemas magnéticos, que vão desde o controle da magnetização de domínios magnéticos específicos, como por exemplo, em discos rígidos magnéticos, o estudo da dinâmica de spins e até o estudo de histerese em sistemas magnéticos. O Hamiltoniano na presença de campo externo exige apenas a adição de um termo de interação tipo Zeeman, como mostrado no Hamiltoniano da eq.1.7 acima. A presença de campos externos será recorrente nos trabalhos apresentados nos capítulos seguintes.

(v) Hamiltoniano biquadrático [22–26]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \right] \quad (1.7)$$

O termo biquadrático pode ser obtido como uma correção em segunda ordem na expansão da interação de troca, e por isso, é geralmente considerado menor que sua contraparte bilinear. A depender da razão entre as constantes J_1 e J_2 , as propriedades obtidas deste modelo se assemelham muito às obtidas no modelo de Heisenberg usual. Entretanto, de uma forma geral, este modelo apresenta uma grande riqueza de detalhes bem como um amplo diagrama de fases para seus estados fundamentais.

Existe ainda uma grande quantidade de modelos correlatos catalogados e descritos na literatura, cada qual com suas propriedades e especificidades e que não cabem a sua descrição aqui. Contudo, pudemos ter um pequeno vislumbre do quão rico e amplo é o modelo de Heisenberg e suas variações.

1.2.1 Ondas de Spin ou Magnons

Como mostrado por Bloch [28, 29], os estados de mais baixa energia em sistemas de spin que interagem via interação de troca, possuem comportamento ondulatório e são chamadas de ondas de spin. Como mostrado na figura ao lado, essas ondas são resultado de um comportamento coletivo dos spins e/ou momentos magnéticos do sistema. No regime quantizado, tais ondas de spin são chamadas de magnons e têm caráter de uma quasipartícula bosônica, semelhante ao que ocorre com os fônons que surgem devido às vibrações de uma rede cristalina. Desde a sua previsão e descrição, o estudo e a detecção direta e indireta de magnons tem ocorrido nos mais diversos sistemas de spin, desde os ordenados, como em sistemas ferromagnéticos [30, 31], antiferromagnéticos [32, 33], ferrimagnéticos [34] e até em sistemas desordenados, como é o caso dos paramagnetos [35, 36].

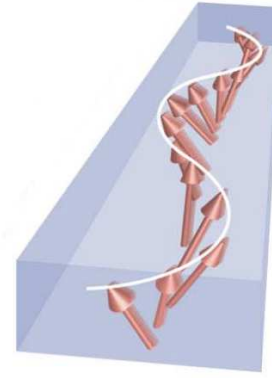


Figura 1.1: Representação gráfica de uma onda de spin. Figura extraída e adaptada de [27].

1.2.2 Vórtices

Em um sistema magnético planar e com simetria interna $O(2)$, vórtices são defeitos topológicos que não podem ser continuamente deformados até um estado fundamental onde todos os spins estejam uniformemente alinhados e, por isso, dizemos que vórtices são estruturas topologicamente protegidas. O invariante topológico associado aos vórtices é chamado de vorticidade e basicamente conta o número de vezes que os spins executam uma volta completa em torno do centro do vórtice. Na figura acima, temos um exemplo de vórtices em um sistema composto por domínios magnéticos [38–43]. Vórtices serão de suma importância no entendimento da transição BKT que discutiremos na seção 1.4 à frente.

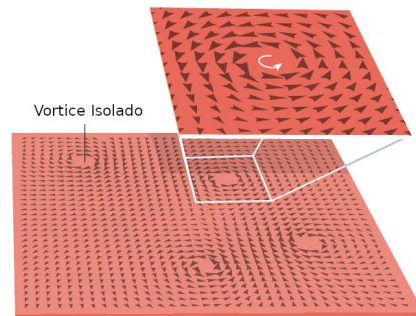


Figura 1.2: Representação gráfica de um vórtice em um sistema de domínios magnéticos. Figura extraída, traduzida e adaptada de [37].

1.2.3 Skyrmions

Historicamente, os skyrmions surgiram como soluções não-lineares em modelos efetivos de campos utilizados na descrição do núcleo atômico. Sua proposição inicial veio do físico T. H. R. Skyrme [45, 46]. Já em magnetismo e matéria condensada, soluções do tipo skyrmion foram posteriormente descritas por Belavin e Polyakov [47] (sendo por vezes chamado de sóliton de Belavin-Polyakov) e posteriormente foram observados experimentalmente [48–50]. Similarmente aos vórtices, skyrmions também são soluções topologicamente estáveis, o que nos impede de continuamente deformá-los para outros estados com diferentes cargas topológicas. Como no caso da Figura 1.3, soluções do tipo skyrmion podem ser obtidas via mapeamento estereográfico da esfera de spins no plano real.

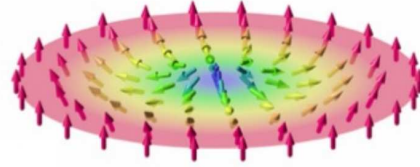


Figura 1.3: Representação gráfica de um Skyrmion em um sistema de domínios magnéticos. Figura extraída de [44].

1.3 Transições de Fase

Transição de fase [51–54] é um dos principais fenômenos emergentes em sistemas compostos por grande número de entes interagentes. Comumente, transições de fase estão presentes em nosso dia-a-dia, como na transição da água líquida para gasosa pelo processo de ebulição, ou na transição do gelo da água para seu estado líquido através do processo de fusão. É fácil notar que em algum momento as fases sólida, líquida e gasosa da água sofreram uma transição entre si, daí o nome, transição de fase. Outro exemplo cotidiano são os ímãs, como os utilizados em geladeiras e estantes metálicas. Estes ímãs são geralmente compostos por ligas metálicas em um estado ferromagnético e por isso são capazes de atraírem e grudarem em outras superfícies metálicas. Este regime ferromagnético pode ser destruído através do simples aquecimento deste ímã, levando-o a um estado paramagnético, ou seja, sem magnetização.

De modo geral, as transições de fase andam paralelamente ao conceito de quebra espontânea de simetria. Tomemos como exemplo um líquido. As moléculas presentes em um líquido como a água estão completamente dispersas em seu meio, sem nenhuma ou quase nenhuma correlação entre si. A posição de uma molécula não fornece informações

suficientes sobre a posição das demais. Este é, portanto, um sistema com uma simetria translacional e rotacional contínua. Ao resfriarmos este líquido e o passarmos para sua fase sólida, as moléculas presentes no sólido passam a compor uma estrutura ordenada, de forma que saber a posição de uma molécula passa a nos fornecer informações sobre as demais dentro desta estrutura. Neste caso, dizemos que a simetria translacional e rotacional foi espontaneamente quebrada e como consequência, surgiram correlações e ordem de longo alcance neste sistema.

Estas mudanças qualitativas nas propriedades do sistema são em geral caracterizadas por singularidades da energia livre deste sistema. A ordem derivacional destas singularidades são utilizadas como critério de classificação da transição de fase. Sistemas cuja primeira derivada da energia livre com respeito a alguma variável termodinâmica apresenta uma descontinuidade são denominadas transições descontínuas (ou transições de primeira ordem). Estas transições são caracterizadas pela absorção ou liberação de grande quantidade de energia, denominado calor latente, enquanto a temperatura mantém-se constante no ponto crítico em que ocorre a transição e, durante este processo, existe a coexistência entre as fases. Os exemplos mais comuns de transições descontínuas são as transições sólido-líquido e líquido-gás. Outra classificação para as transições, diz respeito a sistemas cuja segunda derivada da energia livre com respeito a alguma variável termodinâmica apresenta uma descontinuidade ou divergência. Estas transições são denominadas contínuas (ou transições de segunda-ordem). Próximo ao ponto crítico de ocorrência desta transição, é característica a existência de decaimentos em lei de potência das correlações do sistema e no ponto crítico de transição, a divergência das susceptibilidades e do comprimento de correlação são assinaturas deste tipo de transição. Exemplos comuns de transições contínuas são a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética em alguns materiais, a transição superfluida e a transição para supercondutores tipo-I na ausência de campo magnético externo.

Por fim, mas não menos importante, devemos retornar à primeira frase desta seção para enfatizarmos e termos a clareza que transições de fase são um fenômeno emergente e ocorrem exclusivamente em sistemas no limite termodinâmico. Ao olharmos para a função de partição de um sistema, dada por:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-E_i/k_B T} \quad , \quad (1.8)$$

fica claro que a mesma é uma função analítica da temperatura e, nenhuma quebra espontânea de simetria do hamiltoniano original do sistema, bem como nenhuma singularidade das funções termodinâmicas oriundas da função de partição podem ser obtidas para sistemas finitos. Uma elegante análise do surgimento de anomalias na função de partição à medida em que o sistema se aproxima do limite termodinâmico foi elaborada por Lee-Yang [55,56] e por Michael E. Fisher [57] através da análise dos zeros da função de partição no plano complexo das temperaturas para os casos gran-canônico e canônico respectivamente.

1.4 Transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

Segundo o teorema de Mermin-Wagner: “*Não existe quebra espontânea de uma simetria contínua para sistemas com interações de curto alcance em dimensões $D \leq 2$* ”. Isto implica que, para sistemas que satisfaçam tais critérios de interação e dimensionalidade, as classificações e definições de transições de fase comentadas anteriormente são inválidas. Entretanto, como mostrado por V. L. Berezinskii [58,59] e por J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless [60], estes sistemas ainda apresentam dois regimes distintos. O primeiro regime, a altas temperaturas, onde o sistema encontra-se completamente desordenado e com correlações decaindo exponencialmente. O segundo regime, a baixas temperaturas, ainda desordenado mas com correlações que decaem segundo uma lei de potência. A este segundo regime dizemos que possui uma “*ordem de quase-longo alcance*”. Esta é a chamada transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless ou somente transição BKT e a temperatura em que ela ocorre é denominada T_{BKT} . Como originalmente mostrado em [60] para um modelo rotor planar⁴ e para superfluidos neutros, o mecanismo responsável pela existência destes dois regimes trata-se da dissociação de pares de vórtice-antivórtice no sistema. Em baixas temperaturas, $T < T_{BKT}$, os pares vórtice-antivórtice mantêm-se ligados conferindo ao sistema o regime de ordem de quase-longo alcance. À medida que a temperatura aumenta, estes pares se dissociam até que para $T > T_{BKT}$, estes pares dissociados levam o sistema à completa desordem.

⁴O modelo rotor planar é caracterizado por dimensão $D = 2$ e simetria interna $O(2)$, ou seja, $\vec{S} = (S_x, S_y)$ cuja hamiltoniana de interação é dada por: $H_{rp} = \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^{(x)} S_j^{(x)} + S_i^{(y)} S_j^{(y)})$. Originalmente, Kosterlitz e Thouless chamavam o modelo de modelo- xy . Entretanto, tal nomenclatura é atualmente utilizada para sistemas com dimensão $D = 2$ e simetria interna $O(3)$, $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ e cuja hamiltoniana de interação é dada por $H_{xy} = \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^{(x)} S_j^{(x)} + S_i^{(y)} S_j^{(y)})$

Capítulo 2

Efeitos da transição BKT na injeção de correntes de spin em junções NM/FI

Este trabalho encontra finalizado e publicado em PRB 102 184422
2020 [1]. Uma cópia está anexada ao final do capítulo.

Por muitos anos, o foco da indústria de eletrônicos esteve exclusivamente nas propriedades elétricas de condutores e semi-condutores, de tal forma que a manipulação e a geração de correntes elétricas atualmente tornou-se uma tarefa completamente trivial. Contudo, elétrons também possuem um momento magnético intrínseco, o spin. Sendo assim, torna-se natural imaginarmos a exploração do spin eletrônico como mais um grau de liberdade na propagação de correntes elétricas, aumentando assim a densidade de informação contida em correntes de dispositivos eletrônicos [61].

A utilização do spin eletrônico como forma de propagar informação constitui uma parcela da então chamada spintrônica. Em resumo, a spintrônica é o estudo do fluxo do spin eletrônico, bem como de outros momentos magnéticos, e do desenvolvimento e aplicação a dispositivos que utilizem este fluxo. Nos últimos anos, a ciência de materiais tem considerado a spintrônica como um potencial substituto para os atuais dispositivos eletrônicos. Podemos apontar o surgimento da spintrônica, bem como de seu desenvolvimento à forma que a conhecemos atualmente, à três grandes trabalhos da década e de 70 e 80, a citar: Os experimentos de tunelamento em junções magnéticas [62], a observação da injeção de elétrons spin-polarizados entre junções de metais ferromagnéticos e metais isolantes [63] e a descoberta da magnetorresistência gigante [64, 65].

Uma peculiaridade das correntes de spin dá-se ao fato da mesma propagar-se tanto em materiais condutores quanto em materiais isolantes, podendo cada um destes ser magnético ou não-magnético. Isto torna o leque de aplicações extremamente amplo, alguns exemplos vão desde a construção de diodos de spin, transistors de spin e até

mesmo aplicação em computação quântica, através dos chamados spin qubits (para mais detalhes sobre estas e outras aplicações, vide ref. [66]).

Naturalmente, dada a grande classe de materiais que permitem a propagação de correntes de spin, é de se esperar que existam diferentes formas de propagação além de diferentes mecanismos que gerem tais correntes. Exemplos incluem as correntes de spin puras normalmente associadas a materiais condutores não magnéticos como a platina (*Pt*) e mecanismos de efeito Hall [61, 67, 68], as correntes de carga spin polarizadas associadas principalmente à estrutura cristalina do sistema e a materiais condutores ferromagnéticos como o Permalloy ($Fe_{1-x}Ni_x$) [61, 69] e, as correntes de spin transportadas por ondas de spin (ou magnons em um formalismo quantizado) associadas a materiais isolantes ferromagnéticos, antiferromagnéticos e paramagnéticos [70–75].

Ao longo deste trabalho estaremos interessados na propagação da corrente de spin em materiais ferromagnéticos isolantes (FMI). Um dos mecanismo utilizados para se criar correntes de spin em materiais FMI é o chamado *spin pumping*, que utiliza da Ressonância Ferromagnética para induzir a criação de magnons no sistema [76].

Outra forma de induzir a criação de correntes de spin é através da utilização de junções entre materiais Ferromagnéticos Isolantes e metais Condutores Não-Magnéticos (NM), onde na parte NM é induzido um desequilíbrio entre os potenciais químicos para os elétrons com spin up μ_{\uparrow} e down μ_{\downarrow} ($\Delta\mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} \neq 0$). Uma das maneiras de se criar esta diferença $\Delta\mu$ é através do efeito Hall de spin [71] (neste

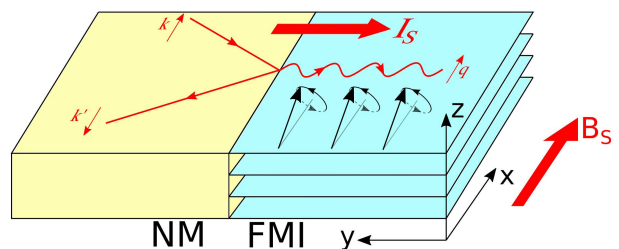


Figura 2.1: Diagrama a injeção de magnons em uma junção NM/FMI devido ao desequilíbrio entre elétrons up e down.

caso, $\Delta\mu$ estará associado com a voltagem de polarização da parte NM). Como os elétrons do setor não são capazes de penetrar no FMI, eles são refletidos na interface entre os materiais, onde ocorre a inversão do spin (no caso em que $\Delta\mu > 0$ a criação de elétrons down é favorecida). Neste processo, por conservação do momento angular, uma excitação com spin inteiro é emitida (ou absorvida) na parte FMI. Em nosso caso, tal excitação trata-se de um magnon, o quantum de uma onda de spin, que possui spin inteiro. No diagrama acima, temos representado de maneira simplificada tal processo, onde um elé-

tron com spin up e energia ξ_k é refletido na interface com energia $\xi_{k'}$ e inverte o seu spin através da absorção (esquerda) de um magnon com spin down ou emissão (direita) de um magnon com frequência ω_q .

Uma interessante propriedade de correntes de spin transportadas por magnons é a não dissipação via efeito Joule. Contudo, apesar da não dissipação por efeito Joule, efeitos térmicos têm um importante papel na propagação e transmissão de correntes de spin, podendo levar a destruição de estados magnetizados devido à flutuações, impedindo assim, sua propagação. Outro efeito térmico importante na propagação de correntes de spin, trata-se da transição BKT, anteriormente descrita e que possui natureza topológica.

Entretanto, a literatura sobre efeitos térmicos e de transições de fase na propagação de correntes de spin é extremamente escassa e, em algumas ocasiões, como no caso da transição BKT, praticamente inexistente. Aqui, propomos o estudo teórico das influências térmicas e em especial, de uma transição BKT na injeção propagação da corrente de spin.

2.1 Métodos

Como estamos interessados nos efeitos de uma transição BKT no processo de injeção de uma corrente de spin em junções NM/FMI precisamos, para uma descrição teórica, de um hamiltoniano que leve em conta os efeitos de ambos os setores da junção (NM e FMI) além de possíveis interações na interface entre estes setores. Desta forma, separamos o Hamiltoniano em três partes

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_m + \hat{\mathcal{H}}_{sd} \quad (2.1)$$

onde \mathcal{H}_e é o Hamiltoniano que descreve os elétrons na parte condutora não-magnética (NM), \mathcal{H}_m descreve o setor ferromagnético isolante (FMI) e \mathcal{H}_{sd} é um hamiltoniano tipo- sd que descreve a interação na interface entre os dois materiais. Além disso, também utilizamos a teoria de resposta linear para obtenção da corrente de spin transmitida na interface.

A seguir, descrevemos separadamente cada termo e procedimento utilizado ao longo do desenvolvimento do trabalho.

2.1.1 Termo condutor não-magnético

Como descrito anteriormente, para este termo consideramos um modelo de elétrons livres com uma diferença de potencial químico que depende da orientação do spin $\mu_{\uparrow,\downarrow}$. No formalismo da segunda quantização [15], o hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_e$ é simplesmente dado por:

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu_\sigma) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.2)$$

onde $c_{k\sigma}$ é um operador fermiônico que aniquila um elétron de momento k e spin σ . Em temperaturas finitas, a propagação do elétron é dada pela função de Green retardada $i\hbar G_{k\sigma}^{\text{ret}}(t) = \theta(t) \langle \{c_{k\sigma}(0), c_{k\sigma}^\dagger(t)\} \rangle$.

2.1.2 Termo ferromagnético isolante

Para que possamos capturar efeitos da transição BKT no processo de injeção da corrente de spin, precisamos de um modelo que seja bidimensional ou quase-bidimensional. Sabendo disso, consideramos um material composto por camadas bidimensionais, fracamente acopladas ao longo da direção- z (direção em que ocorre a injeção da corrente de spin). Este acoplamento em z garante que os magnons possam penetrar o material no processo de injeção da corrente de spin. O hamiltoniano é dado por:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_m = & -J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda_{xy} S_i^z S_j^z) - J^z \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda_z S_i^z S_j^z) \\ & - \mu_B g B_s \sum_i S_i^x \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde J é a interação de troca intraplano, J^z a interação de troca interplanos e B é um campo magnético aplicado ao longo da direção- x . Consideramos em princípio, a existência de duas anisotropias λ_{xy} no plano e λ_z fora do plano. Por fim, o primeiro somatório representa a soma sobre os primeiros vizinhos no plano e no segundo uma soma sobre os primeiros ao longo de z .

A figura ao lado representa o corte lateral da estrutura do Tetrafluorocuprato(II) de Potássio, ou K_2CuF_4 . Este material é amplamente estudado desde a década de 70 [77–80] devido as suas propriedades ferromagnéticas, além de ser um material composto por camadas bidimensionais fracamente acopladas. Devido à tais propriedades, constitui um dos primeiros sistemas magnéticos onde se observou uma transição BKT. Além destas propriedades, o K_2CuF_4 também é um material isolante. Desta forma, o modelo proposto e representado pela eq.(2.3) possui as mesmas propriedades e características magnéticas do K_2CuF_4 , justificando assim, sua utilização.

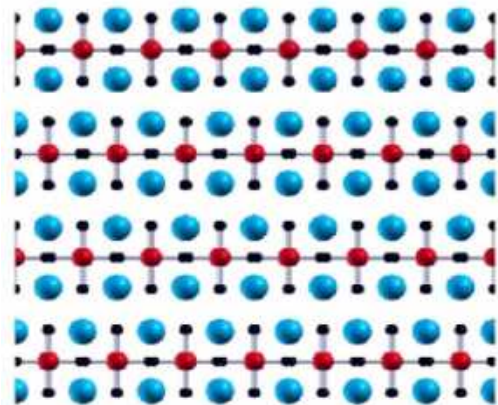


Figura 2.2: Estrutura de camadas do K_2CuF_4 , um material Ferromagnético Isolante com fraco acoplamento entre as camadas.

Vale ressaltar também que dado os diversos estudos experimentais sobre o K_2CuF_4 , o mesmo encontra-se muito bem caracterizado. Assumindo $k_B = 1$, as constantes de acoplamento intra e interplanos são iguais a $J = 23,86K$ e $J^z = 0,016K$, respectivamente. A constante de anisotropia $\lambda_{xy} \cong 0,992$ enquanto $\lambda_z = 1,0$. Além disso, $T_C = 6,25K$ e $T_{BKT} = 5,50K$ são respectivamente as temperaturas de Curie e BKT do material. Futuramente, utilizaremos estes resultados para verificar a qualidade e validade do nosso modelo, além da abordagem utilizada.

Como o hamiltoniano da equação anterior não possui solução exata, para que possamos capturar e estudar a transição BKT, utilizaremos a Aproximação Harmônica Auto-Consistente (**SCHA**). Diferente de outros formalismos bosônicos [81], a SCHA é o único capaz de capturar os efeitos da transição BKT, a qual estamos interessados. A SCHA substitui a Hamiltoniana da equação (2.3) por uma Hamiltoniana quadrática com parâmetros renormalizados que levam em conta contribuições de ordem mais alta. Usando a representação de Villain [82], os operadores escada serão representados por:

$$S_i^+ = e^{i\varphi_i} \sqrt{S(S+1) - S^z(S^z+1)} \quad (2.4)$$

$$S_i^- = \sqrt{S(S+1) - S^z(S^z+1)} e^{-i\varphi_i} \quad (2.5)$$

onde φ e S^z são operadores. Para melhor entendimento da representação anterior, podemos visualizar os operadores anteriores através da decomposição clássica em coordenadas cilíndricas para o spin.

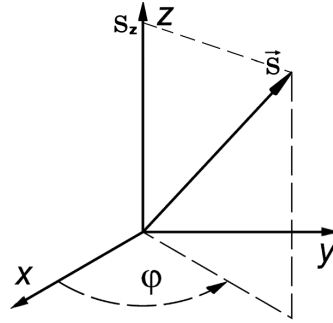


Figura 2.3: Decomposição clássica em coordenadas cilíndricas para o spin.

Classicamente, os campos φ e S^z obedecem a parênteses de Poisson. Logo, do ponto de vista quântico, φ e S^z serão canonicamente conjugados, e obedecerão uma relação de comutação igual a:

$$\begin{aligned} \{\varphi_i, S_j^z\} &= \delta_{ij} \\ \Downarrow \\ [\varphi_i, S_j^z] &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Sendo assim, considerando um campo de spins que varia suavemente, podemos expandir o hamiltoniano até segunda ordem em φ e S^z obtendo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m,0} &= \sum_k \underbrace{\left(4J\tilde{S}^2\rho(1-\gamma_k) + 2J^z\tilde{S}^2\rho^z(1-\gamma_k^z) + \mu_B g B_s \tilde{S} \zeta \right)}_{H_k^\varphi} \varphi_k \varphi_{-k} \\ &+ \underbrace{\left(4J(1-\lambda_{xy}\gamma_k) + 2J^z(1-\lambda_z\gamma_k^z) + \frac{\mu_B g B_s}{\tilde{S}} \right)}_{H_k^z} S_k^z S_{-k}^z \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde adotamos $\tilde{S}^2 = S(S+1)$. As helicidades (ou spin stiffness) ρ e ρ_z , além da cons-

tante de renormalização ζ , são os parâmetros que levam em conta contribuições de ordem mais alta no hamiltoniano harmônico. A obtenção destes parâmetros pode ser feita via utilização do princípio variacional de Bogoliubov, que nos fornece as seguintes equações auto-consistentes:

$$\rho = \left(1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle_0} \quad (2.8)$$

$$\rho^z = \left(1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle (\Delta\varphi_{(z)})^2 \rangle_0} \quad (2.9)$$

$$\zeta = \left(1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{2\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle (\varphi)^2 \rangle_0} \quad (2.10)$$

onde as médias $\langle \cdot \rangle_0$ são realizadas considerando o hamiltoniano harmônico. Reescrevendo φ_k e S_k^z do hamiltoniano (2.7) em termos de operadores bosônicos a_k :

$$\begin{aligned} \varphi_k &= \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2}} \left(\frac{H_k^z}{H_k^\varphi} \right)^{\frac{1}{4}} (a_k^\dagger + a_{-k}) \\ S_k^z &= \frac{i\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2}} \left(\frac{H_k^\varphi}{H_k^z} \right)^{\frac{1}{4}} (a_k^\dagger - a_{-k}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

obtemos o hamiltoniano harmônico:

$$\mathcal{H}_{m,0} = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (2.12)$$

onde a energia do magnon é igual a $\hbar\omega_k = 2\sqrt{H_k^\varphi H_k^z}$ e, como esperado, a relação de dispersão para longos comprimentos de onda no caso ferromagnético tem o comportamento $\omega_k \propto k^2$. Por fim, os valores médios das equações (2.8) a (2.10) são iguais à:

$$\begin{aligned} \langle (S^z)^2 \rangle_0 &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{H_k^\varphi}{H_k^z}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2T}\right) \\ \langle (\varphi)^2 \rangle_0 &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{H_k^z}{H_k^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2T}\right) \\ \langle (\Delta\varphi)^2 \rangle_0 &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (1 - \gamma_k) \sqrt{\frac{H_k^z}{H_k^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2T}\right) \\ \langle (\Delta\varphi_{(z)})^2 \rangle_0 &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (1 - \gamma_k^z) \sqrt{\frac{H_k^z}{H_k^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2T}\right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Podemos obter a temperatura BKT pela intersecção da curva para ρ com a reta

$2T/\pi J\tilde{S}^2$. E como exposto anteriormente, podemos utilizar este cálculo para verificar a validade e qualidade dos calculos. Experimentalmente, o K_2CuF_4 possui uma temperatura BKT muito bem definida dada por $T_{BKT} = 5,5K$. Utilizando os parâmetros conhecidos para este material, encontramos o valor de $T_{BKT} = 5,35K$, o que está em excelente acordo com o esperado (erro de aproximadamente 3%). Em uma rápida revisão na literatura, o melhor valor teórico obtido para esta transição foi $T_{BKT} = 7,9K$ [80], o que reforça a qualidade dos nossos cálculos e resultados.

2.1.3 Termo de Interação entre camadas

A interação entre os elétrons da parte normal condutora e os magnons da parte ferromagnética isolante é descrita por uma hamiltoniana de troca do tipo- sd [71, 83, 84], dada por:

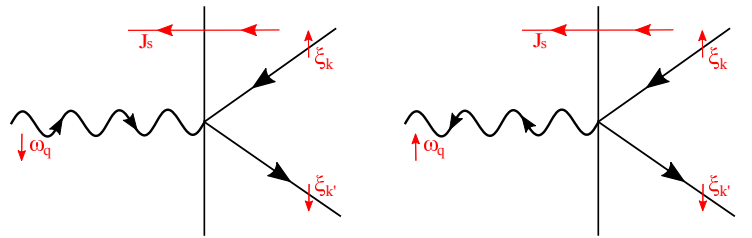
$$\hat{\mathcal{H}}_{sd} = J_{sd} \sum_{qkk'} \left[S_q^- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + S_q^+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + S_q^z \left(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right) \right] , \quad (2.14)$$

onde $c_{k\downarrow}$ é o operador que cria um elétron com momento k e spin-up, enquanto S_q^+ é o operador que cria um magnon-up com momento q ou aniquila um magnon-down com momento q no sentido oposto.

Este modelo foi inicialmente proposto para explicar a interação entre elétrons de uma camada- d incompleta, fixos na estrutura cristalina do material, com elétrons itinerantes da camada- s externa. Contudo, ele também é utilizado para explicar a interação dos elétrons- s condutores com os momentos magnéticos retidos por elétrons da camada- d .

Utilizando o hamiltoniano anterior, torna-se mais simples o entendimento dos processos representados na figura (5.1). Ambos os diagramas são a representação do segundo termo do hamiltoniano.

No primeiro diagrama (esquerda), um elétron-up incide na superfície entre os materiais com momento k , é aniquilado ($c_{k\downarrow}$), um elétron-down é criado com momento k' ($c_{k'\downarrow}^\dagger$) enquanto um



magnon-down com momento q incide na interface e é aniquilado (S_q^+). Já para o se-

gundo diagrama, a única diferença é a emissão de um magnon-up com momento q na interface. Ambos os processos contribuem igualmente para a injeção de uma corrente de spin do material NM para o material FMI.

Para que possamos realizar a soma em q , k e k' independentemente, assumimos que a interface entre os materiais é rugosa, levando assim a um espalhamento incoerente dos elétrons (componente transversa do momento não é conservada). Por fim, o terceiro termo do hamiltoniano não está associado a nenhum processo de emissão ou absorção de magnons na interface.

2.1.4 Corrente de Spin

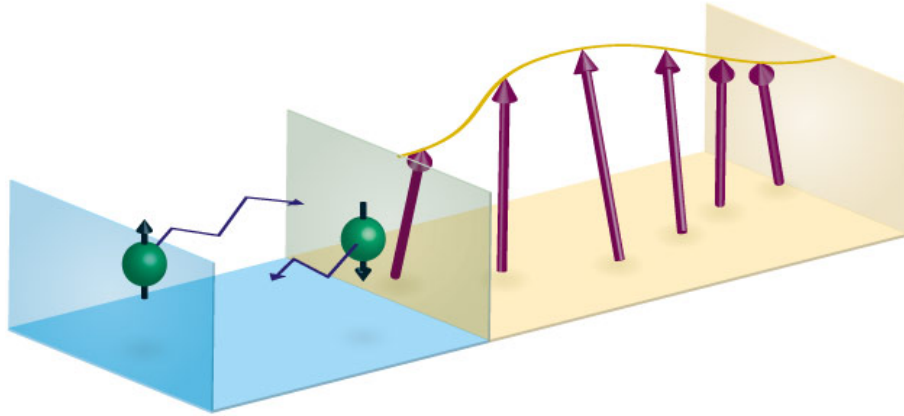


Figura 2.4: Representação esquemática do processo inversão do spin eletrônico na parte NM (azul) e injeção de magnons parte FMI (laranja). Imagem retirada do link na ref. [85].

Como visto na figura anterior, o processo de injeção da corrente de spin está ligada à taxa com a qual os elétrons da parte condutora NM incidem na interface e invertem seus spins emitindo assim um magnon, que transportará a corrente de spin na parte FMI. Desta forma, podemos definir o operador corrente de spin através da derivada temporal da diferença entre o número de spins up e down, dada por:

$$\begin{aligned} \hat{I}_s &= \frac{d}{dt} \sum_{k\sigma} \hbar \sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \frac{d}{dt} \sum_k \hbar \left(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \right) \\ &\stackrel{!}{=} v J_{sd} \sum_{qkk'} \left[S_q^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} - S_q^+ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} \right] , \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde a evolução temporal dos operadores é obtida através do quadro de interação.

A eq.(2.15) para o operador corrente de spin tem uma estrutura similar ao do hamiltoniano

niano da interação-*sd*. Em resumo, este operador contabiliza a contribuição das correntes de spin propagando-se em direções opostas fornecendo assim, o valor resultante esperado para a corrente de spin. O valor esperado da corrente de spin (J_s) é obtido através da teoria de resposta linear, que nos fornece:

$$I_s = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) \langle [\hat{\mathcal{I}}_s(t), \hat{\mathcal{H}}_{sd}(0)] \rangle \quad (2.16)$$

Definindo $\hat{A}(t) = \sum_{qkk'} S_q^-(t) c_{k'\uparrow}^\dagger(t) c_{k'\downarrow}(t)$, conseguimos reescrever a eq.(2.16) da seguinte forma:

$$I_s = \frac{2J_{sd}^2}{\hbar} \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\delta\mu t} (-i) \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{A}^\dagger(0)] \rangle \right\} \quad (2.17)$$

contudo, podemos definir a função de Green retardada,

$$i\hbar U_{ret}(t) = \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{A}^\dagger(0)] \rangle \quad (2.18)$$

o que nos leva a:

$$I_s = 2J_{sd}^2 \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\delta\mu t} U_{ret}(t) \right\} = -2J_{sd}^2 \text{Im} \tilde{U}_{ret}(\delta\mu) \quad (2.19)$$

onde $\tilde{U}_{ret}(\delta\mu)$ é a transformada de Fourier para $U_{ret}(t)$.

Novamente, como estamos interessados em tratar o problema à temperaturas finitas, torna-se conveniente utilizarmos o formalismo de Matsubara para a função de Green, nos levando a escrever:

$$\mathcal{U}(i\Omega_l) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} \langle T_\tau \hat{A}(\tau) \hat{A}^\dagger(\tau) \rangle \quad (2.20)$$

$$= -\frac{1}{\hbar} \sum_{qkk'} \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} \langle S_{-q}^-(\tau) S_q^+(0) \rangle_0 \langle c_{k'\uparrow}^\dagger(\tau) c_{k'\uparrow}(0) \rangle \langle c_{k'\downarrow}(\tau) c_{k'\downarrow}^\dagger(0) \rangle \quad (2.21)$$

$$= -\hbar^2 \sum_{qkk'} \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} \chi_q(\tau) \mathcal{G}_{k'\uparrow}(-\tau) \mathcal{G}_{k'\downarrow}(\tau) \quad , \quad (2.22)$$

onde $\Omega_l = (2\pi l/\beta)$, $l \in \mathbb{Z}$ são as frequências de Matsubara e T_τ é o operador de ordenamento temporal. Para recuperarmos a função de Green retardada $U_{ret}(\delta\mu)$ devemos fazer a continuação analítica $i\Omega_l \rightarrow \delta\mu + i\epsilon$, com o limite $\epsilon \rightarrow 0$. A passagem da eq.(2.20) para

a eq.(2.21) utiliza o teorema de ordenamento de Wick.

$\chi_q(\tau)$ e $\mathcal{G}_{k\sigma}(\tau)$ são respectivamente as funções de Green para o magnon e para o elétron no formalismo de Matsubara. O calculo detalhado da função de Green do magnon encontra-se na ref. [1], enquanto a função de Green para o elétron é dada por:

$$\mathcal{G}_{k\sigma}(\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_n} \frac{e^{-\nu_n \tau}}{i\hbar \nu_n - \xi_{k\sigma}} \quad (2.23)$$

onde $\nu_n = ((2n + 1)\pi/\beta)$ com $n \in \mathbb{Z}$ são as frequências de Matsubara no caso fermiônico e $\xi_{k\sigma} = \epsilon_k - \mu_\sigma$ é a energia do elétron.

Após substituirmos todas as funções de Green e calcular todas as somas sobre as frequências de Matsubara, eq.2.22 nos fornecerá:

$$\begin{aligned} I_s &= 2\pi J_{sd}^2 \sum_{qkk'} \left[\cosh^2 \theta_q \left[n(\omega_q) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k'\downarrow}) \right] \frac{\delta(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} + \omega_q + \Delta\mu)}{n(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} + \omega_q)} \right. \\ &\quad \left. - \sinh^2 \theta_q \left[(1 + n(\omega_q)) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k'\downarrow}) \right] \frac{\delta(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} - \omega_q + \Delta\mu)}{n(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} - \omega_q)} \right], \\ I_s &= \frac{2\pi J_{sd}^2}{n(-\Delta\mu)} \sum_{qk} \left[\cosh^2 \theta_q \left(n(\omega_q) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k\uparrow} - \omega_q - \Delta\mu) \right) + \right. \\ &\quad \left. - \sinh^2 \theta_q \left((1 + n(\omega_q)) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k\uparrow} + \omega_q - \Delta\mu) \right) \right], \quad (2.24) \end{aligned}$$

Considerando escalas típicas de energia ($\epsilon_F \sim 10\text{eV}$, $\xi_k \lesssim 10^{-2}\text{eV}$ e $\hbar\omega_q, \mu_q, \Delta\mu < \xi_k$), podemos assumir um limite contínuo e integrar sobre as funções de fermi-Dirac para obter:

$$\begin{aligned} \sum_k (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k\uparrow} \pm \omega_q - \Delta\mu) &\simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2m_e}{\beta\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \times \\ &\times \text{Li}_{1/2} \left(-e^{\beta\delta_\pm} \right), \quad (2.25) \end{aligned}$$

onde V é o volume do NM, m_e é a massa do eletron, $\delta_\pm = \epsilon_F - (-3\Delta\mu \pm \hbar\omega_q)/2$ e $\text{Li}_s(x)$ é a função polilogaritmica (também conhecida como função de Jonquière) de ordem s . Finalmente substituindo o resultado da eq.(2.25) na eq.(2.24) obtemos a seguinte expressão final para a corrente de spin:

$$I_s = \frac{g_s T^{3/2}}{n(-\Delta\mu)} \sum_q \left[\cosh^2(\theta_q) n(\hbar\omega_q) \text{Li}_{1/2} \left(-e^{\beta\delta_-} \right) + \sinh^2(\theta_q) (1 + n(\hbar\omega_q)) \text{Li}_{1/2} \left(-e^{\beta\delta_+} \right) \right] \quad (2.26)$$

onde definimos a constante,

$$g_s = \frac{V}{4} \left(\frac{2m_e k_B}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (2\pi J_{sd}^2).$$

É importante ressaltar que o resultado da eq.(2.26) deve ser interpretado com bastante cuidado no regime de altas temperaturas ($T > T_{BKT}$) uma vez que a aproximação harmônica autoconsistente fornece resultados confiáveis apenas para temperaturas abaixo da temperatura de transição BKT, dado que os parâmetros autoconsistentes se anulam acima da temperatura de transição. A consequência direta da anulação destes parâmetros é a divergência da corrente de spin definida pela eq.(2.26). Uma análise cuidadosa revela que o problema surge na função de Green do magnon. Como $\omega_q \rightarrow 0$ à medida que o sistema aproxima-se da transição BKT, os demais operadores não apresentam evolução temporal, tornando-se assim, independentes do tempo. Isso faz com que a função de Green do magnon anule-se quanto $T \rightarrow T_{BKT}$. Sendo assim, esperamos acima da temperatura de transição, não haja propagação de magnons e a corrente de spin anule-se abruptamente para $T = T_{BKT}$. Esta análise também concorda com o fato que os vórtices atuam como potenciais espalhadores para magnons [86,87]. Para $T > T_{BKT}$ a completa dissociação dos pares vórtice-antivórtice desordena o sistema além de fazer com que os magnons injetados seja sucessivamente espalhados, destruindo assim, o transporte da corrente de spin.

2.2 Resultados

Na Fig.(2.5) podemos notar que a corrente de spin aumenta com a temperatura e anula-se em $T = 0$. Este resultado é semelhante ao obtido nas referências [71,72,88] e está associado ao fato de flutuações térmicas aumentarem a população de magnons sem que, para $T = 0$, não há excitações impedindo a ocorrência do processo de spin-flip na interface e a injeção da corrente de magnons. Utilizando a relação de dispersão clássica do magnon ($\omega_q \propto q^2$ - caso ferromagnético) é fácil obter da eq.(2.26) que $I_s \propto T^{3/2}$, novamente de acordo com resultados experimentais [88] e teóricos [71] prévios, embora nosso modelo seja quasi-2D. No *inset* deste mesmo gráfico, podemos observar um comportamento linear para a corrente de spin em baixas temperaturas (a linha magenta possui inclinação unitária e serve apenas como um guia), ou seja, $I_s \propto T$ à medida que $T \rightarrow 0$. Este resultado também está de acordo com resultado teórico prévio [71].

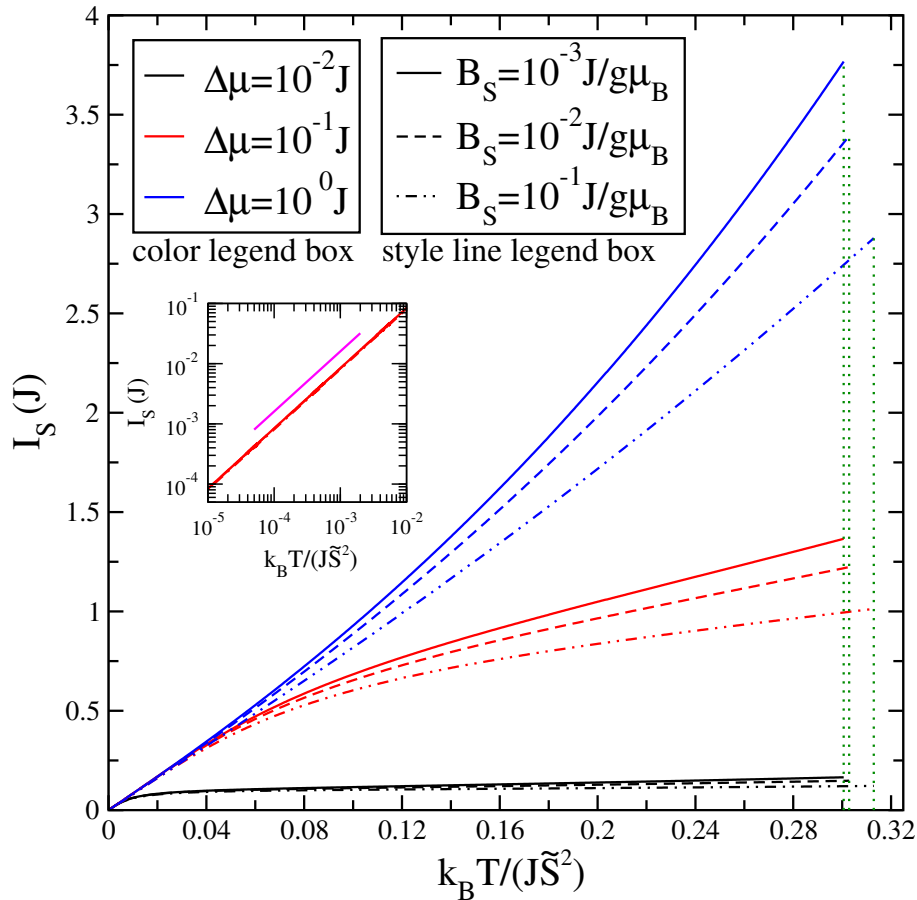


Figura 2.5: Corrente de spin vs Temperatura para diferentes valores de $\Delta\mu$ (representado por cores diferentes) e para diferentes B_s (representado por diferentes tracejados). $\eta = 10^{-3}$ e $\lambda_{xy} = 0.99$ estão fixados. Gráfico presente na ref. [1]

Considerando ainda o gráfico da Fig.(2.5), observamos o abrupto desaparecimento da corrente de spin na exata temperatura em que o sistema passa pela transição BKT, conforme discutido anteriormente. Este resultado além de uma assinatura indireta da ocorrência de uma transição BKT pode ser usado para em dispositivos de válvula de corrente de spin pura [89], que são componentes cruciais no desenvolvimento de dispositivos spintrônicos. Além disso, notamos a redução esperada da corrente de spin com o aumento do campo magnético estático aplicado, uma vez que o acoplamento entre este campo e os momentos magnéticos restringe suas flutuações, bem como vemos a saturação da corrente de spin injetada para pequenos valores de $\Delta\mu$ à medida que a temperatura aumenta.

Outro resultado comumente estudado e reportado na literatura trata de dependência da corrente de spin e a diferença de potencial químico $\Delta\mu$ para valores fixos de temperatura. No gráfico da figura 2.6 notamos que, para pequenos valores de $\Delta\mu$, a

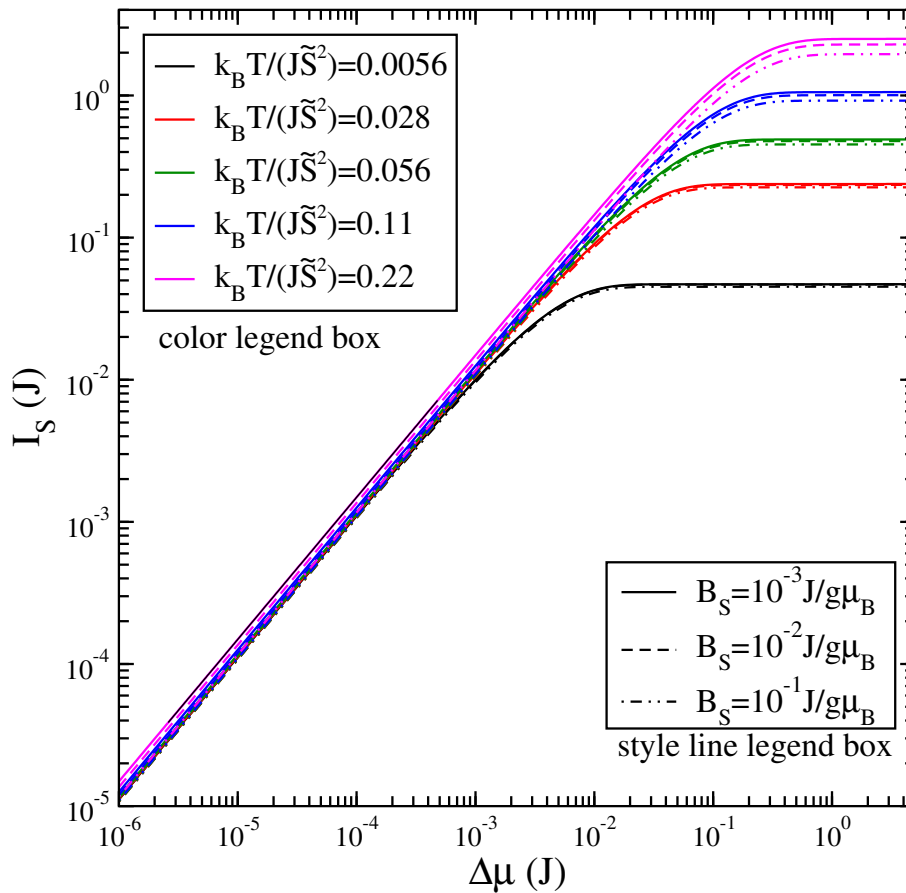


Figura 2.6: Corrente de spin vs. Potencial Químico $\Delta\mu$ para diferentes temperaturas e campo estático aplicado. $\eta = 10^{-3}$ e $\lambda_{xy} = 0.99$ estão fixados. Gráfico presente na ref. [1]

corrente de spin apresenta uma dependência linear com o mesmo, resultado em acordo

com o já reportado em [71, 72]. Contudo, além do comportamento linear, observamos neste mesmo gráfico, a saturação da corrente de spin para grandes valores de $\Delta\mu$. Isto é uma consequência da criação de magnons devido às flutuações térmicas. Para menores temperaturas, menos magnons são criados devido a estas flutuações o que limita o total de processos spin-flip que ocorrem na interface entre o NM/FMI levando a uma consequente limitação da corrente de spin máxima que pode ser injetada do lado FMI. Analogamente, maiores temperaturas geram mais magnons via flutuações térmicas, aumentando o total de processos spin-flip ocorrendo na interface e, portanto, levando ao aumento da corrente de spin máxima que pode ser injetada. Por fim, ressaltamos novamente a redução da corrente de spin com o aumento do campo magnético estático como esperado.

2.3 Conclusões

Neste trabalho estudamos a injeção de corrente de spin em uma interface composta por um metal normal e um ferromagneto isolante quasi-bidimensional. Assumimos a existência de uma diferença no potencial químico para os elétrons com spin up e down e estes elétrons, ao serem refletidos na interface NM/FMI e podem sofrer um processo de inversão de seu spin, emitindo (ou absorvendo) um magnon no lado FMI. Além de verificarmos alguns resultados conhecidos da literatura, como a dependência da corrente de spin com a temperatura e com o potencial químico, observamos interessantes novos comportamentos. Quando este sistema passa por uma transição BKT, observamos o abrupto anulamento da corrente de spin. Este resultado pode ser atribuído à desordem ocasionada pela dissociação e proliferação dos vórtices (que atuam como potenciais espalhadores para os magnons) acima da temperatura de transição. Este resultado ainda não havia sido descrito na literatura. Também verificamos a existência de uma saturação para a corrente de spin para grandes valores da diferença de potencial químico. Esta saturação também é dependente do valor da temperatura, onde, maiores temperaturas levam a maiores valores da corrente de saturação. Este resultado está associado com a disponibilidade de criação de magnons devido a flutuações térmicas.

Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition effects on spin current: The normal-metal–insulating-ferromagnet junction case

R. J. C. Lopes^{ⓧ,*}, A. R. Moura^{ⓧ,†} and W. A. Moura-Melo^{ⓧ,‡}

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36570-900 Viçosa, Minas Gerais, Brazil



(Received 30 May 2020; revised 14 September 2020; accepted 27 October 2020; published 19 November 2020)

We investigate the temperature effects on the spin current through an interface between a normal metal and a quasi-two-dimensional ferromagnetic insulator. Conductive electrons are reflected at the interface absorbing or emitting magnons. The interaction process depends on the temperature, and we are interested in finding out how the transport of spin current is affected close to the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition. That is an important open question. While the thermodynamics of spin currents in the usual normal-metal–insulating-ferromagnet interfaces are known, the results of a BKT transition are still unknown. As it is well documented, the BKT transition is associated with the unbinding of vortex-antivortex pairs in two-dimensional models with an O(2) symmetry. In our work, the ferromagnet is a layered quasi-two-dimensional material, and in the limit of weak interplane coupling, a BKT transition is expected. Using the self-consistent harmonic approximation, we have obtained the BKT transition temperature (T_{BKT}) and the spin current as a function of the temperature. The spin current behavior at low temperatures is similar to those obtained from theoretical and experimental systems. At T_{BKT} , the spin current shows a discontinuous jump associated with vortex dissociation.

DOI: [10.1103/PhysRevB.102.184422](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.184422)

I. INTRODUCTION

Spintronics has emerged as an exciting field in the last years [1–3]. Instead of ordinary electric current, spintronics mainly deals with spin current, characterized by a net flux of spin. Spin currents propagate in both insulating or conducting materials, each one being magnetic or nonmagnetic, which diversify technological application. In nonmagnetic conductors, such as platinum, a spin current can be generated, for example, by conductive electrons moving in opposite directions according to their spin (the spin-up electron direction usually defines the spin current direction). This is the so-called pure spin current since there is no effective charge current. In a magnetic conductor, the charge current is also a spin current since the conductive electrons spins are naturally oriented. In insulators, the spin current is necessarily driven by spin waves, magnons in the quantum formalism, and it can be observed in ferromagnetic (FMI) [4–7], antiferromagnetic (AFI) [8–13] or even in paramagnetic (PMI) [13–17] insulators. Semiconductor materials have also played an important role in spintronics [18–21]. In particular, semiconductor-based spintronic devices have the potential of revolutionizing the technological industry, for a review see Ref. [20].

Spin currents can be generated and manipulated through the separation of up and down spins electrons in the charge current by means of spin-orbit coupling (the spin Hall effect, SHE) [22–26], temperature gradient (the spin Seebeck effect) [27,28] or by spin pumping using ferromagnetic

resonance [5,29,30]. Conversely, one can detect spin current by converting it into charge current, which can be measured using conventional methods. In this case, usually, the process involves the inverse spin Hall effect [31–33], but it can also occur by the inverse Rashba-Edelstein effect [34] or spin-transfer torque [30,35,36]. Since magnon spin current has no energetic losses by Joule effect, magnetic insulators have often been used to generate and detect spin currents. Yttrium iron garnet, for example, is a widely used ferromagnetic insulator for spin current experiments [37].

A spin current injection at the interface between a normal metal (NM), also considered nonmagnetic, and a ferromagnetic insulator can occur in both directions. At equilibrium, spin current from the NM to FMI is equal in magnitude to the spin current in the opposite direction and, therefore, no spin current flows across the interface. One can create an effective spin current providing a nonequilibrium situation that favors the current in a specific direction. For example, in the spin-transfer torque process [30,38–40], a splitting chemical potential $\Delta\mu_e = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ between up and down spin arises for the conduction electrons in the NM [6] close to the interface and, once free electrons are not able to penetrate into insulator, they reflect at the interface with inverted spins. In the case where $\Delta\mu > 0$, the creation of down spins is favored, and therefore spin-up electrons are annihilated when they reflect at the interface. Effectively, integer spin angular momentum is transmitted to the FMI, and the angular momentum conservation in the spin-flip scattering requires the appearance of a quantum of spin wave, a magnon, that bears spin-1. Whether the magnon has an up or down integer spin will depend on the ferromagnetic ground state orientation; however, an spin-up magnon has the same effect as a spin-down magnon moving in the opposite direction. In both cases,

*ricardo.lopez@ufv.br

†antoniormoura@ufv.br

‡winder@ufv.br

the spin current flows from the NM to the FMI. A similar process occurs when $\Delta\mu < 0$; however, in this case, the spin current direction is opposite to the latter one.

It is well-known that temperature has a main role in the spin current transmission. For example, there is no magnon excitation at zero temperature, and the spin conductivity vanishes. Besides, at zero temperature, all down electron states below μ_\downarrow are occupied, and it is impossible to occur the reflection of an up electron to a state with spin-down. Therefore, finite temperature effects are a necessary condition for spin current injection in the junction. In turn, FMI can present a topological phase transition at finite temperature, the so-called Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition, which occurs in two-dimensional magnets bearing a continuous O(2) symmetry [41–45]. Instead of a spontaneous symmetry breaking, the BKT transition is associated with vortex-antivortex pairs unbinding. Below T_{BKT} , the vortex-antivortex pairs are confined to stay together, leading to a quasi-long-range order. Vortex-antivortex unbinding occurs above T_{BKT} , yielding to an exponential decay for the spin-spin correlation function, in place of the power-law decay for $T < T_{\text{BKT}}$. Here, we model the FMI as composed of weakly coupled layers, which ensures the BKT transition [46–51].

In this work, we are interested in the effects of the BKT transition on the injection of spin current from a normal metal to a ferromagnetic insulator. We also determine the effects of the interplane interaction and the easy-plane anisotropy on the spin current injection. For determining the phase transition and its effects, we use the self-consistent harmonic approximation (SCHA). SCHA considers renormalized parameters that take into account higher orders in the operator expansion for the magnetic part. The magnon Green's function and the statistical average of spin operators are evaluated. As standard procedures, we apply linear response theory to find the spin current through the interface. The results show a discontinuous jump at T_{BKT} for spin current resistance. The low-temperature behavior agrees with that already reported in the literature.

II. THE MODEL

Following recent works [6,14], we divided the Hamiltonian into three parts: normal metal, magnetic insulator, and interaction interface term. The normal metal is considered as a free electron model with different chemical potentials $\mu_{\uparrow,\downarrow}$ for up and down electrons. In the second quantization formalism, the electronic Hamiltonian is written as $\hat{H}_e = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu_\sigma) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$, where $c_{k\sigma}$ is the fermionic operator that annihilates an electron of momentum k and spin σ . At finite temperature, the electron propagation is given by the retarded Green's function $i\hbar G_{k\sigma}^{\text{ret}}(t) = \theta(t) \langle \{c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^\dagger(0)\} \rangle$ [52].

We considered a magnetic material composed of two-dimensional layers connected by an interplane coupling J^z . The Hamiltonian is given by

$$H_m = -J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda_{xy} S_i^z S_j^z) - J^z \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda_z S_i^z S_j^z) - g\mu_B B_s \sum_i S_i^x, \quad (1)$$

where the first sum is performed over intraplane neighbors (coupling constant J), while the second sum is over interplane neighbors (coupling J^z), $0 \leq \lambda_{xy} < 1$ and $0 \leq \lambda_z \leq 1$ are easy plane anisotropies that favor the spins to align parallel to the XY plane to minimize the energy. As usual for many relevant materials [53–56], we consider a large interplane lattice parameter compared with intraplane sites, which lead us to $J^z \ll J$. Also, we will only consider the axial anisotropy λ_{xy} for the intraplane interactions. Finally, the Zeeman energy is associated with a uniform static magnetic field $\vec{B} = B_s \hat{x}$ and will be used to probe the spin of the magnon excitations.

There are many methods to obtain the spin propagator in the magnetic material. Takahashi *et al.* [6] used the ladder operators S_i^\pm to define the magnon Green's function in an ordered FM model. It is also possible, for phases with broken symmetry, to represent the spin operators as bosonic operators using, for example, the Holstein-Primakoff (HP) formalism. However, HP bosons do not apply to disordered phases. Okamoto [14] adopted the Schwinger formalism to describe the spin current in the AF/FM in both ordered and disordered phases. In this case, the spin propagator is defined in terms of spinon (neutral collective modes with half-integer spin) operators. Although Schwinger formalism may be used to study the BKT transition, such a method is not the most appropriate, being necessary the addition of an auxiliary Abelian gauge field for the correct description of the BKT transition, as well shown in Refs. [57,58]. In order to obtain the BKT transition, we used the SCHA, described in Appendix A. Through the SCHA, we can write a quadratic Hamiltonian with renormalized parameters that take into account high order interactions. We also show that our calculations have a better agreement with experimental results than previous works.

The electrons of the magnetic insulator and normal metal interact by an sd -type exchange Hamiltonian [6,59] (an interaction between localized d -type electrons and conduction s -type electrons)

$$\hat{H}_{sd} = J_{sd} \sum_{qkk'} [S_q^z (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow}) + S_q^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} + S_q^+ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow}], \quad (2)$$

where J_{sd} is the exchange coupling between conductor electrons and magnetic sites. The sum over the momenta q , k , and k' is made independently considering a rough interface and, therefore, the transverse component of momentum is not conserved. Here we adopted dimensionless spin operators with the \hbar absorbed in the couplings J_{sd} , J , and J^z .

The spin current operator is defined as the time derivative $\hat{I}_s = (d/dt) \sum_{k\sigma} \hbar\sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ and, using the Heisenberg equation of motion, we obtain

$$\hat{I}_s = iJ_{sd} \sum_{qkk'} (S_q^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} - S_q^+ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow}). \quad (3)$$

As one can note, when $\Delta\mu > 0$, spin-up electrons are destroyed while spin-down electrons are created in the spin-flip process. The same spin current operator can be obtained if we define the spin current in the FMI side of the interface as $\hat{I}_s = (d/dt) \sum_{q\sigma} \hbar\sigma a_q^\dagger a_q$, where a_q is the magnon annihilation operator.

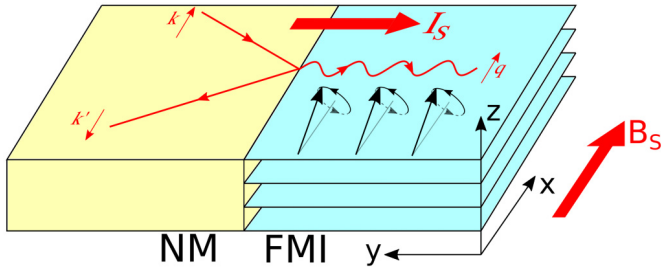


FIG. 1. Schematic example of a possible spin-flip process at the interface and the injection of magnons on the FMI side. An up spin electron with momentum k is reflected at the interface with down spin and momentum k' at the NM side. A magnon with up spin and momentum q is injected at the FMI side. B_s is a static magnetic field applied along the x direction, and I_s is the total spin current injected.

III. SPIN CURRENT

Using linear response theory [6], we obtain the expectation value of \hat{I}_s , defined in Eq. (3), as

$$I_s = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) \langle [\hat{I}_s(t), \hat{H}_{sd}(0)] \rangle, \quad (4)$$

where the time evolution of the operators is obtained from the interaction picture. We define the operator $i\hbar\hat{U}(t) = \theta(t)[\hat{A}(t), \hat{A}^\dagger(0)]$, which provides the retarded Green's function

$$i\hbar U_{\text{ret}}(t) = \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{A}^\dagger(0)] \rangle, \quad (5)$$

where $\hat{A}(t) = \sum_{qkk'} S_q^-(t) c_{k\uparrow}^\dagger(t) c_{k'\downarrow}(t)$. The \hat{U} operator can be written as $\hat{U} = \hat{U}' + i\hat{U}''$, where \hat{U}' gives the real part of U_{ret} , while \hat{U}'' provides the imaginary one. It is easy to verify that $\hat{U}'(0) = 0$, and consequently $\text{Re}[U_{\text{ret}}(t)]$ vanishes for any t . To create a nonequilibrium situation that provides a spin current injection through the NM/FMI interface (Fig. 1), we introduce a spin-dependent chemical potential μ_σ in the NM part, where $\Delta\mu = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow \neq 0$. After a straightforward procedure, the spin current is written as

$$I_s(\Delta\mu) = -2J_{\text{sd}}^2 \text{Im} U_{\text{ret}}(\Delta\mu), \quad (6)$$

with the Fourier transform $U_{\text{ret}}(\Delta\mu) = \int dt e^{i\Delta\mu t} U_{\text{ret}}(t)$. From the Lehmann representation, we obtain $I_s(\Delta\mu) = 2\pi J_{\text{sd}}^2 \sum_{mn} P_{mn} \delta(K_m - K_n + \Delta\mu)$, with the transition

probabilities given by

$$P_{mn} = \frac{(e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n})}{e^{-\beta\Omega}} |\langle m|A|n \rangle|^2, \quad (7)$$

where K_m is the eigenvalue of the operator $\hat{K} = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu_\sigma)$. Therefore, one notes that $I_s = 0$ in the limit of $\Delta\mu = 0$. As expected, if the up and spin-down electrons have the same chemical potential, then there is no effective spin inversion at the interface reflection, and $I_s = 0$.

As usual, since it is simpler to work with imaginary time $\tau = it$ than real time t , we adopted the Matsubara formalism to express the Green's function as

$$\hbar \mathcal{U}(i\Omega_m) = - \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\Omega_m \tau} \langle T_\tau \hat{A}(\tau) \hat{A}^\dagger(0) \rangle, \quad (8)$$

where $\Omega_m = 2\pi m/\beta\hbar$, $m \in \mathbb{Z}$, are the Matsubara frequencies and, T_τ is the imaginary time ordering operator. The retarded Green's function $U_{\text{ret}}(\Delta\mu)$ is recovered adopting the analytic continuation $i\Omega_m \rightarrow \Delta\mu + i\epsilon$, where $\epsilon > 0$ is an infinitesimal parameter. Applying Wick's theorem, Eq. (8) is simplified to

$$\mathcal{U}(i\Omega_m) = -\hbar^2 \sum_{qkk'} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\Omega_m \tau} \mathcal{G}_{k\uparrow}(-\tau) \mathcal{G}_{k'\downarrow}(\tau) \mathcal{D}_q(-\tau). \quad (9)$$

The Matsubara Green's function of the electron is given by

$$\begin{aligned} \hbar \mathcal{G}_{k\sigma}(\tau) &= -\langle T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{v_n} \frac{e^{-iv_n \tau}}{i\hbar v_n - \xi_{k\sigma}} \\ &= e^{\xi_{k\sigma} \tau} [f(\xi_{k\sigma}) \theta(\tau) - (1 - f(\xi_{k\sigma})) \theta(-\tau)], \end{aligned} \quad (10)$$

where $v_n = (2n+1)\pi/\beta\hbar$, with $n \in \mathbb{Z}$, are the Matsubara frequencies for fermionic operators and, $\xi_{k\sigma} = \epsilon_k - \mu_\sigma$ is the electron energy relative to the chemical potential μ_σ . Here, we are considering a normal conducting state; however, a superconducting phase, for example, would be implemented by considering the phonon-electron interaction and adopting a coherent ground state in order to allow electrons to bind in Cooper pairs. The magnon Matsubara Green's function, defined by $\hbar \mathcal{D}_q(\tau) = -\langle T_\tau S_{-q}^-(\tau) S_q^+(0) \rangle$, was developed in Appendix B.

After replacing the Green's functions and evaluating the sum over the Matsubara frequencies, Eq. (9) yields

$$\begin{aligned} I_s &= 2\pi J_{\text{sd}}^2 \sum_{qkk'} \left[\cosh^2 \theta_q [n(\omega_q) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k'\downarrow})] \frac{\delta(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} + \omega_q + \Delta\mu)}{n(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} + \omega_q)} \right. \\ &\quad \left. - \sinh^2 \theta_q [(1 + n(\omega_q)) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k'\downarrow})] \frac{\delta(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} - \omega_q + \Delta\mu)}{n(-\xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} - \omega_q)} \right], \\ I_s &= \frac{2\pi J_{\text{sd}}^2}{n(-\Delta\mu)} \sum_{qk} [\cosh^2 \theta_q (n(\omega_q) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k\uparrow} - \omega_q - \Delta\mu)) + \\ &\quad - \sinh^2 \theta_q ((1 + n(\omega_q)) (f(\xi_{k\uparrow}) - 1) f(\xi_{k\uparrow} + \omega_q - \Delta\mu))]. \end{aligned} \quad (11)$$

Considering typical energy scales ($\epsilon_F \sim 10$ eV, $\xi_k \lesssim 10^{-2}$ eV and $\hbar\omega_q, \mu_q, \Delta\mu < \xi_k$), we can assume a continuous limit and integrate the Fermi-Dirac functions to obtain

$$\sum_k (f(\xi_{k\uparrow}) - 1)f(\xi_{k\uparrow} \pm \omega_q - \Delta\mu) \simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2m_e}{\beta\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \times \text{Li}_{1/2}(-e^{\beta\delta_{\pm}}), \quad (12)$$

where V is the NM volume, m_e is the electron mass, $\delta_{\pm} = \epsilon_F - (-3\Delta\mu \pm \hbar\omega_q)/2$ and $\text{Li}_s(x)$ is the polylogarithm (also known as Jonquière's function) of order s . Moreover, finally replacing the result from Eq. (12) in Eq. (11), we obtain the final expression for the spin current:

$$I_s = \frac{g_s T^{3/2}}{n(-\Delta\mu)} \sum_q [\cosh^2(\theta_q) n(\hbar\omega_q) \text{Li}_{1/2}(-e^{\beta\delta_-}) + \sinh^2(\theta_q) (1 + n(\hbar\omega_q)) \text{Li}_{1/2}(-e^{\beta\delta_+})], \quad (13)$$

in which we defined the constant,

$$g_s = \frac{V}{4} \left(\frac{2m_e k_B}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (2\pi J_{sd}^2).$$

It is important to note that for high temperatures ($T > T_{\text{BKT}}$), the result should be interpreted with care. The SCHA method provides reliable results for temperatures $T < T_{\text{BKT}}$. However, above the BKT temperature, the self-consistent parameters vanish as well as the energy $\hbar\omega_q$ for all momentum. As a consequence, the spin current defined by Eq. (13) provides an infinite spin current for temperatures above the BKT transition. A detailed analysis reveals that the problem arises in the Green's function of the a operators. Indeed, since $\omega_q \rightarrow 0$ in the BKT transition, the a_q and a_q^\dagger operators do not present time evolution, and any spin operator should be time independent. In particular, $S_q^-(t) = S_q^-(0)$ and the magnon Green's function $\hbar D_q^{\text{ret}}(t) = (-i\hbar)^{-1} \theta(t) \langle [S_q^-, S_q^+] \rangle = 2(-i\hbar)^{-1} \theta(t) \langle S_q^z \rangle = 0$ because H_q^ϕ tends to zero when $T \rightarrow T_{\text{BKT}}$. Therefore, at the transition temperature, we expect there will be no magnon propagation, and the spin current abruptly vanishes at $T = T_{\text{BKT}}$.

This different behavior, where the spin current vanishes after undergoing a BKT transition differs from that observed by Okamoto [14], which even after the system undergoes a phase transition, it still presents a finite propagation of the spin current. Actually, in Ref. [14] the transition from an FMI or AFI ordered system ($T < T_{\text{critical}}$) to a disordered PMI system ($T > T_{\text{critical}}$) is realized. This usual paramagnetic phase is generally composed of domains and the correlation length is finite (diverging only at the temperature where phase transition occurs). Regarding the BKT transition, for both $T < T_{\text{BKT}}$ and $T > T_{\text{BKT}}$, the system has no ordering at all [60]. It is disordered for any finite temperature. However, for $0 < T < T_{\text{BKT}}$, the correlation function follows a power law and the correlation length is infinite [41–43], that is, the system is critical at the whole temperature range, a feature which essentially differs our from that considered by Okamoto [14], where the system is critical only at the transition temperature. This regime is often called quasicritical and is characterized by the presence of bound vortices that contribute for disordering the system. These vortices also work like scattering potentials

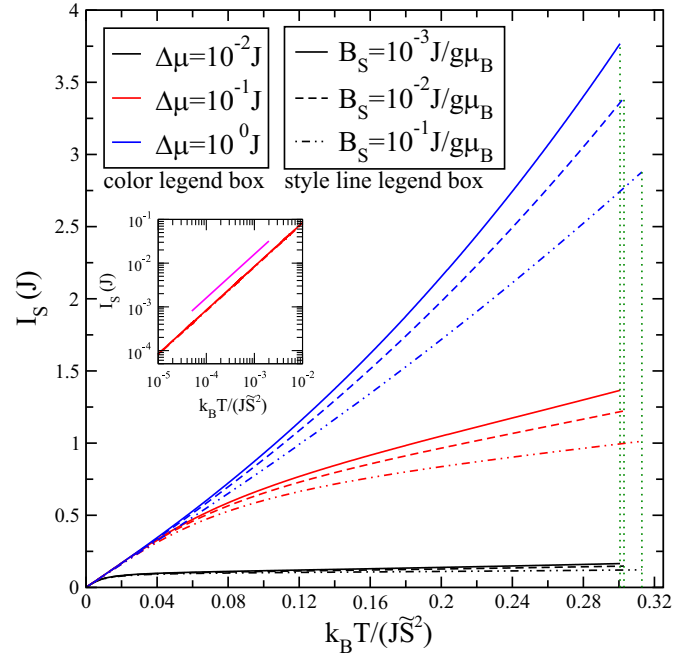


FIG. 2. Spin current vs T at different $\Delta\mu$ (represented by different colors), for a number of B_s (represented by different line styles). We have fixed $\eta = 10^{-3}$ and $\lambda_{XY} = 0.99$. The inset shows the linear behavior of I_s at a very low temperature. (The magenta line has a unity slope, and it only serves as a guide to the eyes). The curves above show the abruptly vanishing of spin current at BKT transition, as well as its reduction with the applied static field.

for magnons, as shown by Pereira *et al.* in Refs. [61,62]. For $T > T_{\text{BKT}}$, vortex-pair dissociation and proliferation completely disorders the system. In this paramagnetic regime, characterized by the excess of free vortices, the successive scattering experienced by the injected magnons in the system is enough to disorder the magnon propagation, breaking down any coherence in the spin current transport, consequently nullifying it.

IV. RESULTS

For temperatures below T_{BKT} , the spin current presents a similar behavior when compared with references [6,7,14]. It increases with temperature and vanishes at $T = 0$. This comes about for thermal fluctuations increase the magnon population. At $T = 0$, there is no magnon excitation, so that the spin-flip process is prohibited, yielding that the spin current vanishes. Considering the classical magnon dispersion relation ($\omega_q \propto q^2$), it is easy to obtain $I_s \propto T^{3/2}$ from Eq. (13). This result is in accordance to previous theoretical [6] and experimental [7] results, even though our model is closer to the two-dimensional (2D) case. At very low temperatures, $T \rightarrow 0$, we also recover the theoretical result from [6], where $I_s \propto T$.

In Fig. 2, we can also notice the expected reduction of the spin current with the increasing static magnetic field applied and the abruptly vanishing of the spin current at the BKT transition, as previously discussed. This behavior could be used as both an indirect signature for BKT transition and on

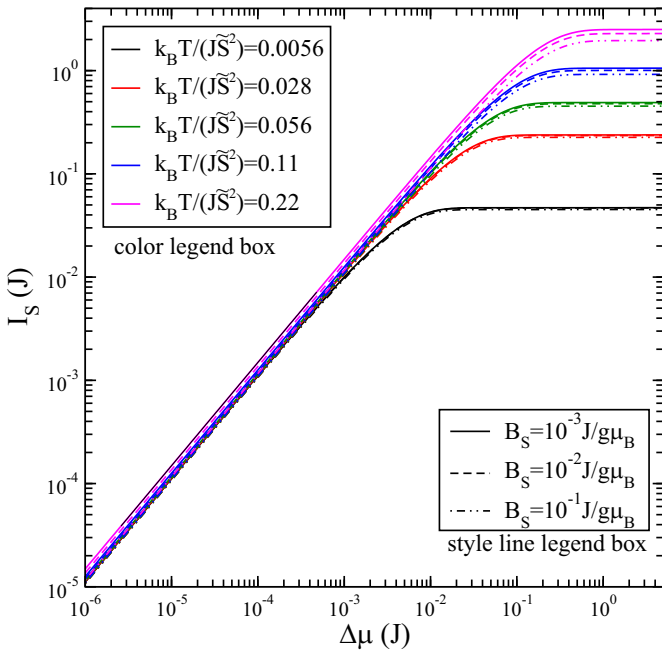


FIG. 3. Spin current vs the chemical potential for different temperatures and applied fields, showing the saturation of spin current for large $\Delta\mu$ values, in addition to the expected linear behavior for small $\Delta\mu$. We have used $\eta = 10^{-3}$ and $\lambda_{XY} = 0.99$.

pure spin current valve devices [63], which represent a crucial component to spintronics development. Finally, we can also see that, for small $\Delta\mu$ values, the injected spin current swiftly saturates with the temperature.

Another important result is how the spin current varies with $\Delta\mu$ at fixed temperatures. For low $\Delta\mu$ values, we recover the expected linear behavior [6,14], as shown in Fig. 3.

Besides the linear behavior, we also note that spin current injection saturates at larger $\Delta\mu$ values. This comes about for thermal fluctuations increases magnon population so that at a lower temperature, fewer magnons are created, which limits the possible spin-flip processes at the interface and consequently, the maximum spin current injected through FMI. In contrast, a higher (static) magnetic field decreases the magnon population, since the coupling between the magnetic field and the magnetic moments restricts their fluctuations.

According to Eq. (13), spin current jump $\Delta I_s = \lim_{T \rightarrow T_{\text{BKT}}^-} I_s(T)$ not only depend on temperature, but also interaction parameters, chemical potential, and applied field. This nontrivial behavior is shown in Fig. 4. Despite the slight variation in ΔI_s , some expected behaviors can be observed. On the one hand, even for small interplane couplings, for fixed λ_{XY} values, increasing η leads to lower ΔI_s since, at higher η values, the system approaches a 3D isotropic Heisenberg model, which is disordered and presents no BKT transition. On the other hand, for fixed η values, lower λ_{XY} values (regime close to the XY model) yields higher ΔI_s values. In addition to BKT transition influence on the system, these two behaviors for η and λ_{XY} , also highlight the importance of planar spin configurations to increase the magnon injection on the FMI side.

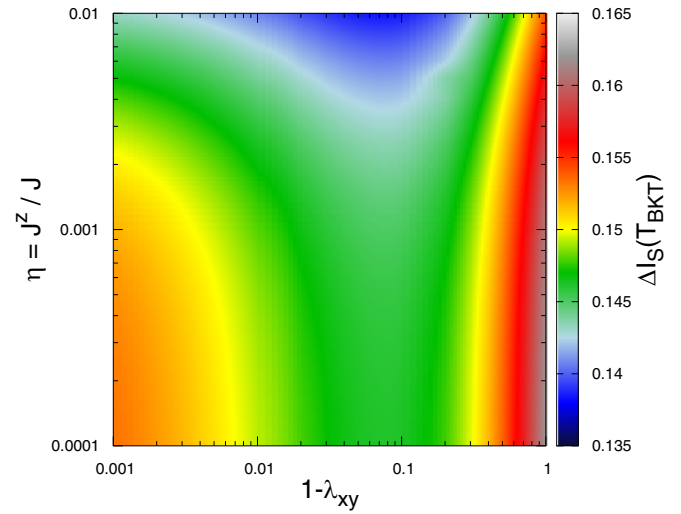


FIG. 4. Spin current jump, ΔI_s , at the T_{BKT} , with η and λ_{XY} varying. $\Delta\mu = 10^{-2}J$ and $g\mu_B B_s = 10^{-2}J$. Similar behavior occurs for different $\Delta\mu$ and B_s values. Lower η and λ_{XY} values, in addition to favor a BKT transition, lead to higher ΔI_s values, showing the importance of planar configurations to increase the magnon injection on the FMI.

V. CONCLUSIONS

In this work, we have studied the spin current injection through the interface between a normal metal and a quasi-2D ferromagnetic insulator. We have assumed a splitting chemical potential $\Delta\mu$ for the up and down electrons in the NM. These electrons reflect at the NM/FMI interface, and due to spin-flip processes, they emit (or absorb) magnons in the FMI side. Results for spin current injection in magnetic materials are known, but our work presents characteristics not yet observed in 3D systems. Here, we have considered a layered FMI whose layers are weakly coupled. Therefore, it is reasonable to take into account the BKT phase transition and its effects on the spin current.

We have used the SCHA method, which considers thermal renormalized parameters in order to include high order contributions, to express the magnon Green's function. The SCHA is a suitable formalism since the transition temperatures evaluated are in good agreement with experimental data. For potassium tetrafluorocuprate [53–55,64], for example, through the spin stiffness obtained from SCHA, the error between the BKT transition temperature obtained by us and the experimental result is less than 3%. Using linear response theory, we have obtained a spin current as a function of temperature, splitting chemical potential, static magnetic field, and coupling constants. Even though our model is closer to the 2D case, we have been able to retrieve the expected theoretical [6] and experimental [7] results for the spin current dependence on temperature ($I_s \propto T^{3/2}$), including the theoretical result [6] for very low temperatures ($I_s \propto T$). We also recovered the expected linear dependence [6,14] of spin current for small $\Delta\mu$ values ($I_s \propto \Delta\mu$).

However, when the BKT transition occurs, due to the vortices dissociation and proliferation, the spin stiffness suffers a discontinuity and the injected magnons are successively

scattered by the free vortices, disordering the magnon propagation and breaking down any coherence in the spin current transport, which induces an abrupt vanishing of the spin current. This result has not been described in the literature so far, and could be applied both to the indirect detection of a BKT transition and to application on pure spin current valve devices [63]. We have also verified the existence of an injection saturation for the spin current for large $\Delta\mu$ values. The value of saturation current varies with both temperature (higher temperature leads to higher saturation current), and static magnetic field applied (higher magnetic fields yields to lower saturation current).

ACKNOWLEDGMENTS

We thank A. R. Pereira, J. B. S. Mendes, E. F. Procópio, and N. T. Rodrigues for insightful discussions. We also acknowledge the financial support from FAPEMIG, CNPq, and CAPES (code-001) (Brazilian agencies).

APPENDIX A: SCHA

Conventional bosonic representations, like Schwinger [65–67], Holstein-Primakoff [68], and Dyson-Maleev [69–72] are not practical to treat BKT transition, we depart to adopt the SCHA [73–77]. The SCHA replaces the Hamiltonian given by Eq. (1) by a quadratic Hamiltonian with renormalized parameters that take into account higher-order contributions. Using the Villain representation [73], the ladder operators S^+ and S^- are represented by the φ and S^z operators as

$$S_i^+ = e^{i\varphi_i} \sqrt{S(S+1) - S_i^z(S_i^z+1)}, \quad (\text{A1})$$

$$S_i^- = \sqrt{S(S+1) - S_i^z(S_i^z+1)} e^{-i\varphi}. \quad (\text{A2})$$

Classically, φ and S^z fields obey Poisson brackets $\{\varphi_i, S_j^z\} = \delta_{ij}$ and, from quantum point of view, φ and S^z turn out to be canonically conjugate operators, *i.e.* $[\varphi_i, S_j^z] = i\delta_{ij}$. Considering a smooth spin field, we expanded the Hamiltonian (1) in powers of S_i^z and φ_i up to 2nd-order and, after a Fourier transform, we obtained

$$H = J \sum_q (H_q^\varphi \varphi_q \varphi_{-q} + H_q^z S_q^z S_{-q}^z), \quad (\text{A3})$$

where we defined the coefficients $H_q^\varphi = 4\tilde{S}^2\rho(1 - \gamma_q) + 2(J^z/J)\tilde{S}^2\rho^z(1 - \gamma_q^z) + (\mu_{BG}B\tilde{S}/J)\zeta$ and $H_q^z = 4(1 - \lambda_{xy}\gamma_q) + 2(J^z/J)(1 - \lambda_z\gamma_q^z) + (\mu_{BG}B/(J\tilde{S}))$. Here, $\tilde{S}^2 = S(S+1)$, $\gamma_q = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ and $\gamma_q^z = \cos q_z$ are structure factors for a quasi-2D square lattice. The intra- and interplane spin stiffness, ρ and ρ^z , respectively, and the ζ parameter are added to take into account higher order terms in the harmonic approximation, being determined by the Bogoliubov variational principle. Defining F as the Helmholtz free energy for the original Hamiltonian and F_0 as the free energy for the quadratic Hamiltonian then, ρ , ρ^z , and ζ should be chosen in order to satisfy the inequality $F \leq F_0 + \langle H - H_0 \rangle$, where the mean value is evaluated using

the harmonic Hamiltonian. Such a condition provides three self-consistent equations

$$\rho = \left(1 - \frac{\langle (S_i^z)^2 \rangle}{\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle \Delta\varphi^2 \rangle}, \quad (\text{A4})$$

$$\rho^z = \left(1 - \frac{\langle (S_i^z)^2 \rangle}{\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle \Delta\varphi_z^2 \rangle}, \quad (\text{A5})$$

$$\zeta = \left(1 - \frac{\langle (S_i^z)^2 \rangle}{2\tilde{S}^2}\right) e^{-\frac{1}{2}\langle \varphi^2 \rangle}. \quad (\text{A6})$$

The statistical averages $\langle \Delta\varphi^2 \rangle$ and $\langle \Delta\varphi_z^2 \rangle$ are evaluated between the four intraplane neighbors and the two interplane neighbors, respectively. Expressing φ_q and S_q^z in terms of the new bosonic operator a_q , defined by

$$\varphi_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{H_q^z}{H_q^\varphi} \right)^{1/4} (a_q^\dagger + a_{-q}), \quad (\text{A7})$$

$$S_q^z = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{H_q^\varphi}{H_q^z} \right)^{1/4} (a_q^\dagger - a_{-q}), \quad (\text{A8})$$

we obtain the harmonic Hamiltonian

$$H_0 = \sum_q \hbar\omega_q \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{A9})$$

with the magnon energy $\hbar\omega_q = 2J\sqrt{H_q^\varphi H_q^z}$. Considering small both the axial anisotropy and the interplane interaction, a straightforward expansion to second order provides the characteristic quadratic magnon dispersion for FM in the absence of magnetic fields

$$\omega_q \approx \frac{2J\tilde{S}\sqrt{\rho(1 - \lambda_{xy})}}{\hbar} (q_x^2 + q_y^2 + \kappa^2 q_z^2), \quad (\text{A10})$$

where the z -axis anisotropy κ is defined as

$$\kappa = \sqrt{\frac{J^z\rho + J^z(1 - \lambda_{xy})\rho^z}{2J\rho(1 - \lambda_{xy})}}. \quad (\text{A11})$$

By virtue of small interplane coupling, ω_q has a weak dependence with q_z and the magnon dispersion is almost constant along the z axis, parallel to NM/FMI interface. For $\lambda_{xy} = 0$ and $J^z = J$, $\kappa = 1$ and we recover the 3D isotropic dispersion $\omega_q = (2J\tilde{S}\sqrt{\rho}/\hbar)q^2$.

Using Eq. (A7), the following averages are determined in the thermodynamic limit:

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = \frac{1}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{H_q^\varphi}{H_q^z}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_q}{2T}\right), \quad (\text{A12})$$

$$\langle \varphi_i^2 \rangle = \frac{1}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{H_q^z}{H_q^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_q}{2T}\right), \quad (\text{A13})$$

$$\langle \Delta\varphi^2 \rangle = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1 - \gamma_q) \sqrt{\frac{H_q^z}{H_q^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_q}{2T}\right), \quad (\text{A14})$$

$$\langle \Delta\varphi_z^2 \rangle = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1 - \gamma_q^z) \sqrt{\frac{H_q^z}{H_q^\varphi}} \coth\left(\frac{\hbar\omega_q}{2T}\right). \quad (\text{A15})$$

It is well known that the spin stiffness exhibits a universal jump at T_{BKT} associated with vortex proliferation

[41–43,75,76]. The spin stiffness vanishes for $T > T_{\text{BKT}}$ while $\rho J \tilde{S}^2 / T$ tends to $2/\pi$ when $T \rightarrow T_{\text{BKT}}$. Therefore, φ should be split into two parts: $\varphi = \varphi_s + \varphi_v$, where φ_s describes the spin wave fluctuation, while φ_v is the vortex field. Unfortunately, the stiffness ρ obtained from SCHA takes into account only the spin wave contribution, neglecting any vortex effect. However, we can obtain the BKT temperature through the crossing between $\rho(T)$, obtained from the SCHA, and $2T/\pi J \tilde{S}^2$. In order to verify our equations, we determined the BKT temperature for potassium tetrafluorocuprate (K_2CuF_4), a well known layered ferromagnetic material with $S = 1/2$ [53–55,64]. Using $J = 23.86$ K, $J' = 0.016$ K and $J_a = 0.18$ K, the SCHA provides $T_{\text{BKT}} = 5.35$ K, in accordance with the experimental measure $T_{\text{BKT}} = 5.5$ K [54], and a better agreement than Irkhin [78] ($T_{\text{BKT}} = 11.4$ K) and Sachs [53] ($T_{\text{BKT}} = 7.9$ K).

APPENDIX B: THE MAGNON GREEN'S FUNCTION

The retarded magnon Green's function is defined by

$$i\hbar D_q^{\text{ret}}(t) = \theta(t) \langle [S_q^+(t), S_{-q}^-(0)] \rangle_0, \quad (\text{B1})$$

where we have considered mean values evaluated through the quadratic Hamiltonian from the SCHA. Using the Villain representation after the expansion of the ladder operators up to second order in φ and S^z , we obtain the mean value in momentum space

$$\begin{aligned} \langle [S_q^+(t), S_{-q}^-(0)] \rangle_0 &= \frac{1}{N} \sum_{\Delta r} \langle [S_{i+\Delta r}^+(t), S_i^-(0)] \rangle_0 e^{iq\Delta r} \\ &= \sinh^2 \theta_q \langle [a_q^\dagger(t), a_q(0)] \rangle_0 \\ &\quad + \cosh^2 \theta_q \langle [a_q(t), a_q^\dagger(0)] \rangle_0 \\ &= \langle [a_q(t), a_q^\dagger(0)] \rangle_0, \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

where we define a new bosonic operator given by $a_q = \sinh \theta_q a_q^\dagger + \cosh \theta_q a_q$, with

$$\sinh \theta_q = \sqrt{J \left(\frac{H_q^\varphi + 4\tilde{S}^4 H_q^z}{4\tilde{S}^2 \hbar \omega_q} \right) - \frac{1}{2}}, \quad (\text{B3a})$$

$$\cosh \theta_q = \sqrt{J \left(\frac{H_q^\varphi + 4\tilde{S}^4 H_q^z}{4\tilde{S}^2 \hbar \omega_q} \right) + \frac{1}{2}}. \quad (\text{B3b})$$

The retarded magnon Green's function then takes the form:

$$i\hbar D_q^{\text{ret}}(t) = \theta(t) \langle [a_q(t), a_q^\dagger(0)] \rangle_0, \quad (\text{B4})$$

which is similar to that obtained from the Holstein-Primakoff formalism [68], which defines the ladder operators in terms of bosonic operators b_q as $S_q^+ = \sqrt{2S} b_q$ and $S_q^- = \sqrt{2S} b_q^\dagger$ (note that, in this case, the spin field is aligned along the z direction). By the definition of D_q^{ret} , we interpret a_q^\dagger as an operator that creates a magnon with spin along the z axis as well as b_q^\dagger in Holstein-Primakoff representation. However, there is a difference in the spin orientation of the excited states obtained from our representation and the HP one. Since

the ground state presents magnetization along the x direction, due to the static magnetic field, the lowest energy excitations should be long-wavelength spin waves with spin aligned along the magnetization direction. Therefore, a_q operators create magnons states with spin along the x direction, different from a_q or b_q operators. Provided that the Hamiltonian given by Eq. (A9) is diagonalized by the a_q operators, we obtain $a_q(t) = e^{-i\omega_q t} a_q(0)$, whereas the states created by a_q^\dagger , which are not eigenstates of H , present a more complicated time evolution. As a consequence, the number operator $a^\dagger a$ does not commute with the Hamiltonian, as it is clear from the definition of a . Indeed, in the stationary state of the precession magnetization, the x component of the spin is conserved while the z component oscillates with a frequency defined by the energy eigenvalues. For that reason, the Green's function given by Eq. (B4) is composed of the linear combination of eigenstates of H_0 (at least for the case where the ladder operators are given by an expansion up to second order in φ and S^z). In the frequency space, the Green's function becomes

$$\hbar D_q^{\text{ret}}(\omega) = \frac{\cosh^2 \theta_q}{\omega - \omega_q + i\epsilon} - \frac{\sinh^2 \theta_q}{\omega + \omega_q + i\epsilon}, \quad (\text{B5})$$

in which, as usual, we introduced an infinitesimal factor $i\epsilon$ to ensure the convergence in the limit $t \rightarrow \infty$. The spectral function $R_q(\omega) = -2 \text{Im} D_q^{\text{ret}}(\omega) = -2\pi \hbar^{-1} [\sinh^2 \theta_q \delta(\omega + \omega_q) - \cosh^2 \theta_q \delta(\omega - \omega_q)]$ provides two excitations, whose energies are given by $E = \pm \hbar \omega_q$. The negative energy excitation is associated with a magnon with inverse spin moving in the opposite direction, and therefore both modes contribute to the positive spin current.

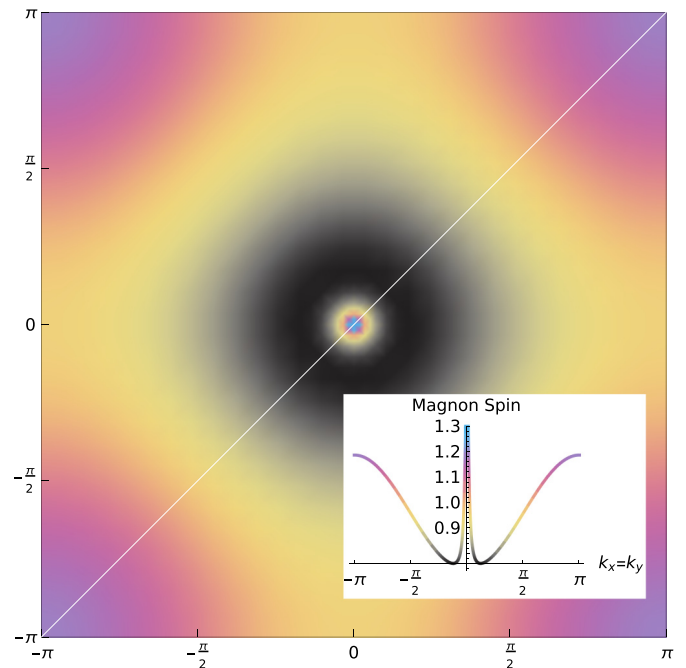


FIG. 5. The magnon spin in the Brillouin zone. Due to the adopted approximations, the spin is slightly larger than unity in some regions of the BZ but an average over the whole zone provides an according result. The inset shows the spin over the diagonal line.

TABLE I. The average spin $\langle S_m \rangle$ and the standard deviation σ of the excitation obtained from SCHA. The values are in accordance with the expected value of the magnon spin.

J^z/J	λ_{XY}	$g\mu_B B_s/J$	$\langle S_m \rangle$	σ
10^{-2}	0.90	10^{-1}	0.970	0.008
10^{-2}	0.90	10^{-2}	1.012	0.015
10^{-2}	0.99	10^{-1}	0.987	0.015
10^{-2}	0.99	10^{-2}	0.939	0.010
10^{-3}	0.90	10^{-1}	0.982	0.011
10^{-3}	0.90	10^{-2}	0.984	0.016
10^{-3}	0.99	10^{-1}	1.000	0.017
10^{-3}	0.99	10^{-2}	0.992	0.016

For finite temperature, it is useful to consider the Matsubara Green's function

$$\hbar \mathcal{D}_q(\omega_m) = \frac{\cosh^2 \theta_q}{i\omega_m - \omega_q} - \frac{\sinh^2 \theta_q}{i\omega_m + \omega_q}, \quad (\text{B6})$$

with the bosonic frequencies $\omega_m = 2\pi m/\beta\hbar$, $m \in \mathbb{Z}$. After summing over the Matsubara frequencies, we have

$$\mathcal{D}_q(\tau) = \cosh^2 \theta_q \Upsilon_q(\tau) + \sinh^2 \theta_q \Upsilon_q(-\tau), \quad (\text{B7})$$

where

$$\hbar \Upsilon_q(\tau) = -\langle T_\tau a_q(\tau) a_q^\dagger(0) \rangle = -e^{-\omega_q \tau} [n_q + \theta(\tau)] \quad (\text{B8})$$

represents the Matsubara Green's function for the a_q mode.

In order to probe the spin of the excitations described by the a operators, we evaluated the energy increase due to magnetic fields and associated it with the energy spin fluctuations. We can define the magnon spin $\langle S_m \rangle$ by the energy difference: $g\mu_B B_s \langle S_m \rangle = \langle \hbar\omega_q(B_s) - \hbar\omega_q(0) \rangle$, where the mean value is obtained over the first Brillouin zone. In Fig. 5, we show the result for $g\mu_B B_s = 0.01J$, $J^z = 10^{-3}J$, $\lambda_{XY} = 0.99$ and $S = 1/2$ (other combinations of J^z , λ_{XY} and B_s provide similar graphs). Since the propagators are evaluated considering a quadratic expansion in S^z and ϕ , the results are not exact; however, except for some regions of the first Brillouin zone, the spin value is only slightly larger than unity. The average over the Brillouin zone in Fig. 5 gives $\langle S_m \rangle = 0.992(16)$. For $S = 1/2$, we also found the average $\langle S_m \rangle$ and the standard deviation σ for many combinations of the interactions parameters and the static magnetic field B_s . As shown in Table I, the results are in agreement with the integer magnon spin.

- [1] S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman, J. Daughton, S. Von Molnar, M. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [2] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [3] S. Bader and S. Parkin, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 71 (2010).
- [4] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, and G. E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 117601 (2002).
- [5] A. Azevedo, L. H. Vilela-Leão, R. L. Rodríguez-Suárez, A. F. Lacerda Santos, and S. M. Rezende, *Phys. Rev. B* **83**, 144402 (2011).
- [6] S. Takahashi, E. Saitoh, and S. Maekawa, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 062030 (2010).
- [7] S. Garzon, I. Žutić, and R. A. Webb, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 176601 (2005).
- [8] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
- [9] J. B. S. Mendes, R. O. Cunha, O. Alves Santos, P. R. T. Ribeiro, F. L. A. Machado, R. L. Rodríguez-Suárez, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Phys. Rev. B* **89**, 140406(R) (2014).
- [10] S. Takei, B. I. Halperin, A. Yacoby, and Y. Tserkovnyak, *Phys. Rev. B* **90**, 094408 (2014).
- [11] S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, and A. Azevedo, *Phys. Rev. B* **93**, 054412 (2016).
- [12] L. J. Cornelissen, K. J. H. Peters, G. E. W. Bauer, R. A. Duine, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **94**, 014412 (2016).
- [13] W. Lin, K. Chen, S. Zhang, and C. L. Chien, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 186601 (2016).
- [14] S. Okamoto, *Phys. Rev. B* **93**, 064421 (2016).
- [15] D. Wessenberg, T. Liu, D. Balzar, M. Wu, and B. L. Zink, *Nat. Phys.* **13**, 987 (2017).
- [16] K. Oyanagi, S. Takahashi, L. J. Cornelissen, J. Shan, S. Daimon, T. Kikkawa, G. E. W. Bauer, B. J. van Wees, and E. Saitoh, *Nat. Commun.* **10**, 4740 (2019).
- [17] V. S. U. A. Vargas and A. R. Moura, *Phys. Rev. B* **102**, 024412 (2020).
- [18] A. Najmaie, R. D. R. Bhat, and J. E. Sipe, *Phys. Rev. B* **68**, 165348 (2003).
- [19] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 176601 (2004).
- [20] D. D. Awschalom and M. E. Flatté, *Nat. Phys.* **3**, 153 (2007).
- [21] C. Brüne, A. Roth, E. Novik, M. König, H. Buhmann, E. Hankiewicz, W. Hanke, J. Sinova, and L. Molenkamp, *Nat. Phys.* **6**, 448 (2010).
- [22] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834 (1999).
- [23] S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 393 (2000).
- [24] J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).
- [25] V. P. Amin and M. D. Stiles, *Phys. Rev. B* **94**, 104419 (2016).
- [26] V. P. Amin and M. D. Stiles, *Phys. Rev. B* **94**, 104420 (2016).
- [27] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nature (London)* **455**, 778 (2008).
- [28] K. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, J. Ohe, S. Takahashi, J. Ieda, T. Ota, Y. Kajiwara, H. Umezawa, H. Kawai, G. E. W. Bauer, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nat. Mater.* **9**, 894 (2010).
- [29] A. Azevedo, L. Vilela Leao, R. Rodriguez-Suarez, A. Oliveira, and S. Rezende, *J. Appl. Phys.* **97**, 10C715 (2005).
- [30] Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nature (London)* **464**, 262 (2010).
- [31] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, and G. Tatara, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 182509 (2006).

- [32] T. Kimura, Y. Otani, T. Sato, S. Takahashi, and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 156601 (2007).
- [33] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Nature (London)* **442**, 176 (2006).
- [34] K. Shen, G. Vignale, and R. Raimondi, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 096601 (2014).
- [35] M. D. Stiles and A. Zangwill, *Phys. Rev. B* **66**, 014407 (2002).
- [36] D. C. Ralph and M. D. Stiles, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1190 (2008).
- [37] P. Hyde, L. Bai, D. M. J. Kumar, B. W. Southern, C.-M. Hu, S. Y. Huang, B. F. Miao, and C. L. Chien, *Phys. Rev. B* **89**, 180404(R) (2014).
- [38] J. Xiao and G. E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 217204 (2012).
- [39] A. Manchon, J. Železný, I. M. Miron, T. Jungwirth, J. Sinova, A. Thiaville, K. Garello, and P. Gambardella, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 035004 (2019).
- [40] M. Madami, S. Bonetti, G. Consolo, S. Tacchi, G. Carlotti, G. Gubbiotti, F. B. Mancoff, M. A. Yar, and J. Åkerman, *Nat. Nanotechnol.* **6**, 635 (2011).
- [41] V. L. Berezinski, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **59**, 907 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **32**, 493 (1971)].
- [42] V. L. Berezinski, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61**, 1144 (1972) [*Sov. Phys.* **34**, 610 (1972)].
- [43] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- [44] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **16**, 1217 (1977).
- [45] R. Lopes and A. Moura, *Phys. Lett. A* **382**, 1492 (2018).
- [46] M. E. Gouvea, F. G. Mertens, A. R. Bishop, and G. M. Wysin, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 1853 (1990).
- [47] A. S. T. Pires, A. R. Pereira, and M. E. Gouvêa, *Phys. Rev. B* **49**, 9663 (1994).
- [48] A. R. Pereira, A. S. T. Pires, and M. E. Gouvea, *Phys. Rev. B* **51**, 16413 (1995).
- [49] M. Ito, *Prog. Theor. Phys.* **66**, 1129 (1981).
- [50] V. L. Berezinski and A. Y. Blank, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **64**, 725 (1973) [*Sov. Phys. JETP* **37**, 369 (1973)].
- [51] V. L. Pokrovski and G. V. Uimin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **65**, 1691 (1974) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 847 (1974)].
- [52] G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter (Dover Books on Physics)* (Dover, New York, 2013).
- [53] B. Sachs, T. O. Wehling, K. S. Novoselov, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **88**, 201402(R) (2013).
- [54] K. Hirakawa, H. Yoshizawa, and K. Ubukoshi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **51**, 2151 (1982).
- [55] S. Hirata, N. Kurita, M. Yamada, and H. Tanaka, *Phys. Rev. B* **95**, 174406 (2017).
- [56] J. B. Grant and A. K. McMahan, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 488 (1991).
- [57] A. S. T. Pires, L. S. Lima, and M. E. Gouvêa, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 015208 (2007).
- [58] N. Read and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **42**, 4568 (1990).
- [59] J. Kondo, *Solid State Phys.* **23**, 183 (1970).
- [60] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [61] A. Pereira, A. Pires, and M. Gouvêa, *Solid State Commun.* **86**, 187 (1993).
- [62] A. Pereira, A. Pires, and M. Gouvêa, *Phys. Lett. A* **176**, 279 (1993).
- [63] J. Li, Y. Xu, M. Aldosary, C. Tang, Z. Lin, S. Zhang, R. Lake, and J. Shi, *Nat. Commun.* **7**, 10858 (2016).
- [64] K. Hirakawa and H. Yoshizawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **47**, 368 (1979).
- [65] J. Schwinger, *On Angular Momentum*, Technical Report No. NYO-3071, Harvard University, Nuclear Development Associates, United States, 1952.
- [66] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism* (Springer, Berlin, 2011).
- [67] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, New York, 1994).
- [68] T. Holstein and H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940).
- [69] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1217 (1956).
- [70] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1230 (1956).
- [71] S. V. Maleev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **33**, 1010 (1958) [*Sov. Phys. JETP* **6**, 776 (1958)].
- [72] S. Dembiński, *Physica* **30**, 1217 (1964).
- [73] J. Villain, *J. Phys.* **35**, 27 (1974).
- [74] A. S. T. Pires and M. E. Gouvêa, *Phys. Rev. B* **48**, 12698 (1993).
- [75] A. Pires, *Solid State Commun.* **104**, 771 (1997).
- [76] A. S. Pires and M. E. Gouvêa, *Eur. Phys. J. B* **44**, 169 (2005).
- [77] A. Moura and R. Lopes, *J. Magn. Magn. Mater.* **472**, 1 (2019).
- [78] V. Y. Irkhin and A. A. Katanin, *Phys. Rev. B* **60**, 2990 (1999).

Capítulo 3

Possível extinção da uma transição BKT por interação diagonais em uma rede checkerboard.

Este trabalho encontra finalizado e publicado em PLA 382 (22) 1492–1498 2018 [2]. Uma cópia está anexada ao final do capítulo.

Neste trabalho, estudaremos a transição BKT em uma rede Checkerboard. Neste modelo, temos uma rede quadrada que possui uma interação J entre seus primeiros vizinhos e uma interação J' entre metade de seus segundos vizinhos. Esta interação diagonal (entre segundos vizinhos) dá-se somente em uma direção para sítios de uma sub-rede A (azul), e para sub-rede B (vermelha) ocorre em uma direção perpendicular à primeira. No limite completamente

degenerado ($J' = J$), esta rede trata-se da planificação de uma rede pirocloro. Mostraremos que a temperatura BKT possivelmente anula-se para uma razão crítica $\eta_c = J'/J$, indicando que sistema torna-se completamente desordenado mesmo à temperatura zero.

Para descrever este sistema, utilizaremos o modelo de Heisenberg para as interações entre primeiros e segundos vizinhos. Como o modelo de Heisenberg isotrópico não apresenta uma transição BKT, incluímos uma anisotropia de sítio único que favorece o surgimento de configurações planares, com simetria $O(2)$, de forma que uma transição BKT seja esperada. A Hamiltoniana é então dada por:

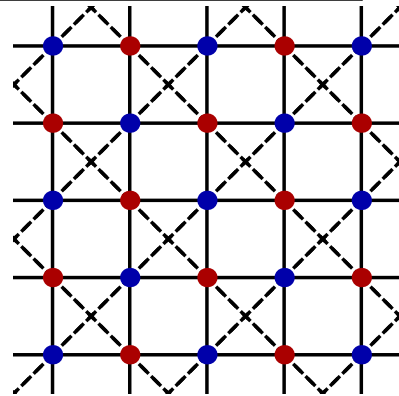


Figura 3.1: Rede Checkerboard. Linhas contínuas representam acoplamento J enquanto linhas tracejadas representam acoplamento J'

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (3.1)$$

onde as constantes J e J' são positivas, tratando-se portanto do caso antiferromagnético.

Estudos recentes indicam que a temperatura BKT é reduzida à medida que a interação J' aumenta, contribuindo para a proliferação de vórtices [90]. Esta redução na temperatura BKT pode ser entendida olhando-se para dois limites da razão entre as constantes de interação $\eta = J'/J$. Para uma anisotropia $D > 0$, no limite em que $\eta \rightarrow 0$ temos um sistema quase-planar onde uma transição BKT é esperada, e portanto, T_{BKT} é finita. Já para limite em que $\eta \rightarrow \infty$ o sistema será composto por cadeias unidimensionais fracamente acopladas, ou desacopladas, que não apresentam uma transição BKT.

Neste trabalho serão considerados os limites $\eta < 1$ até $\eta \sim 1$. Nosso objetivo é obter uma estimativa, caso exista, do valor para a razão η tal que a temperatura BKT anule-se. Para atingirmos tal objetivo, adotamos duas abordagens complementares. Na primeira, obtemos o modelo contínuo, que consiste no Modelo Sigma Não Linear (MSNL) $O(3)$ com um termo de massa devido à anisotropia. Integramos a componente fora do plano e obtemos um modelo com simetria $O(2)$ com constantes de acoplamento renormalizadas, desta forma, podemos obter a temperatura BKT em função dos acoplamentos η e anisotropia (D) do sistema. Na segunda abordagem, utilizamos simulações de Monte Carlo para também determinar a temperatura BKT bem como a energia do vórtice.

3.1 Métodos

3.1.1 Tratamento Teórico

Como estamos adotando o limite em que $\eta \leq 1$, escolhemos a aproximação para o estado fundamental do sistema como um estado de Néel entre os primeiros vizinhos e tratamos a interação J' como uma perturbação do sistema. Então para obtermos o modelo contínuo do sistema, podemos parametrizar \vec{S} da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \vec{S}_i &= S \vec{\Omega}_i \\ \vec{\Omega}_i &= (-1)^{i \cdot \vec{Q}} \vec{n}_i + \vec{a} \vec{l}_i \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $Q = (\pi/a, \pi/a)$ é o vetor de onda para o estado de Néel, \vec{n}_i é o campo de flutuações lentas (ou modos lentos) para a magnetização e \vec{l}_i é o campo de oscilações rápidas (ou modos rápidos), a é o espaçamento de rede.

A ação para o sistema é escrita como segue:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}[\vec{\Omega}] &= \sum_{\text{spins}} i\hbar S \omega[\vec{\Omega}] + \int_0^{\beta\hbar} d\tau H(\tau) \\
\sum_{\text{spins}} i\hbar S \omega[\vec{\Omega}] &= \frac{i\hbar S}{a} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^2r \vec{l} \cdot \left(\frac{\partial \vec{n}}{\partial \tau} \times \vec{n} \right) \\
\int_0^{\beta\hbar} d\tau H(\tau) &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^2r \left[\frac{JS^2}{4} (2 - \eta) (\nabla \vec{n})^2 + JS^2 (2 + \eta) \vec{l}^2 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{DS^2}{a^2} (n^z)^2 + 2DS^2 (l^z)^2 \right]
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Integrando sobre os modos rápidos, obtemos uma ação efetiva a baixas energias dada por:

$$\frac{\mathcal{S}_{\text{eff}}}{\hbar} = \frac{1}{2f} \int d^{2+1}r \left[(\partial_\mu \vec{n})^2 + \mu^2 (n^z)^2 - \kappa (\partial_0 \vec{n} \times \vec{n})_z^2 \right], \tag{3.4}$$

sendo

$$\begin{aligned}
\partial_\mu &= \partial^\mu = (c_0^{-1} \partial_\tau, \vec{\nabla}) \\
\kappa &= \frac{2D}{J(2 + \eta) + 2D} \quad \text{uma constante anisotrópica,} \\
c_0 &= \frac{2JS\sqrt{(2 - \eta)(2 + \eta)}}{\Lambda\hbar} \quad \text{a velocidade das ondas de spin,} \\
f &= \frac{2}{\Lambda S} \sqrt{\frac{2 + \eta}{2 - \eta}} \quad \text{a constante de acoplamento e} \\
\mu^2 &= \frac{4D\Lambda^2}{J(2 - \eta)} \quad \text{o termo de massa.}
\end{aligned}$$

Na presença de uma anisotropia de sítio único, a simetria $O(3)$ do sistema é reduzida para uma simetria $O(2)$, como já comentado anteriormente. Aqui, através de simples considerações, podemos simplificar e reescrever a ação em sua forma clássica como segue:

(i) Como a transição BKT é um fenômeno clássico, podemos considerar $\beta\hbar c_0 \ll a$ (limite de pequenas flutuações quânticas) tornando o intervalo de tempo muito pequeno. Além disso, podemos assumir campos que independem ou variam muito lentamente no tempo imaginário τ . Desta forma, podemos definir uma ação clássica como:

$$\frac{\mathcal{S}_{\text{eff}}}{\hbar} = \mathcal{S}_{\text{cl}} = \frac{1}{2g_0} \int d^2r \left[\nabla \vec{n} \cdot \nabla \vec{n} + \mu^2 (n^z)^2 \right] \quad , \quad \text{onde} \quad g_0(T) = \frac{2T}{J(T)S^2(2-\eta)} \quad (3.5)$$

(ii) Podemos parametrizar o campo de spin através de dois campos escalares auxiliares, da seguinte forma $\vec{n} = (\sqrt{1-m^2} \cos \theta, \sqrt{1-m^2} \sin \theta, m)$. Aqui, devido a anisotropia D , podemos considerar o campo m pequeno e expandir até segunda ordem obtendo

$$\mathcal{S}_{\text{cl}} = \frac{1}{2g_0} \int d^2r \left[(\nabla \theta)^2 - m^2 (\nabla \theta)^2 + (\nabla m)^2 + \mu^2 m^2 + \frac{1}{4} (\nabla m^2)^2 \right] \quad (3.6)$$

Podemos dividir a ação anterior em 3 diferentes partes. **(1)** Termos dependentes somente do campo angular θ , **(2)** termos dependentes somente do campos de flutuações fora do plano m e **(3)** termos mistos entre os campos θ

e m , representando uma “interação” entre ambos. O campo angular θ possui um papel fundamen-

tal na descrição da transição BKT, uma vez que o mesmo contém toda a informação sobre os vórtices e a propagação de ondas de spin no plano e, como estamos interessados em obter a temperatura onde ocorre a transição BKT, podemos integrar m na função de partição do sistema, obtendo assim, uma ação efetiva para o campo θ renormalizado. Na figura acima, as linhas onduladas representam o propagador do campo m e as linhas sólidas representam o propagador do campo θ e entre colchetes estão presentes todas as correções até segunda ordem para a função vértice de 2 pontos do campo θ .

Após regularizações dimensionais, renormalizamos a constante de acoplamento g e o campo θ de modo a obtermos a seguinte expressão auto-consistente para determinação da temperatura de transição BKT sendo da por;

$$T_{BKT} = \frac{E_c}{\ln(2\pi^2) - \ln(\pi - 2g(T_{BKT}))} \quad (3.7)$$

onde E_c é a energia do núcleo do vórtice. A dependência com os parâmetros da interação estão contidos dentro a constante de acoplamento $g(T)$ (para mais detalhes, consultar

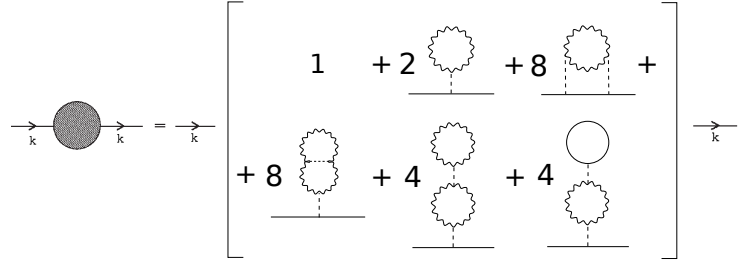


Figura 3.2: Todas os possíveis diagramas para correções do propagador do campo θ a até 2-loops, juntamente com a multiplicidade de cada diagrama

ref. [2]).

3.1.2 Simulação Computacional

Adotamos um método de Monte Carlo misto, combinando atualizações de configurações seguindo *single spin flips* e *cluster flips*, para calcular a helicidade (também chamada de *spin stiffness*) neste sistema. O *single spin flip* é a tentativa de alterar a orientação de um único spin, enquanto o *cluster flip* altera um aglomerado de spins.

A probabilidade de realizar um *single spin flip* para um spin aleatório no sistema é dada pelo peso de Boltzmann $e^{-\beta\Delta E}$. Já a construção de um aglomerado de spin, seguindo o método de Wolff, dá-se da seguinte forma:

- (i) Sorteia-se um spin aleatório do sistema;
- (ii) Adiciona-se seus primeiros vizinhos ao *cluster* seguindo a probabilidade $p = 1 - \exp\{\min[0, 2\beta J(\hat{n} \cdot \vec{S}_i)(\hat{n} \cdot \vec{S}_i)]\}$, onde \hat{n} é um vetor aleatório;
- (iii) A alteração da configuração se dá pela inversão de todas as componentes dos spins paralelas ao vetor \hat{n} . A probabilidade de aceitação do novo estado também segue um peso tipo Boltzmann.

Cada passo de Monte Carlo (**MCS**) consiste de L^2 atualizações de Metropolis (*single spin flip*) [91, 92] e $0.2L^2$ atualizações de Wolff Cluster [92, 93], onde L é o tamanho do sistema. Utilizamos 10^6 **MCS** para o cálculo das médias da helicidade a cada temperatura. Para garantirmos a termalização em cada passo, são descartados ao início da simulação para cada temperatura $2L^2$ **MCS**. Seguindo a literatura [94, 95], podemos facilmente mostrar que a helicidade Υ para a Hamiltoniana da eq.(3.1) assume a seguinte forma:

$$\Upsilon(T) = -\frac{1}{2}\langle H \rangle - \frac{1}{TN} \left\langle \left[J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{r}_{ij} \cdot \hat{x})(S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) + J' \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{r}_{ij} \cdot \hat{x})(S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) \right]^2 \right\rangle \quad (3.8)$$

onde \hat{r}_{ij} é o vetor unitário apontando do sítio i (\vec{r}_i) para o sítio j (\vec{r}_j), o módulo do spin é unitário ($S = 1$) e $\langle (\dots) \rangle$ representam médias estatísticas usuais.

Além disso, é muito bem estabelecido que a helicidade, ao passar pela temperatura crítica (T_{BKT}) salta de forma descontínua de $2T_{BKT}/\pi$ para 0 [96]. Então, olhando para o

ponto onde a helicidade cruza com a reta $2T/\pi$ para diferentes tamanhos é uma excelente maneira para determinar T_{BKT} usando a relação de escala [97]:

$$T(L) = T_\infty + \frac{\pi}{(4c \ln L)^2}, \quad (3.9)$$

Todas as simulações foram realizadas para seis distintos tamanhos de rede ($L = 16, 32, 64, 128, 256, 512$) e para razões $\eta = J'/J \lesssim 1.0$. Para $\eta = J'/J \gtrsim 1.0$, efeitos de congelamento e de *critical slowing down* tornam a determinação da temperatura imprecisa e complicada. Por fim, todas as barras de erro apresentadas advêm de erros estatísticos do cálculo nas médias da helicidade através das simulações de Monte Carlo.

Abaixo, segue o algoritmo completo:

- (0) Escolha um estado inicial e calcule sua energia;
- (1) Escolha um sítio aleatório i do sistema;
- (2) Modifica sua orientação aleatoriamente no espaço e calcule a diferença de energia resultante desta modificação ΔE (passo *single spin flip*);
 - [(2.1)] A cada 5 *single spin flip*, realize um *cluster flip*;
- (4) Gere um número aleatório entre r , uniformemente distribuído entre 0 e 1 ($0 < r < 1$);
- (5) Se $r < e^{-\beta\Delta E}$, aceite a mudança na configuração;
- (6) Retorne ao passo (1).

3.2 Resultados

Como podemos observar na eq.(3.7), para que possamos conhecer o comportamento teórico da temperatura BKT, primeiramente precisamos determinar o comportamento da energia do núcleo do vórtice. Inclusive, uma dependência entre a E_c e T_{BKT} é esperada, onde um aumento na energia do núcleo se refletiria no aumento da temperatura BKT. Adiante veremos que uma sutil mudança na energia do núcleo pode não ocasionar uma redução nesta temperatura.

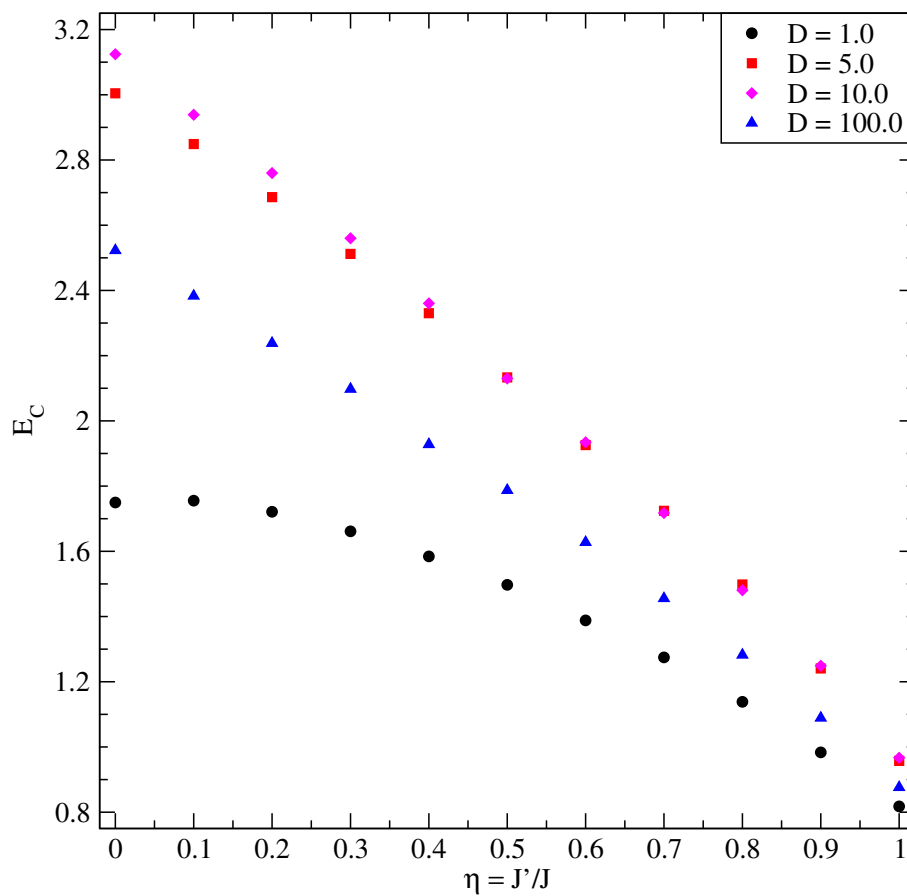


Figura 3.3: Energia do núcleo do vórtice E_c (em unidades de JS^2 vs η para diferentes anisotropias D . Notamos um comportamento quase linear para grandes valores de D .

Como pode ser notado na figura anterior, especialmente para grandes valores da constante de anisotropia D , o comportamento da energia do núcleo do vórtice é quase linear em η . Sendo assim, adotaremos um comportamento linear decrescente para E_c em função de η . Apesar de as simulações indicarem que uma função mais complexa seja necessária para o caso em que D é pequeno, também adotaremos um ajuste linear neste caso que,

para nossos propósitos, será suficiente. Utilizando então esta consideração, podemos plotar o gráfico da temperatura BKT reduzida $t_{BKT} = T_{BKT}/JS^2$ em função de η , obtendo então:

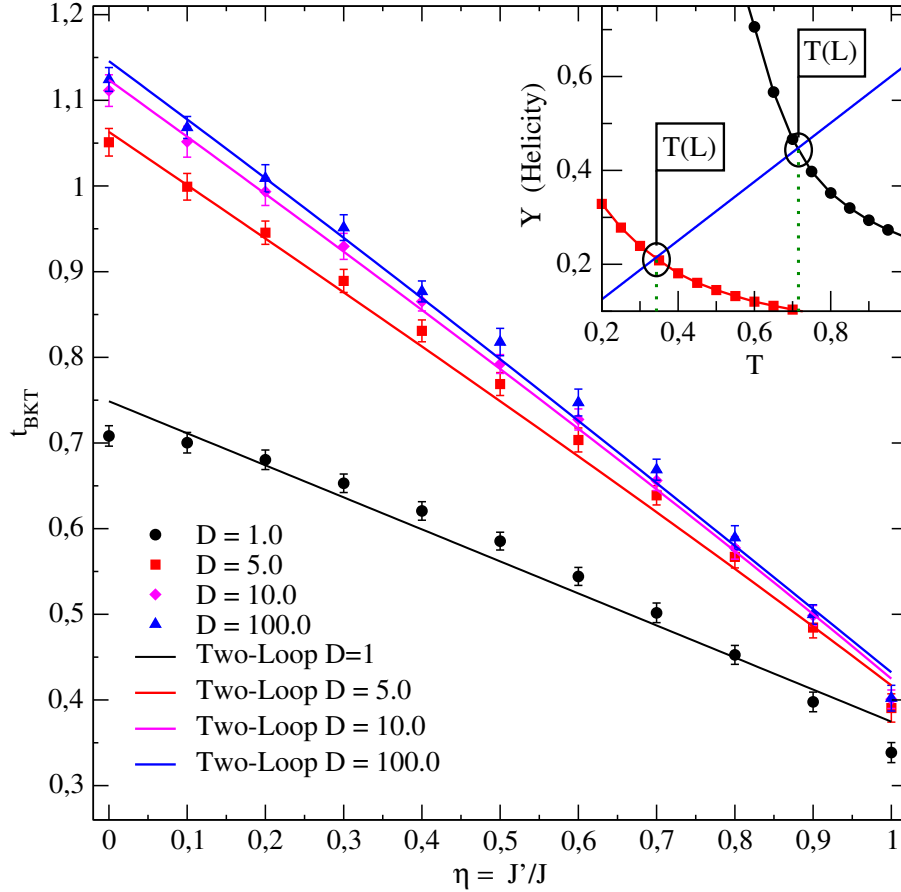


Figura 3.4: Temperatura reduzida t_{BKT} em função de η . As linhas contínuas representam os resultados teóricos e os pontos foram obtidos via simulação. O gráfico interno mostra o processo de obtenção de T_{BKT} via interseção da helicidade Υ com a curva $(2/\pi)T$

Para os resultados teóricos (linhas contínuas), devido à consideração de comportamento linear para a energia do núcleo do vórtice, obtemos também uma relação quase linear entre a temperatura BKT reduzida t_{BKT} e η . É importante salientar a existência de correções logarítmicas nas curvas teóricas acima, porém tais correções são extremamente pequenas, prevalecendo o comportamento linear.

Usando este comportamento linear, podemos determinar o valor crítico de η tal que a temperatura BKT anula-se no limite para grandes valores de D . Naturalmente, este procedimento é uma estimativa, uma vez que o modelo teórico e as simulações foram desenvolvidas no intervalo em que $0 \leq \eta \leq 1$. Ou seja, para extrair o valor de η_c , estamos

assumindo que o comportamento de t_{BKT} em função de η é mantido para $\eta > 1$. Uma investigação mais precisa pode ser feita, analisando-se o limite para $\eta \gg 1$ através da consideração de um estado fundamental ao longo da direção J' e repetindo-se os passos do capítulo 2.

O resultado para η_c em função de D e D^{-1} encontram-se no gráfico a seguir:

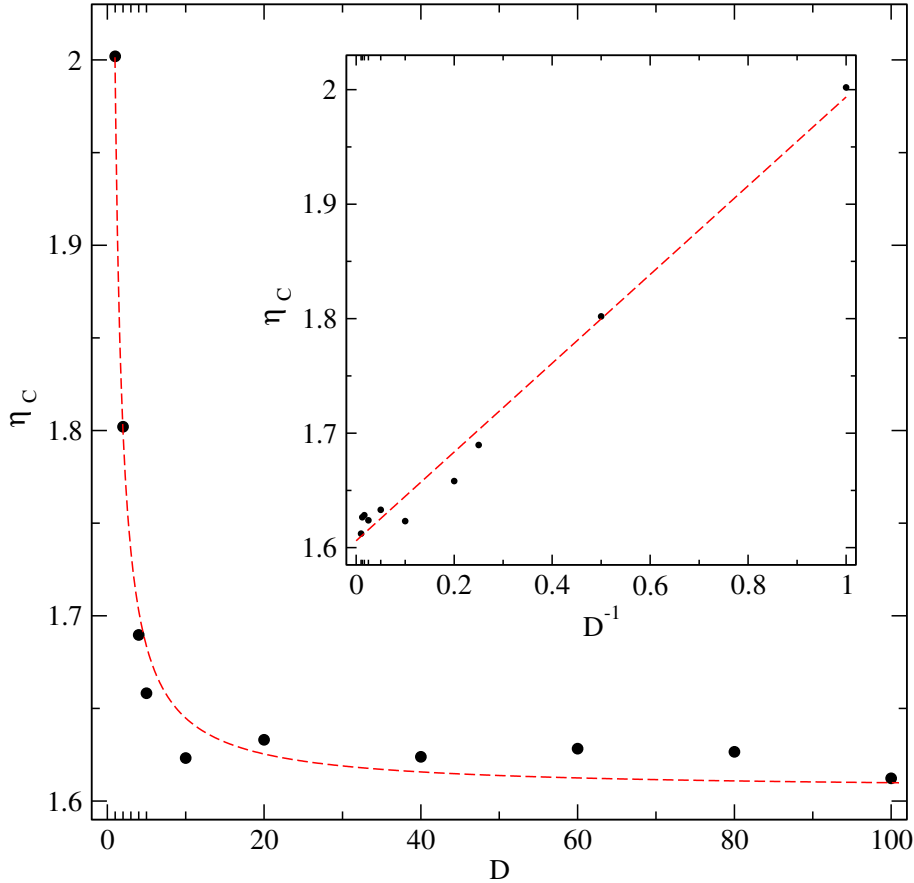


Figura 3.5: η_c como uma função de D (gráfico externo) e de D^{-1} (gráfico interno). As linhas tracejadas foram obtidas considerando-se um ajuste linear entre η_c e D^{-1} .

Novamente, podemos notar um comportamento aparentemente linear entre η_c e D^{-1} . Adotando então um ajuste linear para este caso obtemos,

$$\eta_c = 1,606 + \frac{0,388}{D} \quad (3.10)$$

o que nos fornece o limite de $\eta_c = 1,606$ para $D \rightarrow \infty$.

A relação entre a anisotropia de sitio único D e o comportamento de E_c e de t_{BKT} também é de grande interesse. Em uma análise preliminar, para pequenos valores de D ,

uma componente fora do plano para o núcleo do vórtice é esperada, de forma a minimizar a sua energia. Porém, um pequeno incremento na anisotropia δD gera um aumento na energia do núcleo, de forma que esperamos que E_c seja uma função crescente em D no regime de D pequeno. Já o oposto, o regime para grande valores de D , o custo energético de uma componente fora do plano para o núcleo do vórtice é extremamente elevado, de forma que favorece-se configurações onde os núcleos sejam planares ou quase-planares. Desta forma, dado o favorecimento do surgimento deste tipo de solução, espera-se que E_c seja uma função decrescente em D no regime de D grande. Abaixo, segue a curva de E_c em função de D para diferentes valores de η . O procedimento para obtenção de E_c é análogo ao adotado anteriormente:

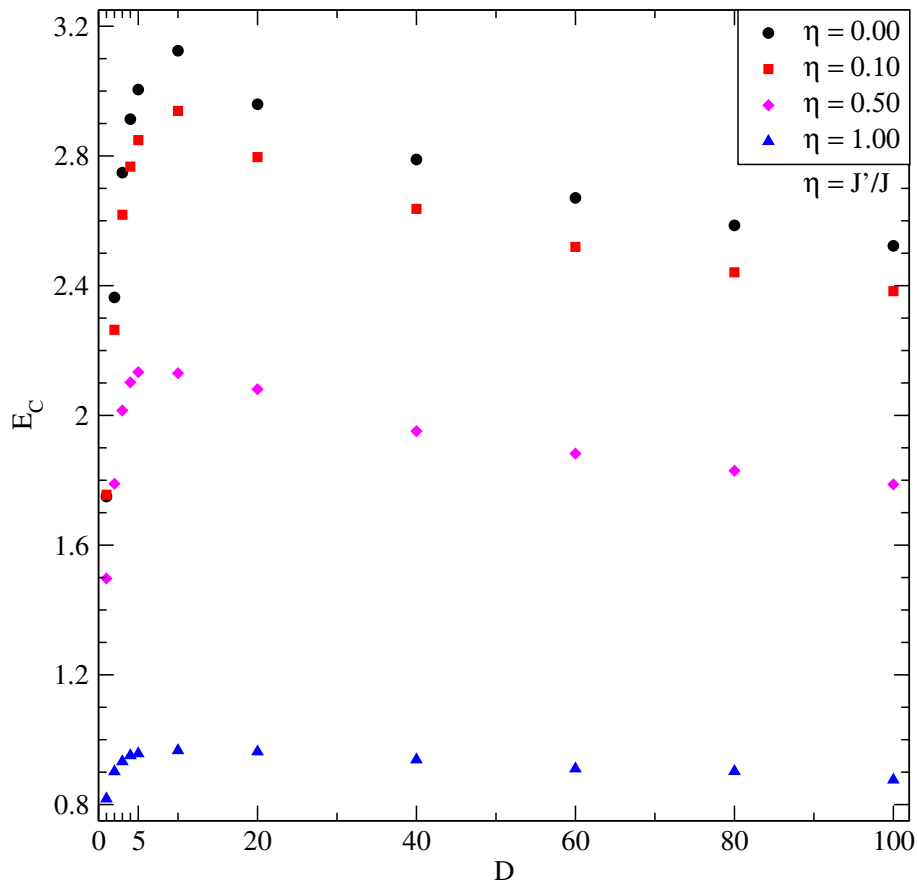


Figura 3.6: Energia do núcleo do vórtice E_c (unidade de JS^2) em função da anisotropia de sítio único D .

Como podemos notar, existe um valor crítico D_c entre $5 \lesssim D_c/J \lesssim 10$ que separa dois regimes para E_c , corroborando o que havíamos discutido anteriormente. Aqui vale

notar que este é um resultado somente perante a aplicação do grupo de renormalização, acrescentando as correções de 1 e 2-loops dado que, a constante de acoplamento “não-interagente” g_0 não leva em conta a anisotropia D , apenas após sua renormalização passamos a ter tal dependência.

Na próxima figura, temos o comportamento obtido computacionalmente da temperatura BKT reduzida como função de D^{-1} para diferentes acoplamentos η .

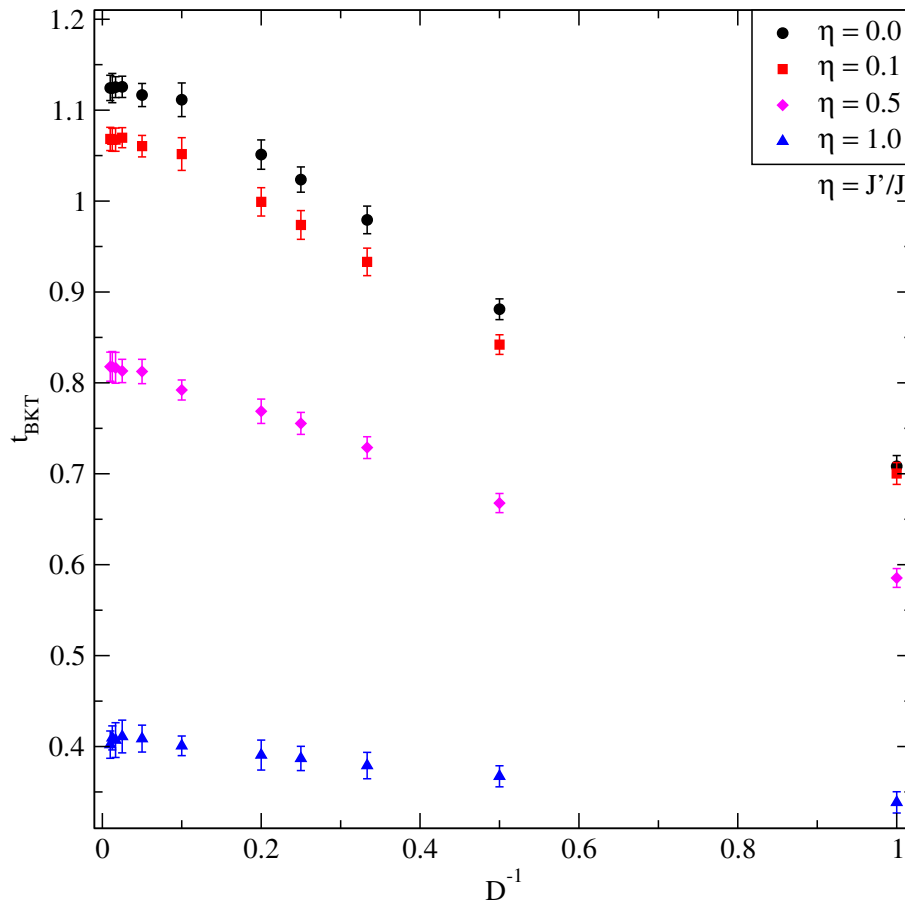


Figura 3.7: Temperatura BKT reduzida $t_{BKT} = T_{BKT}/JS^2$ em função de D^{-1}

E novamente, observamos dois comportamentos:

- (i) No regime para pequenos valores de D ($D < D_C$), a temperatura BKT é uma função crescente em D , em acordo com o comportamento de E_c . Ou seja, um aumento no valor de E_c favoreceu um aumento na temperatura de transição t_{BKT} .
- (ii) No regime para grandes valores de D ($D > D_C$), a energia do núcleo do vórtice sofre um lento decréscimo enquanto a temperatura BKT assume um valor aproxima-

damente constante. Este é mais um resultado associado às correções de 1 e 2-loops para a constante de acoplamento g .

3.3 Conclusões

No presente trabalho, estudamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético clássico bidimensional, na rede Checkerboard, com anisotropia de sítio único. Tal anisotropia favorece o surgimento de uma simetria $O(2)$, de forma que uma transição BKT seja esperada. Em resumo, fomos capazes de determinar teoricamente, via grupo de renormalização, e computacionalmente, o comportamento da temperatura de transição BKT como função do acoplamento J' e da anisotropia de sítio único D , estando todos os resultados de acordo com o esperado.

Entre alguns dos principais resultados deste trabalho, obtivemos uma estimativa de valor crítico para a razão $\eta_c = J'/J$ tal que, a transição BKT é extinta devido a completa desordem do sistema;

Além disso, apesar do sistema ser clássico, e não possuir uma transição de fase para D grande, tal qual seu análogo quântico, observamos dois regimes distintos para energia do núcleo do vórtice E_c à medida que aumentamos o valor de D . Esta mudança de regime esta associada à facilidade no surgimento de soluções tipo vórtice totalmente planares ou quase-planares, dado que o custo energético para que seu núcleo tenha uma componente fora do plano torna-se elevado.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters A

www.elsevier.com/locate/pla



Possible extinction of Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition by diagonal interactions in the checkerboard lattice

R.J.C. Lopes*, A.R. Moura

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36570-900, Viçosa, Minas Gerais, Brazil



ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 March 2018

Received in revised form 30 March 2018

Accepted 31 March 2018

Available online 4 April 2018

Communicated by L. Ghivelder

Keywords:

Checkerboard lattice

Antiferromagnetic Heisenberg model

BKT transition

 $O(3)$ Nonlinear Sigma Model

Monte Carlo simulation

ABSTRACT

We study the thermodynamics of the classical anisotropic antiferromagnetic Heisenberg model in a checkerboard lattice. The checkerboard lattice is distinguished from the antiferromagnetic square lattice (with coupling constant J) by the presence of a diagonal crossing (coupling constant J') in half of the sites. This lattice model is the direct analog of the three-dimensional pyrochlore lattice on a two-dimensional surface. Besides, we considered a single-ion anisotropy D that breaks the $O(3)$ symmetry and contributes to planar spin fields. Since the model is two-dimensional endowed with an $O(2)$ symmetry, a Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) transition is expected to take place. We also investigated the BKT temperature as a function of the coupling constants J' and D . The problem is developed through a continuous representation given by the $O(3)$ Nonlinear Sigma Model (NLSM). Computer simulations were also carried out, and the results were in accordance with the analytical model.

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

It is a well-documented fact that two-dimensional magnetic models that are described by the Heisenberg Hamiltonian, which presents a continuous $O(3)$ symmetry, do not have a spontaneous breaking symmetry at finite temperatures. The lack of a long-range order (LRO) at finite temperatures (in the absence of a magnetic field) is a consequence of the Mermin–Wagner theorem. Indeed, in the two-dimensional isotropic magnetic model with short-range interactions, a unique thermal phase transition occurs at zero temperature. However, in the XY -model (a model with an $O(2)$ symmetry), a second phase transition, called the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition, arises at finite temperature T_{BKT} [1–3]. Naturally, this transition is not associated with a continuous breaking symmetry since there is no ordered state involved. The BKT transition has a topological nature and is associated with the vortex unbinding at high temperatures. Below T_{BKT} , the anti-vortex–vortex pairs are confined to stay together, and the model is disordered with a quasi-LRO. Above the transition temperature, vortex-pair unbinding occurs, which induces exponential decay for the spin–spin correlation function in place of the power-law decay for $T < T_{\text{BKT}}$. In this work, we are particularly interested in the BKT transition for the anisotropic checkerboard lattice. We

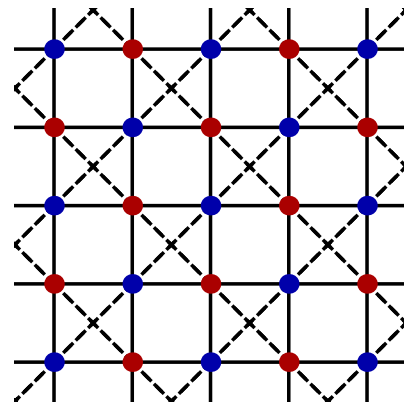


Fig. 1. The checkerboard model is composed of a J interaction (solid lines) and J' interaction (dotted lines).

have shown that the BKT temperature possibly vanishes at a critical ratio $\eta_c = J'/J$, which indicates a disordered state with exponential decay at zero temperature.

The checkerboard model is composed of a square lattice and a diagonal crossing in half of the cells as shown in Fig. 1. The present model is represented by the Hamiltonian

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

* Corresponding author.

E-mail addresses: ricardo.lopes@ufv.br (R.J.C. Lopes), antoniormoura@ufv.br (A.R. Moura).

where the first sum is done over the nearest neighbor spins on different sublattices (coupling constant $J > 0$) and the other one is evaluated over neighbor spins on the same sublattice (coupling constant $J' > 0$). An equivalent XY model has been studied through the Self-Consistent Harmonic Approximation (SCHA) at zero and finite temperatures [4]. In that work, the author has shown the emergence of an ordered state at zero temperature due to quantum fluctuations, the so called Quantum Order-by-Disorder. Besides, it has also been shown that the BKT temperature is lowered by the J' interaction, which contributes to the proliferation of magnetic vortices.

Although the isotropic Heisenberg model does not present a BKT transition, the inclusion of a single-ion anisotropy favors planar configurations with $O(2)$ symmetry, and a BKT transition is expected. Here the role of the single-ion anisotropy is similar to that of the usual anisotropic term $\lambda S_i^x S_j^z$.

One can imagine the checkerboard model as a planar projection of the pyrochlore lattice, and in the fully frustrated limit $J = J'$, both lattices share many properties as the highly degenerate ground state. Besides, close to the point $\eta = J'/J = 1$, the checkerboard model can exhibit Order-by-Disorder or even Quantum-Order-by-Disorder [4–10]. In this case, if a linear spin wave approximation (a non-interacting spin wave theory) is applied, then there is no ordered phase for η bigger than a critical ratio η_c . However, when the spin wave interactions are properly considered, the model presents an LRO at zero temperature and the fluctuations are responsible for the transition.

In order to reach our objective, we have adopted two different approaches to the problem. In the first one, we developed a continuous model for the checkerboard lattice. The continuous model is given by the traditional $O(3)$ Nonlinear Sigma Model (NLSM) with a mass term due to the anisotropic interaction. After the integration of the out-of-plane spin component, we obtained an effective $O(2)$ model with renormalized constant coupling. Moreover, we used Monte Carlo simulations to determine the vortex-core energy as well as the BKT temperature.

2. Theoretical treatment

Since we have adopted the limit $\eta \leq 1$, the Néel state over the nearest neighbor spins has been considered as an approximation for the ground state, and J' interaction can be considered as a perturbation. However, in the opposite limit $\eta \gg 1$, a Néel state is expected along the J' direction as a ground state. The exact knowledge of the ground state is unnecessary, and it is sufficient to adopt a Néel field as a background where spin waves arise due to quantum and thermal effects. In order to develop the continuous model, we parameterized the spin field as $\vec{S}_i = S\vec{\Omega}_i$, where the unitary field $\vec{\Omega}_i$ is defined by

$$\vec{\Omega}_i = (-1)^i \vec{Q} \cdot \vec{r}_i \vec{n}_i + \vec{a}_i \vec{l}_i, \quad (2)$$

where $Q = (\pi/a, \pi/a)$ is the wave vector for the Néel state, \vec{n}_i is a slow field defining the slow sublattice magnetization, and \vec{l}_i is the fast spin fluctuation. The lattice parameter \vec{a} measures the distance between interacting sites: $\vec{a} = a$ for spins in different sublattices and $\vec{a} = \sqrt{2}a$ for spins in the same sublattice. To preserve the norm $|\vec{\Omega}_i| = 1$, we imposed $\vec{n}_i \cdot \vec{l}_i = 0$ and disregarded second-order terms in a . This approximation is reasonable when we consider the continuous limit $a \rightarrow 0$. Our interest is in a low-energy effective model, and fast modes need to be integrated. As usual, we described our model using the partition function given by the functional integral

$$Z = \int \mathcal{D}\vec{\Omega} \prod_i \delta(\vec{\Omega}_i^2 - 1) e^{-S[\vec{\Omega}]/\hbar}, \quad (3)$$

where the delta Dirac function ensures the $O(3)$ non-linear constraint $\vec{\Omega}^2 = 1$ on each site i . The integration is done over the slow and fast modes. Using the coherent state basis, we write the action as

$$S[\vec{\Omega}] = \sum_{\text{spins}} i\hbar S \omega[\vec{\Omega}] + \int_0^{\beta\hbar} d\tau H(\tau), \quad (4)$$

where the first term is the Berry phase and $H(\tau)$ is the projection of the Hamiltonian (1) onto the spin coherent state basis. Note that $H(\tau)$ plays the role of a potential term, whereas the Berry phase is a kinetic term responsible for the dynamic of the model. Every term in the above expression is evaluated using parametrization (2) and by performing a first-order Taylor expansion in \vec{n} . The Berry phase, for example, is written as

$$\sum_{\text{spins}} i\hbar S \omega[\vec{\Omega}] = \frac{i\hbar S}{a} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^2r \vec{l} \cdot \left(\frac{\partial \vec{n}}{\partial \tau} \times \vec{n} \right). \quad (5)$$

The potential part is given by

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau H(\tau) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^2r \left[\frac{JS^2}{4} (2 - \eta) (\nabla \vec{n})^2 + JS^2 (2 + \eta) \vec{l}^2 + \frac{DS^2}{a^2} (n^z)^2 + 2DS^2 (l^z)^2 \right]. \quad (6)$$

Fast modes are quadratic; they can be integrated to yield an effective low energy action. The steepest descent method provides

$$l^{x,y} = -\frac{i}{2JSa(2+\eta)} (\partial_\tau \vec{n} \times \vec{n})_{x,y} \quad (7)$$

and

$$l^z = -\frac{i}{2JSa(2+\eta) + 4DSa} (\partial_\tau \vec{n} \times \vec{n})_z \quad (8)$$

for planar and perpendicular fluctuations, respectively. Then, after the replacement of the fast field, we obtained the effective action

$$\frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = \frac{1}{2f} \int d^{2+1}r \left[(\partial_\mu \vec{n})^2 + \mu^2 (n^z)^2 - \kappa (\partial_0 \vec{n} \times \vec{n})_z^2 \right], \quad (9)$$

where $\partial_\mu = \partial^\mu = (c_0^{-1} \partial_\tau, \vec{\nabla})$ and $\kappa = \frac{2D}{J(2+\eta)+2D}$ is an anisotropic constant due to the single-ion anisotropy. Here, we introduced an intrinsic momentum scale $\Lambda = a^{-1}$ as a short-range cutoff for the spacial integrals. Note that there is no cutoff in imaginary time τ because quantum fluctuations exist on all imaginary time scale. Besides, in the continuous limit $a \rightarrow 0$, we have divergence problems that are resolved by standard renormalization procedures. In the above action, we have also defined the bare long-wavelength spin wave velocity

$$c_0 = \frac{2JS\sqrt{(2-\eta)(2+\eta)}}{\Lambda\hbar}, \quad (10)$$

the coupling constant

$$f = \frac{2}{\Lambda S} \sqrt{\frac{2+\eta}{2-\eta}}, \quad (11)$$

and the mass term

$$\mu^2 = \frac{4D\Lambda^2}{J(2-\eta)}. \quad (12)$$

In the absence of the anisotropy term, the effective action (9) describes the massive $O(3)$ Quantum NLSM. At zero temperature, we can interpret the imaginary time as a space dimension, and the effective action is mapped into the classical $(d + 1)$ -dimensional NLSM. The one-loop Renormalization Group (RG) [11–14] provides the critical coupling $f_c = 2\pi^2(d - 2)/(N - 2)$, where N is the internal symmetry dimension. From Eq. (11), we can also define a critical spin S_c associated with f_c . Critical coupling separates the state with LRO for $f < f_c$ ($S > S_c$) from a disordered phase when $f > f_c$ ($S < S_c$). As it is well known, for the classical two-dimensional $O(2)$ NLSM, the result obtained from the RG is inconclusive, and we are unable to determine the BKT temperature from this approach. In this case, we have to deal with a topological phase transition associated with the vortex-pair unbinding instead of a phase transition due to a breaking symmetry.

In the presence of a single-ion anisotropy, the $O(3)$ symmetry is reduced to an $O(2)$ symmetry, and a BKT transition is expected for the quasi-planar spin field. Therefore, instead of following the standard RG procedure for the $O(3)$ NLSM, we applied a different approach. Since the BKT transition is a classical phenomenon, we can consider $\beta\hbar c_0 \ll 1$ (weak quantum fluctuations), and hence the imaginary time thickness is narrow. Thereafter, we have assumed an imaginary time independent field \vec{n} and a simpler action $S_{\text{eff}}/\hbar = S_{\text{cl}}$, with the dimensionless classical action defined by

$$S_{\text{cl}} = \frac{1}{2g_0} \int d^2r \left[\nabla \vec{n} \cdot \nabla \vec{n} + \mu^2 (n^z)^2 \right], \quad (13)$$

where the bare coupling constant is given by

$$g_0(T) = \frac{2T}{J(T)S^2(2 - \eta)}, \quad (14)$$

and we have adopted $k_B = 1$. Here, we considered a temperature dependent coupling constant $J(T)$. At zero temperature $J(0) = J$, but at a finite temperature, the coupling is reduced when one takes into account the effects of vortices. $J(T)$ is a decreasing function of increasing temperature, and it abruptly vanishes when $T \rightarrow T_{\text{BKT}}^-$. Obtaining the exact expression for $J(T)$ is a hard problem, and we have considered some approximations in our work. Besides, note that $\rho_0 = (\beta g_0)^{-1} = J(T)S^2(1 - \eta/2)$ is the bare spin stiffness, which vanishes for $T > T_{\text{BKT}}$. In order to explicitly consider the $O(2)$ symmetry, we have parametrized the spin field as a function of two scalar fields as $\vec{n} = (\sqrt{1 - m^2} \cos \theta, \sqrt{1 - m^2} \sin \theta, m)$. For small m , we have

$$S_{\text{cl}} = \frac{1}{2g_0} \int d^2r \left[(\nabla \theta)^2 - m^2 (\nabla \theta)^2 + (\nabla m)^2 + \mu^2 m^2 + \frac{1}{4} (\nabla m^2)^2 \right]. \quad (15)$$

Now, the partition function is expressed as a functional integral over m and θ and, performing the integration over m , we obtain the effective energy given by

$$e^{-S_{\text{eff}}[\theta]} = e^{-S_\theta} \langle e^{-S_{\text{int}}} \rangle_m, \quad (16)$$

in which the average is defined by $\langle O \rangle_m = Z_m^{-1} \int \mathcal{D}m O e^{-S_m}$ and Z_m is the partition function for the m field. By definition, the field m is limited but we extended the domain to $-\infty < m < \infty$ and considered a Gaussian functional integral. The extended domain is not a serious problem since a relevant contribution occurs only close to $m = 0$ and the field has fast decay. The same argument is also applied to the θ field. After the replacement $m \rightarrow \sqrt{g_0}m$, the actions in momentum space are written as

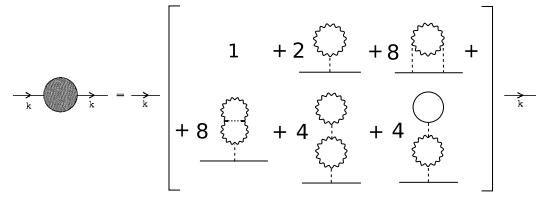


Fig. 2. The two-point vertex function at the two-loop level. The θ and m propagators are represented by the solid and wiggly lines, respectively.

$$S_\theta = \frac{1}{2N} \sum_k G_{0,\theta}^{-1}(k) \theta_{-k} \theta_k, \quad (17)$$

$$S_m = \frac{1}{2N} \sum_k G_{0,m}^{-1}(k) m_{-k} m_k + \frac{g_0}{N^3} \sum_{kpq} \frac{q^2}{8} m_{p-q} m_p m_{k+q} m_k, \quad (18)$$

$$S_{\text{int}} = -\frac{1}{N^3} \sum_{kpq} \frac{k(k+q)}{2} m_p m_{p-q} \theta_k \theta_{k+q} \quad (19)$$

with $G_{0,\theta}^{-1}(k) = k^2/g_0$ and $G_{0,m}^{-1}(k) = k^2 + \mu^2$ being the massless and massive bare Green function for the θ and m fields, respectively.

At the two-loop level, the two-point vertex function is composed of the diagrams shown in Fig. 2. The m propagator is represented by the wiggly line, whereas the solid line represents the θ propagator. The last two diagrams have a null contribution, and the two-point vertex function is given by

$$\Gamma_\theta(k) = \frac{k^2}{g_0} \left[1 - g_0 I_1 \left(1 - \frac{3}{2} g_0 I_1 - g_0 \mu^2 I_2 \right) \right], \quad (20)$$

where the integrals I_n are defined by

$$I_n(\mu^2) = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{(q^2 + \mu^2)^n}. \quad (21)$$

Clearly, the integral I_1 is logarithmically divergent and the vertex function needs to be renormalized. Since the residue is proportional only to g_0 , at least one renormalization function will be necessary, Z_θ in this case. Moving to an arbitrary d -dimensional space, the integrals can be evaluated by the dimensional regularization, which gives

$$I_1(\mu^2) = \frac{\Lambda^\epsilon}{4\pi} \left(\frac{\mu^2}{4\pi \Lambda} \right)^{\frac{\epsilon}{2}} \Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right) \quad (22)$$

$$I_2(\mu^2) = -\frac{\epsilon \Lambda^\epsilon}{8\pi \mu^2} \left(\frac{\mu^2}{4\pi \Lambda} \right)^{\frac{\epsilon}{2}} \Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right), \quad (23)$$

where $\epsilon = d - 2$. Note that, in the d -dimensional space, the coupling g_0 acquires an engineering dimension $2 - d$ (in momentum space), and then we define the new dimensionless constant $\tilde{g}_0 = g_0 \Lambda^\epsilon$. Logarithmic divergence occurs because of the Gamma function pole at $\epsilon = 0$. Performing a zero-order Laurent series expansion, we separate the divergent term from the finite one. Thus, after a straightforward procedure, the two-point vertex function is written as

$$\Gamma_\theta(k) = \frac{k^2 \xi(\tilde{g}_0)}{g_0} \left\{ 1 + \frac{1}{2\pi \epsilon} \frac{\tilde{g}_0}{\xi(\tilde{g}_0)} + \frac{3\tilde{g}_0^2}{8\pi^2 \epsilon \xi(\tilde{g}_0)} \left[\frac{1}{\epsilon} + \left(\gamma - \frac{1}{3} \right) + \ln \left(\frac{\mu^2}{4\pi \Lambda^2} \right) \right] \right\}, \quad (24)$$

where $\gamma \approx 0.577$ is the Euler–Mascheroni constant, and we have defined the function $\xi(\tilde{g}_0) = 1 + c_1\tilde{g}_0 + c_2\tilde{g}_0^2$ with the constants

$$c_1 = \frac{1}{4\pi} \left[\gamma + \ln \left(\frac{\mu^2}{4\pi\Lambda^2} \right) \right] \quad (25)$$

$$c_2 = \frac{1}{16\pi^2} \left[\frac{\pi^2}{4} + \gamma(3\gamma - 2) - 2(1 - 3\gamma) \ln \left(\frac{\mu^2}{4\pi\Lambda^2} \right) + 3 \ln^2 \left(\frac{\mu^2}{4\pi\Lambda^2} \right) \right]. \quad (26)$$

As one can note, $\xi(\rho_0)$ does not depend on the arbitrary momentum scale since $\mu^2 \propto \Lambda^2$, and the higher order terms in ϵ vanish in the limit $d \rightarrow 2$. The divergence in the two-point vertex is removed through the renormalization $\Gamma_\theta^R(k) = Z_\theta \Gamma_\theta(k)$; fixing the condition $\partial \Gamma_\theta^R / \partial k^2 = g^{-1}$, we obtain the renormalized coupling constant $g = g_0 / \xi(\tilde{g}_0)$. For $\epsilon \approx 0$, the function renormalization is defined by

$$Z_\theta = 1 - \frac{\tilde{g}_0}{2\pi\epsilon} + \frac{\tilde{g}_0^2}{8\pi^2\epsilon^2} + \mathcal{O}(\tilde{g}_0^3). \quad (27)$$

Thus, using the renormalized field $\theta_R = Z_\theta^{-1/2}\theta$, we obtained a simple effective action written as

$$S_{\text{cl}} = \frac{1}{2g} \int d^2r (\nabla\theta_R)^2. \quad (28)$$

The above action is the same as the one obtained from the XY-model, and the BKT transition is determined as usual. The angular field is divided into two parts: $\theta^R(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \phi(\vec{r})$, wherein $\psi(\vec{r})$ is the vortex field and $\phi(\vec{r})$ is the spin wave field. While the spin wave fluctuations, the Goldstone modes in the actual scenario, play an important role in the zero temperature transition, the vortex field is responsible for the BKT transition. The minimal energy provides $\nabla^2\psi = 2\pi m$, with m being an integer that specifies the topological sector while ϕ obeys the Laplace equation. The partition function splits in a spin wave sector and a topological sector associated with the vortices. The vortex interaction is very similar to the electrical interaction in two-dimensional neutral Coulomb plasma. A simple analysis of the Helmholtz free energy shows a phase transition at $g = \pi/2$, which provides the transition temperature T_{BKT} . At low temperatures, $T < T_{\text{BKT}}$, it is advantageous for the system to keep the vortex–anti-vortex close, whereas for $T > T_{\text{BKT}}$ the larger entropy favors vortex unbinding. However, the transition temperature obtained from this simple analysis is overestimated because the thermal effects on the vortices are not correctly considered. Theoretical behavior of the BKT temperature as a function of η , for example, is similar to the simulation one, and, for both results, the transition temperature decay almost linearly with η . The correction factor can be obtained by the RG analysis [15]. Using the RG for the BKT transition, we can express the coupling constant reduced by the vortex-core energy E_c as the limit

$$\lim_{T \rightarrow T_{\text{BKT}}} g(T) = \frac{\pi}{2} - \pi^2 e^{-E_c/T_{\text{BKT}}}. \quad (29)$$

For a planar spin field, the vortex-core energy can be approximated by $E_c = \pi^2 JS^2/2 \approx 4.93 JS^2$. However, in our case, the vortex-core energy is smaller than this value since the core has an out-of-plane spin component which reduces the vortex-core energy. In general, the vortex-core energy is expected to depend on both η and D parameters, but finding this relation is a hard task. It would be necessary to have a full knowledge of the out-of-plane spin field solution to determine the vortex-core energy, which is beyond the

present work. Instead, we used Eq. (29) together with the computational data, obtained by Monte Carlo simulations, in order to get the vortex-core energy behavior. Since the BKT temperature decreases with increasing η , one can imagine a similar behavior to the vortex-core energy. In fact, the results show an almost linearly decreasing E_c with increasing η . Therefore, the increasing J' interaction is responsible for the proliferation of vortices as well as the disorder due to the antiferromagnetic frustration.

The relation between the vortex-core energy and the single-ion anisotropy is intriguing. It is well known that there is a QPT at a critical anisotropy D_c^0 which occurs even at zero temperature. The transition is related to the energetic costs of the (quantum) fluctuations along the z -axis. After we adopted imaginary time independence in Eq. (9), the spin fields were considered as classical fields; however, the D anisotropy still plays an important role in the model. Indeed, on the one hand, the vortex-core spins tend to stay out-of-plane to minimize the energy; on the other hand, the D anisotropy forces the spins to be planar. Besides, whether the vortex-core spins choose to be out-of-plane or not should depend on the D anisotropy. An out-of-plane component of the vortex-core spins will have a high energetic cost for large D values. Therefore, the emergence of topological solutions with a planar core is easier at the $D \gg J$ regime than in the small D case. The vortex-core energy, for quasi-planar vortices, should be a decreasing function of increasing D (when D is large). At the small D regime, the spin field tends to be planar, but the model is ordered with $\langle S^z \rangle \neq 0$. An out-of-plane vortex-core is favored in this case. However, as the D anisotropy becomes larger, the energetic cost to keep an out-of-plane core becomes larger too. Therefore, the energy for small D is an increasing function of anisotropy, and we can imagine that thermal spin waves and topological configurations are sensitive to the D anisotropy. In our work, we have used the classical limit to determine the vortex-core energy, which is associated with BKT transition, for both small and large single-ion anisotropy.

Since the vortex-core energy is known, from the coupling equation obtained through the RG, we expressed T_{BKT} by the self-consistent equation

$$T_{\text{BKT}} = \frac{E_c}{\ln(2\pi^2) - \ln(\pi - 2g(T_{\text{BKT}}))}, \quad (30)$$

where, in the two-dimensional space, the renormalized coupling constant up to the two-loop order is given by $g(T) = g_0/\xi(g_0) = g_0(1 - c_1g_0 - c_2g_0^2)$ and g_0 is the bare coupling given by Eq. (14). The correction constants c_1 and c_2 for one- and two-loop corrections, respectively, are small but necessary since the 0-loop order constant g_0 is independent of D and is unable to correctly describe the role of D . In the limit $D \rightarrow 0$, it is easy to see that g diverges to minus infinity. If $g_0 \neq 0$, then the unique solution to Eq. (10) is $T_{\text{BKT}} \rightarrow 0^-$; we considered the case where $g_0 = 0$ which implies $T_{\text{BKT}} = 0$. Furthermore, in the limit $D \rightarrow 0$, the vortex-core energy tends to $E_c \rightarrow T_{\text{BKT}} \ln 2\pi$ and vanishes as well as T_{BKT} . The vanishing vortex-core energy results in the proliferation of vortices at any finite temperature, consistent with $T_{\text{BKT}} = 0$. Therefore, the present model is in accordance with the expected result of the isotropic Heisenberg model.

In the asymptotic limit $D \gg J$, one could imagine a model with no out-of-plane spins since there is a huge energetic cost to keep a finite $\langle S^z \rangle$ in the vortex-core. Thus, the model should be identical to the planar rotator. Obviously, in this case the loop corrections, due to the m field, are unnecessary and the coupling constant should be given just by g_0 . The BKT temperature obtained from this approximation is equal to the well known result for the planar rotator, but our computational results show a different situation. The n^z spin field component is always important, and the BKT temperature obtained in the present model is larger than the transition temperature obtained from the planar rotator.

3. Simulation

We adopted a Monte Carlo approach combining single spin and cluster updates to calculate the spin stiffness (also called helicity) in this system. Each Monte Carlo Step (MCS) consists of L^2 Metropolis [16,17] updates and $0.2L^2$ Wolff cluster updates [17,18], where L is the lattice size. We used 10^6 MCS to calculate the averages of the helicity at each temperature. In order to ensure thermalization, we also used $2L^2$ MCS for each temperature. Following the traditional steps [19,20], we can easily show that the helicity (Υ) for the Hamiltonian (1) assumes the following form:

$$\Upsilon(T) = -\frac{1}{2}\langle H \rangle - \frac{1}{TN} \left\langle \left[J \sum_{(i,j)} (\hat{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) + J' \sum_{(i,j)} (\hat{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) \right]^2 \right\rangle, \quad (31)$$

where \hat{r}_{ij} is the unity vector pointing from site i (\vec{r}_i) to site j (\vec{r}_j), the spin module $S = 1$ and $\langle (\dots) \rangle$ are standard statistical averages.

Notwithstanding, it is well known that the helicity at the critical temperature T_{BKT} abruptly jumps from $\frac{2}{\pi} T_{BKT}$ to zero [21]. Therefore, looking at the point where the helicity crosses the line $\frac{2}{\pi} T_{BKT}$ for different lattice sizes, it is a reliable way to determine T_{BKT} using the scale equation [22]

$$T(L) = T_\infty + \frac{\pi}{(4c \ln L)^2}, \quad (32)$$

where $T_\infty = T_{BKT}$.

All the simulations were performed for six different lattice sizes ($L = 16, 32, 64, 128, 256, \text{ and } 512$) and for the ratio $\eta = J'/J \lesssim 1.0$. For $\eta \gtrsim 1.0$, the critical slowing down and freezing effects make temperature determination complicated and imprecise.

Finally, the source for all the error bars is the statistical errors present in the averages of the helicity calculations throughout the Monte Carlo simulations. The results are presented below.

4. Results

In order to determine the BKT transition as a function of both parameters D and η , we used Eq. (29) together with the Monte Carlo data to estimate the vortex-core energy. In general, a relation between the vortex-core energy and the BKT temperature is expected, and an increase in E_c should reflect an increase in T_{BKT} . However, we verified that, eventually, a subtle decrease in vortex-core energy does not provide a reduction in the transition temperature.

In Fig. 3, we show the vortex-core energy as a function of η . For large D anisotropies, the core energy decays almost linearly with η , and then we also adopted a linear decreasing vortex-core energy for the small D limit which provides results according to our simulation data.

The reduced BKT temperature $t_{BKT} = T_{BKT}/JS^2$ as a function of η is plotted in Fig. 4. The solid lines were obtained from Eq. (29) considering a linear fit for the vortex-core energy, whereas the dots are the Monte Carlo results. As expected, the BKT temperature is a decreasing function of increasing η . Accordance with the computational data, mainly for small D , will be better if we adopt a more complex function, instead of the linear one, for the vortex-core energy. However, for our proposals, it is sufficient to consider the linear behavior. Besides, due to the linear vortex-core energy consideration, we obtained an almost linear relation between the reduced BKT temperature t_{BKT} and η . Using this characteristic, we

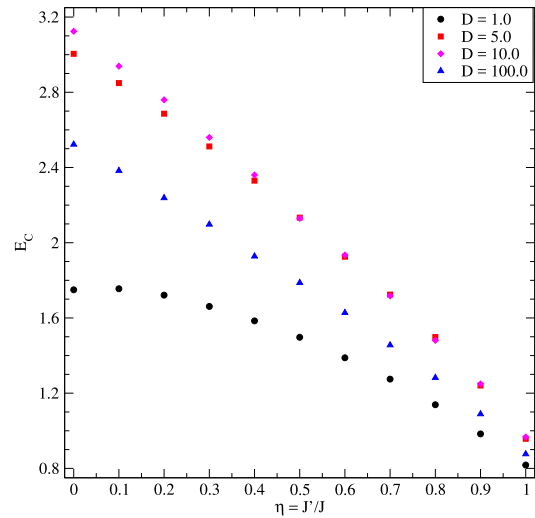


Fig. 3. Vortex-core energy (in units of JS^2) as a function of η for different values of the D anisotropies. The behavior is almost linear mainly large D values.

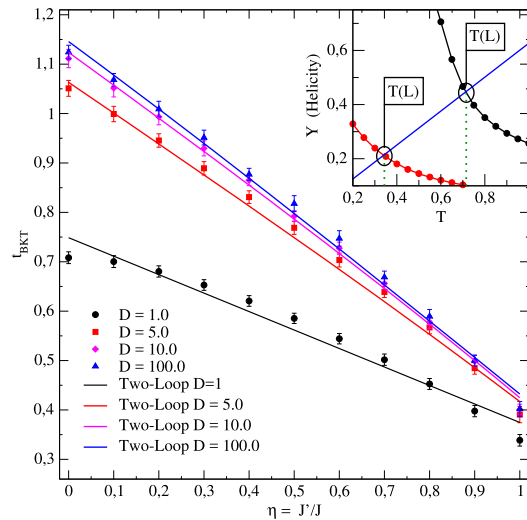


Fig. 4. The reduced BKT temperature t_{BKT} as a function of the coupling η . The solid lines are the theoretical results, whereas the dots were obtained from Monte Carlo simulations. The inset graph shows the extraction of BKT temperature from the crossing of Helicity curve with $(2/\pi)T$ line, for size L and two different interaction parameters ($\eta = 0.0$ for black curve and $\eta = 1.0$ for the red one. $D = 1.0$ for both). (For interpretation of the colors in the figure(s), the reader is referred to the web version of this article.)

can estimate the critical η_c which provides a vanishing BKT temperature. Usually, the BKT temperature is finite, but in this case we have found a zero BKT temperature.

Obviously, this procedure is an estimate since the model has been developed only for the interval $0 \leq \eta \leq 1$, and for extraction of critical η_c we are assuming a linear behavior between t_{BKT} and η for $\eta > 1$. It is important to note that in the $\eta \gg 1$ limit, the system is headed to the regime of weakly coupled one-dimensional spin chains and the approximation could fail.

A more precise investigation can be performed by considering an antiferromagnetic ground state along the J' direction and repeating the procedures of Section 2, but this is out of the scope of the actual work. Nevertheless, decrease BKT temperature is reasonable, considering the linear decay, we found the critical coupling η_c as a function of D . For $D = 1$, we obtained $\eta_c = 2.0$, while η_c tends to 1.6 for $D \gg 1$. In Fig. 5, we plot the critical η_c as a function of both D and D^{-1} . The graphic of η_c as a function of D suggests an

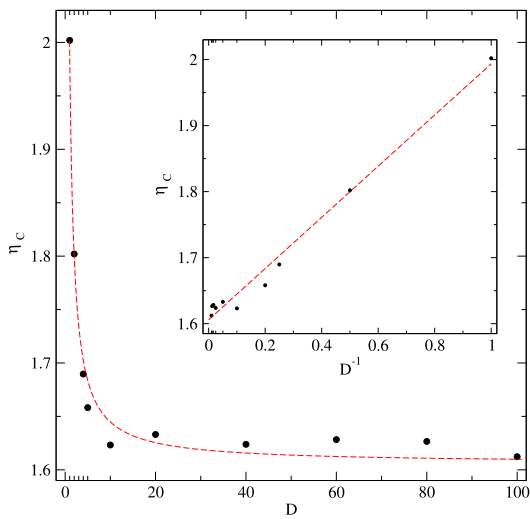


Fig. 5. The critical η_c as a function of D and D^{-1} . The dashed lines are obtained considering a linear fit between η_c and D^{-1} .

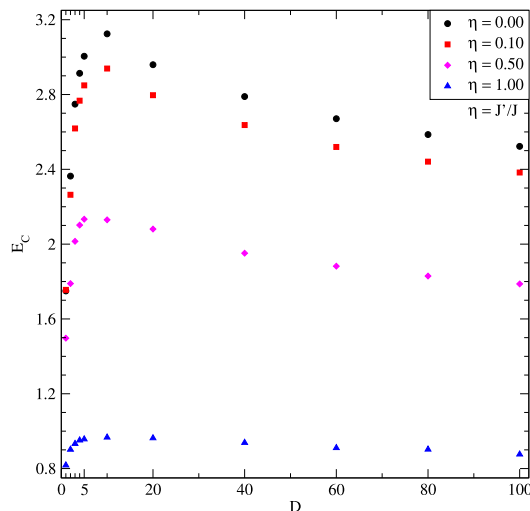


Fig. 6. Vortex-core energy (in units of JS^2) as a function of the single-ion anisotropy D (in units of J). The core energy presents a different behavior for $D < D_c$ and $D > D_c$.

inverse relation between η_c and D . Since the plot of η_c as a function of D^{-1} is almost linear, we considered a linear fit in order to obtain $\eta_c = 1.606 + 0.388/D$ that provides the limit $\eta_c = 1.606$ when $D \rightarrow \infty$.

The relation between the vortex-core energy and the single-ion anisotropy is represented in Fig. 6. Again, the core energy has been obtained from the Monte Carlo data using Eq. (29). As one can see, the core energy is an increasing function for small values of D , whereas it presents a slightly decreasing behavior for larger anisotropies. The behavior is in accordance with our previous analysis. Curiously, if we use the 0-loop coupling constant g_0 to determine the vortex-core energy, then the behavior for large D will be described by an increasing function of D (very slight in this case). Obviously, the results obtained using g_0 are not reliable since g_0 does not properly consider the single-ion anisotropy. The single-ion anisotropy that gives the maximum vortex-core energy has been considered as a critical D_c . From this viewpoint, we have found D_c as a decreasing function of η with $5 \lesssim D_c/J \lesssim 10$ for $0 \leq \eta \leq 1$.

In Fig. 7, the reduced temperature t_{BKT} is represented as a function of D^{-1} . It is easy to verify that for small η , the tran-

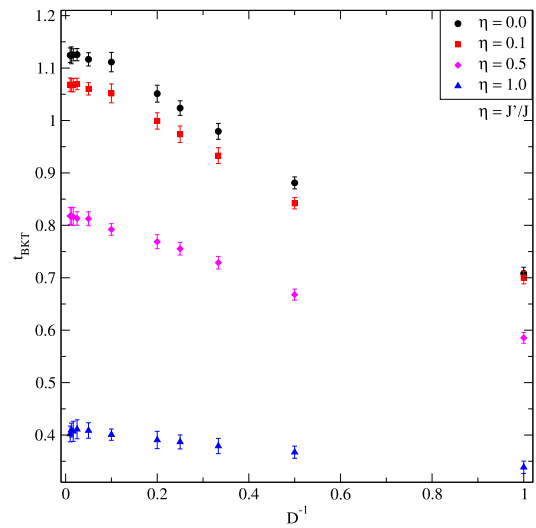


Fig. 7. Reduced BKT temperature as a function of the inverse of D (in units of J).

sition temperature has a sharp increase for small D while E_c is approximately constant for $D/J \gtrsim 10$. Still, for $\eta = 1$, t_{BKT} is a very slightly increasing function of D . The behavior for $D < D_c$ is in accordance with Fig. 6, and an increase in the core energy reflects an increase in t_{BKT} . However, for large D , although the vortex-core energy slightly decreases, the transition temperature keeps approximately a constant value. This is an effect that is purely due to the loop correction (both one- and two-loop orders) for the coupling constant g . Besides, when $\eta \approx 1$, the model will be close to the fully frustrated phase, and the weight of the single-ion anisotropy to cause the model to be disordered is reduced. Therefore, the emergence of vortices is equally favored for all values of D and the BKT temperature assumes approximately a constant value $t_{BKT} \approx 0.40$.

5. Discussion and conclusions

In this paper, we have studied the single-ion anisotropic Heisenberg model in the two-dimensional checkerboard lattice. Due to the fact that the two-dimensional model presents an $O(2)$ symmetry, a BKT transition is expected. Using a continuous approach and RG, as well as Monte Carlo simulations, we determined T_{BKT} as a function of the diagonal coupling J' and the single-ion anisotropy D . While the J' interaction is responsible for the frustration between neighbor spins, the single-ion anisotropy is known to cause a QPT. However, inasmuch as quantum fluctuations are responsible for a QPT at zero temperature, we have adopted a classical model and there is no phase transition in our model. Here, there is an energetic dispute between J and D that defines the vortex-core nature. When the single-ion anisotropy is small, the vortex-core keeps an out-of-plane component, and for large D values, the vortex tends to be planar. Since the vortex-core energy is directly associated with the BKT transition, T_{BKT} is highly influenced by the D anisotropy.

Using the model developed here, we determined the vortex-core energy E_c and its relation with T_{BKT} . The core energy is a decreasing function of increasing η with almost linear decay when $D \gg 1$. Even for small values of D , the adoption of a linear profile for E_c does not provide a considerable error. In the limit $\eta \gg 1$, the Hamiltonian (1) describes the weakly coupled one-dimensional spin chains which do not present a spontaneous breaking symmetry or BKT transition. However, we also estimated a critical coupling $\eta_c \gtrsim 1$ for which the model presents a highly disordered phase even at zero temperature. The relation between this

phase and the one-dimensional antiferromagnetic chains phase is an open question and more studies are required. As expected, we have shown that T_{BKT} is a decreasing function of increasing η ; extrapolating our results to $\eta > 1$, we can estimate the critical η_c where the BKT transition vanishes. Above this critical point, the model is highly disordered with exponential decay for the spin–spin correlation. For $D = 1$, we found $\eta_c = 2.0$, whereas for large D , η_c approximates to 1.6. The vanishing BKT temperature is associated with free vortex proliferation at any finite temperature, and therefore the single-ion anisotropy favors the dissociation of anti-vortex–vortex pairs. Besides, in the $D \gg J$ limit, critical coupling η_c is almost constant, which is reasonable since the vortex-core energy for $D \gg D_c$ is also constant as one can see in Fig. 6.

The analysis of single-ion anisotropy has also shown an interesting result. The vortex-core energy for small D anisotropies ($D < D_c$) is an increasing function of D . In this case, the vortex-core spins prefer to keep an out-of-plane component, whereas the D anisotropy forces a planar configuration. The core energy increases when D approaches D_c from the left which provides an increasing T_{BKT} . The critical D_c value is defined as the point where the vortex-core energy is maximum. For $D \gg J$, the model does not present an ordered ground state, and the energetic cost associated with the out-of-plane core spin component is very high. In this case, the emergence of planar vortices is not prohibitive and the vortex-core energy decreases when D increases. This effect is purely due to the loop corrections and it can be obtained whether we consider the one- or two-loop level but not in the 0 order, where any out-of-plane component is disregarded. Although the vortex-core presents two different behaviors (out-of-plane or planar spins), it can not be associated with the well known QPT of the single-ion anisotropy since our model is classical. The transition could be determined through a careful analysis of Eq. (9), which properly consider quantum fluctuations, but such contribution is beyond of scope the present text.

To summarize, we have determined the BKT transition as a function of the diagonal coupling J' and the single-ion anisotropy

D using analytical models and computational simulation. Our results are accordance with the expected ones. Notwithstanding, there are a couple of open questions beyond the actual work.

Acknowledgements

This research was partially supported by FAPEMIG, CNPq and CAPES (Brazilian agencies). R. J. C. Lopes also wants to thank L. A. S. Mól and E. F. Procópio for helpful discussions.

References

- [1] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, *J. Phys. C, Solid State Phys.* 6 (1973) 1181.
- [2] V.L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* 32 (1971) 493.
- [3] J.M. Kosterlitz, *J. Phys. C, Solid State Phys.* 7 (1974) 1046.
- [4] A.R. Moura, *J. Magn. Magn. Mater.* 394 (2015) 60.
- [5] R.R.P. Singh, O.A. Starykh, P.J. Freitas, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 7387.
- [6] W. Brenig, A. Honecker, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 140407.
- [7] B. Canals, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 184408.
- [8] O. Tchernyshyov, O.A. Starykh, R. Moessner, A.G. Abanov, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 144422.
- [9] B. Canals, M.E. Zhitomirsky, *J. Phys. Condens. Matter* 16 (2004) S759.
- [10] L.-P. Henry, T. Roscilde, *Phys. Rev. Lett.* 113 (2014) 027204.
- [11] A.M. Polyakov, *Phys. Lett. B* 59 (1975) 79.
- [12] E. Brézin, J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. Lett.* 13 (1976) 691.
- [13] E. Brézin, J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. B* 14 (1976) 3110.
- [14] E. Brézin, J. Zinn-Justin, J.C.L. Guillou, *Phys. Rev. D* 14 (1976) 2615.
- [15] J.V. Jos, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, D.R. Nelson, *Phys. Rev. B* 16 (1977) 1217.
- [16] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.
- [17] D.P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2009.
- [18] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 631.
- [19] T. Ohta, D. Jasnow, *Phys. Rev. B* 20 (1979) 139.
- [20] D.H. Lee, J.D. Joannopoulos, J.W. Negele, D.P. Landau, *Phys. Rev. B* 33 (1986) 450.
- [21] D.R. Nelson, J.M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* 39 (1977) 1201.
- [22] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 8811.

Capítulo 4

Skyrmions e Merons em sistemas anti-ferromagnéticos bidimensionais

Este trabalho encontra finalizado e publicado em SSC 290 55-59
2019 [3]. Uma cópia está anexada ao final do capítulo.

É amplamente conhecido que o modelo de Heisenberg Isotrópico no limite contínuo é descrito pelo modelo sigma não-linear [10, 98];

$$H_{HI} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1)$$

$$H_\sigma = \frac{J}{2} \int (\partial^\mu \vec{S}) (\partial_\mu \vec{S}) \quad (4.2)$$

sujeito ao vínculo $\vec{S} \cdot \vec{S} = 1$. A equação de campo, no regime estático, para a Hamiltoniana anterior é dada por:

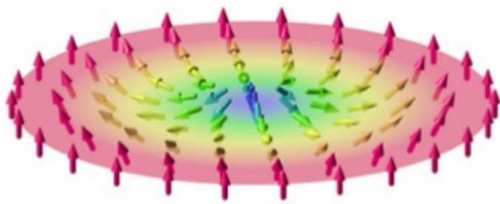
$$\nabla^2 \vec{S} - (\vec{S} \cdot \nabla^2 \vec{S}) \vec{S} = \vec{0} \quad (4.3)$$

Para o caso em que a dimensão do sistema $D = 2$ ($\mu = 1, 2$) e para uma simetria interna $O(3)$ ($\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$), a equação (4.3), como mostrado por Belavin e Polyakov [47], admite as famosas soluções de skyrmion, como já discutido na introdução.

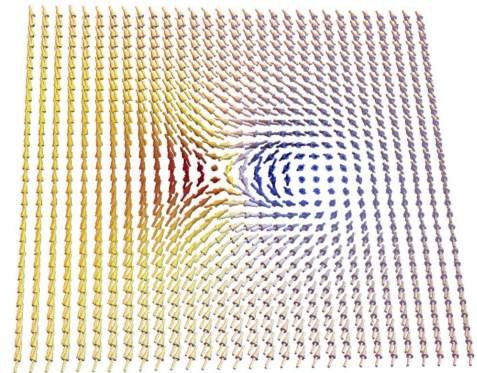
A configuração de skyrmion apresentada na introdução e presente na figura 4.1a é obtida à partir da condição de fronteira onde, para $|\vec{x}| \rightarrow \infty$, todos os spins estejam apontando perpendicularmente ao plano, ou seja, $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} \vec{S}(\vec{x}) \rightarrow (0, 0, 1)$. Esta configuração é comumente chamada de Skyrmion de 1 núcleo, ou somente $1CS$.

Contudo, outras texturas são possíveis partindo-se de diferentes condições de fronteira. Na figura 4.1b, temos uma solução distinta para as equações de campo. Esta configuração é obtida à partir da condição $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} \vec{S}(\vec{x}) \rightarrow (1, 0, 0)$, ou seja, os spins na fronteira devem apontar paralelamente ao plano. Esta configuração é chamada de Skyrmion de 2 núcleos,

ou somente $2CS$ ou ainda bimerons. O nome deve-se ao fato desta textura possuir 2 estruturas tipo vórtice-antivórtice próximo ao centro do skyrmion. Estas estruturas tipo vórtice são na realidade pares de merons e anti-merons que carregam cargas topológica semi-inteira (o meron carrega carga $1/2$ e o anti-meron carrega carga $-1/2$), de tal forma que juntos, esta textura compõem um skyrmion com carga topológica igual a 1.



(a) Configuração de skyrmion com apenas 1 núcleo



(b) Configuração de skyrmion com 2 núcleos

Figura 4.1: Diferentes configurações de skyrmion obtidas à partir de diferentes condições de fronteira.

Apesar da existência de excelentes trabalhos tratando sobre os skyrmions $2CS$, como por exemplo Ezawa [99] que demonstrou a possibilidade de existência de bimerons em filmes finos magnéticos e Ricardo L. Silva [100] que demonstrou via simulações a emergência de redes de skyrmion e bimerons em magnetos quirais com impurezas, o grande volume de trabalhos sobre skyrmions concentra-se nos skyrmions $1CS$, os primeiros a serem detectados experimentalmente [48, 101]. Contudo, recentemente, em 2018, Yu et.al. [102] observou experimentalmente, no espaço real, pela primeira vez, uma rede quadrada composta de merons e anti-merons em um filme fino de $Co_8Zn_9Mn_3$. Isto reacendeu o interesse nestes sistemas bem como em sua aplicabilidade.

Neste trabalho, investigamos numericamente problemas associados à estabilidade e dinâmica de skyrmions $2CS$ no regime antiferromagnético, uma vez que o regime ferromagnético já foi amplamente estudado em [103, 104]. Para este intuito, utilizaremos o método preditor-corretor de quarta ordem [105, 106].

4.1 Resultados e Conclusão

4.1.1 Energia do Skyrmion 2CS

No limite termodinâmico, a energia de um skyrmion com carga topológica Q é dada por $E_Q = 4\pi J|Q| \approx 12.57J|Q|$. Para sistemas finitos, esperamos desvios neste valor. Entretanto, através de uma análise de tamanho finito, esperamos nos aproximar assintoticamente deste valor. Na figura 4.2 calculamos a energia para diferentes tamanhos R^1 de Skyrmion 2CS e plotamos em função do inverso do tamanho do sistema. Como podemos observar, no limite termodinâmico, todos os skyrmions 2CS convergem para o valor esperado de energia.

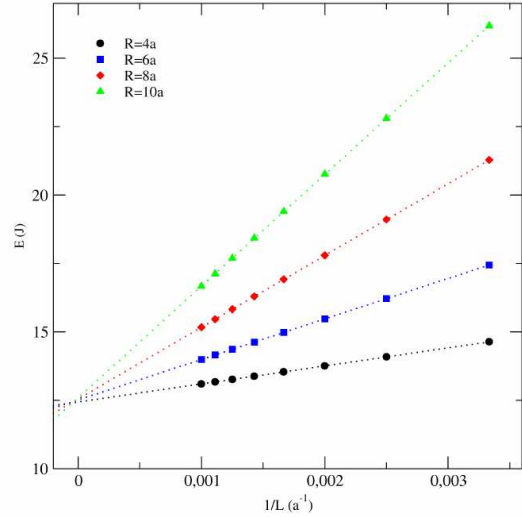


Figura 4.2: Energia do Skyrmion em função de $1/L$

4.1.2 Colapso de Skyrmions 2CS

Como mostrado por Liufei Cai et. al. [103], skyrmions 1CS em uma rede discreta, descrita pelo modelo de heisenberg isotrópico bidimensional, colapsam tanto no caso ferromagnético quanto antiferromagnético. Apesar da diferença entre as texturas para o caso 1CS e 2CS, ambos são topologicamente equivalentes, de forma que esperamos um comportamento similar para ambos. De fato, na figura 4.3, vemos para diversos tamanhos iniciais que os skyrmions 2CS também colapsam após decorrido um tempo. No gráfico interno, temos um plot em escala log-log do tempo que

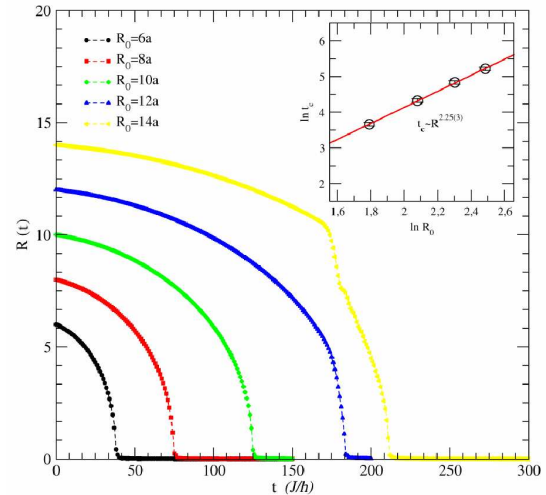


Figura 4.3: Tamanho do skyrmion $R(t)$ vs. tempo de simulação t

¹o tamanho do skyrmion 2CS é definido como a distância entre um meron e o centro do skyrmion.

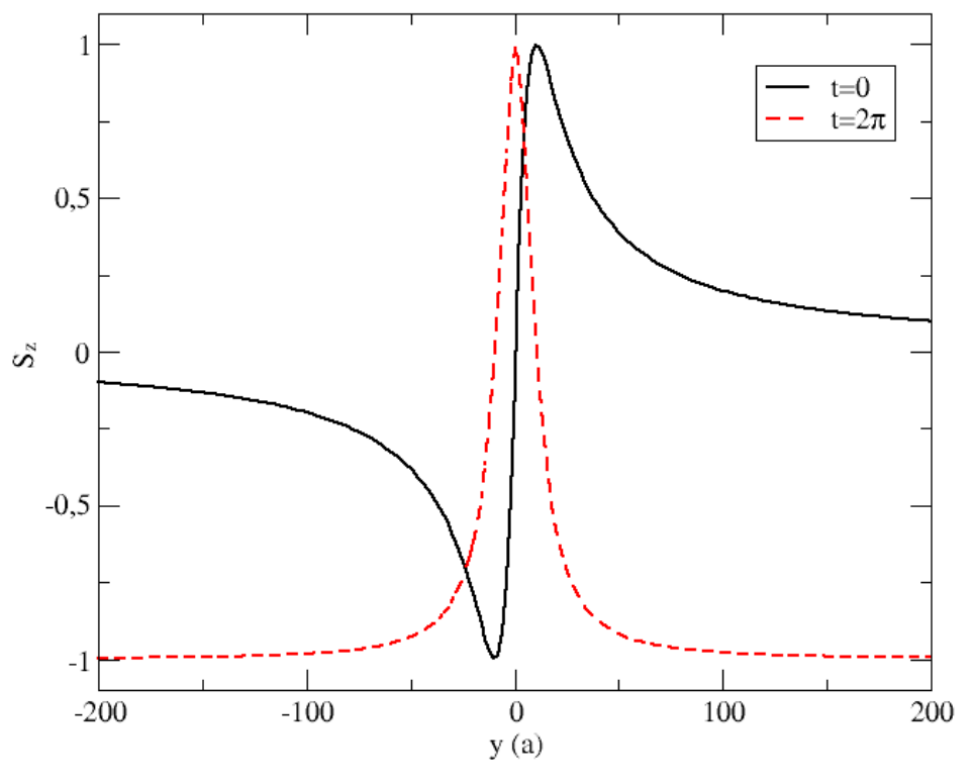
levou para a textura colapsar (t_c) em função do tamanho inicial do sistema R_0 . Os resultados prévios de [103] sugerem que t_c e R_0 respeitem uma lei de potência do tipo $t_c \propto R_0^\alpha$. Sendo assim, o ajuste no gráfico interno nos leva a um coeficiente $\alpha = 2.25$, muito próximo do coeficiente obtido por [103] ($\alpha = 2.15$).

4.1.3 Conversão de Skyrmions 2CS em 1CS

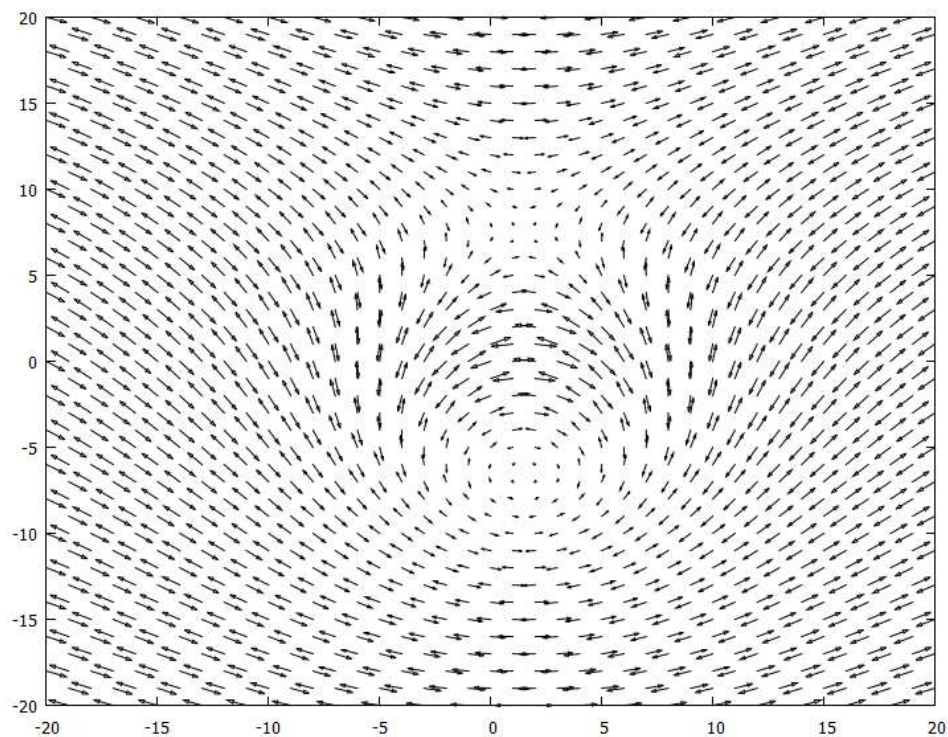
Por fim, estudamos a influência de campos magnéticos externos constantes na estrutura 2CS em duas ocasiões. Primeiro, o campo externo é aplicado paralelamente aos spins da fronteira (\hat{x}). Segundo, o campo externo é aplicado perpendicularmente aos spins da fronteira (\hat{y}). Esta escolha deve-se ao fato da estrutura não ser cilíndricamente simétrica, tal qual sua contraparte 1CS. No primeiro caso, uma pequena rotação ao redor do centro do skyrmion é induzida, porém, sem afetar o colapso, bem como o tempo de colapso (t_c) da estrutura.

Contudo, no caso em que o campo é aplicado perpendicularmente aos spins da fronteira, um comportamento interessante é observado. Inicialmente, os spins precessam ao redor do eixo definido pelo campo aplicado, deformando continuamente a estrutura. Após decorrido um tempo $t = 2\pi J/h$, a textura 2CS foi continuamente deformada em uma estrutura do tipo 1CS. Como o processo de deformação das texturas devido à precessão dos spins continua, a textura 1CS é novamente deformada na textura 2CS, em um processo cíclico.

Na figura 4.4a plotamos a componente z do spin, na rede Néel, ao longo do eixo- y (para efeitos práticos de simulação, adotamos $J = h = 1$) e para 2 instantes de tempo distintos ($t = 0$ e $t = 2\pi$). É fácil notar que a condição de spin paralelos ao eixo- x no instante $t=0$ é convertida na condição em que os spins são perpendiculares ao plano, característica da solução 1CS. A figura 4.4a mostra a configuração inicial do skyrmion 2CS. Enfatizamos que, como ambas as soluções pertencem ao mesmo setor topológico, essa conversão é viável pois deve existir uma deformação contínua que leve a textura 1CS na textura 2CS e vice-versa. Resultado similar a esta conversão também foi observado por Yu et al. [102] onde uma rede quadrada bidimensional de merons e anti-merons é convertida em uma rede hexagonal de skyrmions 1CS via aplicação de um campo externo.



(a) Componente z do spin na rede Néel ao longo do eixo- y para os instantes de tempo $t = 0$ e $t = 2\pi$.



(b) Configuração inicial do skyrmion 2CS

Figura 4.4: Componente z do spins (a) para dois instantes de tempo distintos bem como a configuração inicial (b) da textura 2CS utilizada na simulação.



Contents lists available at ScienceDirect

Solid State Communications

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ssc

Communication

Skyrmions and merons in two-dimensional antiferromagnetic systems

R.L. Fernandes*, R.J.C. Lopes, A.R. Pereira

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36570-000, Viçosa, Minas Gerais, Brazil



ARTICLE INFO

Communicated by H. Akai

Keywords:

Skyrmion

Merons

Antiferromagnet

Spin dynamics

ABSTRACT

We have investigated (numerically) skyrmions constituted by two merons in two-dimensional Heisenberg antiferromagnets. The behavior and stability of these topological pseudo-particles are analyzed in discrete and finite lattices. The influence of lattice defects and external magnetic fields is also studied. The topological stability dictates that the two merons must be kept apart but processes of annihilation and fusion of merons are observed for finite lattices.

1. Introduction

Topological solitons and vortices are investigated in the context of condensed matter physics for more than a half-century. In the decade of 1990, the presence of these objects in planar magnets was analyzed by their possible indirect contributions to some experimental physical variables such as the specific heat [1,2] and the neutron scattering function [3–7]. Nowadays, individual skyrmions and skyrmion lattices are directly seen in chiral magnets [8,9] and the possibility of their use in new technologies is very actual [10,11]. In general, in these studies, the focus is on skyrmions with only one center (1CS) as will be explained below. Particularly, in chiral ferromagnets, these are the crucial objects since the broken symmetry dictate them. However, a kind of two-center skyrmions (2CS) are also possible and much less attention has been dedicated to them (probably because they were not yet directly observed experimentally). It is always expected that one day, perhaps in a near future, these topological structures could also be seen (directly or not) in new classes of magnetic materials (similar to what happened to the case of 1CS). Recently, structures very similar to 2CS, called bimerons, have been stabilized in frustrated two-dimensional in-plane magnets [12]. Further, crystal structure that can stabilize these bimerons or bimeron crystals via the Dzyaloshinskii-Moriya interaction has been also analyzed [12]. Therefore, here, we investigate some problems associated with the annihilation and fusion of these topological solitons in discrete and finite lattices.

Before starting our investigation of the planar antiferromagnet we describe first the continuum limit of the two-dimensional (2d) isotropic Heisenberg ferromagnet, which is expressed by the non-linear σ -model

$$H_{\sigma} = \frac{J}{2} \int d^2x (\nabla \mathbf{S})^2, \quad (1)$$

with the spin \mathbf{S} obeying the constraint $\mathbf{S}^2 = 1$. Because the constraint, the \mathbf{S} field has two independent components, which implies in a unique mapping of $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ onto the plane $\mathbf{x} = (x, y)$. Each nontrivial field configuration (skyrmion) is characterized by a conserved topological charge $Q = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ and finite energy $E = 4\pi J|Q|S^2$, independently of its size R (the non-linear σ -model is scale invariant). The topological solution requires boundary conditions at $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, being the skyrmion configuration deeply related with this. For instance, taking $\mathbf{S} = (0, 0, \pm 1)$ as \mathbf{x} goes to infinity, one gets the $|Q|$ core configuration. Other configuration completely different (but with the same energy) can be obtained considering $\mathbf{S} = (\pm 1, 0, 0)$ at $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, resulting in a $2|Q|$ core configuration. Considering the spherical symmetry of the spin space, here, we are calling skyrmion center the point where the in-plane spin components obey the relation $S_x^2 + S_y^2 = 0$ (or $S_z = \pm 1$). Then, for the 1CS ($Q = 1$), there is also the possibility of a 2CS with the same energy. The 2d antiferromagnet can also be described by similar Hamiltonian and static solutions (see next section), but with vector \mathbf{S} replaced by the normalized Néel sublattice magnetization $\mathbf{n}_i = (\mathbf{S}_{2i} - \mathbf{S}_{2i+1})/2S$, where the subscripts refer to the different sublattices.

As said before, one core skyrmions have received much attention due to its experimental observation in various magnetic systems (specially, in non-center-symmetric ferromagnets such as $MnSi$, $FeGe$, $Fe_{1-x}Co_xSi$ [13]). The broken space-symmetry in these materials activates the Dzyaloshinskii-Moriya interaction that favors a canted spin arrangement. Applying a weak magnetic field, skyrmions are stabilized. However, apart from these interactions, it is also useful to study the dynamics of isolated skyrmions in real magnetic films, comprising what

* Corresponding author.

E-mail address: rodrigo.l.fernandes@ufv.br (R.L. Fernandes).<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2018.12.017>

Received 15 August 2018; Received in revised form 28 November 2018; Accepted 27 December 2018

Available online 31 December 2018

0038-1098/© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

effects the discreteness, anisotropy, defects and so on have on these excitations. Once topological properties are related to continuity of the field model, one expects that a skyrmion configuration in a discrete lattice should be unstable [14,15]. Indeed, several studies related to 1CS in a discrete lattice confirm this fact. For example, in Ref. [15] the authors study skyrmions in isotropic two-dimensional ferro and antiferromagnetic lattices, concluding that discreteness effects lead to their collapse. On the other hand, concerning excitations with two cores, Hertel and Schneider [16] performed numerical simulations of the vortex-antivortex pair annihilation in a thin magnetic film. They observed extremely different outcomes for vortex-pairs with parallel and antiparallel core magnetization. The relevance of skyrmion-mediated annihilation was also investigated in Refs. [17,18].

Of course, there are several differences between the dynamical behavior of these spin textures in ferromagnets and antiferromagnets. Indeed, these states have very different dynamics and here, we will also point out some distinct behaviors. For instance, for effect of comparison with our results, it should be important to say that a 2CS in a 2d Heisenberg ferromagnet is highly stable and did not collapse even in a discrete and finite lattice. However, this object is not static in finite lattices, i.e., the two cores tour around each other with a defined frequency ω for a given lattice size L . This frequency decreases as L increases indicating that, in the limit $L \rightarrow \infty$, the skyrmions become static [19] with energy equal to $4\pi JS^2$. In 2d antiferromagnets, things work very differently for the 2CS, as will be shown. To start, we first describe the model and the topological configurations. Our system is the planar classical Heisenberg model in a discrete lattice. All results are obtained numerically by spin dynamics simulations.

2. Model and results

In the continuum approach, the classical 2d-antiferromagnetic Heisenberg model is described by the following Hamiltonian:

$$H = \frac{1}{2} JS^2 \int d^2x \left[\frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{n}}^2 + (\nabla \mathbf{n})^2 \right], \quad (2)$$

with the Néel vector normalized as $\mathbf{n}^2 = 1$. Here, $c = 2\sqrt{2}JaS/\hbar$ is the speed of spin waves in a square lattice and a is the lattice parameter. Similar to the continuum limit of the ferromagnetic case (see Eq. (1)), the motion equations for the 2d antiferromagnet also lead to static configurations (skyrmions) of finite energy $E = 4\pi|Q|J$ (Q is the topological charge). Indeed, the double core skyrmions ($Q = 1$) can be obtained by using boundary conditions $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$ at $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, resulting in:

$$\mathbf{n} = \left(\frac{r^2 - R^2}{r^2 + R^2}, \frac{2Rx}{r^2 + R^2}, \frac{2Ry}{r^2 + R^2} \right), \quad (3)$$

where $r^2 = x^2 + y^2$ and R is the skyrmion size. Note that its energy is independent of R . Basically, this structure consists of two merons. A meron has chirality q (this $O(2)$ winding number can assume the values $q = +1$ for vortices type configurations or $q = -1$ for antivortex) and core polarity $p = \pm 1$, containing, therefore, a half-integer skyrmion charge $\nu = qp/2$ (the meron wraps only half of the sphere and it has a configuration similar to the vortex configuration). Then, a meron ($q = 1, p$) and an antimeron ($q = -1, -p$) with antiparallel core polarizations have equal skyrmion numbers adding to a total of $Q = 2\nu = +1$ or $Q = 2\nu = -1$ and, consequently, this texture belongs to a nontrivial topological sector, in such a way that it cannot be deformed continuously into the ground state (with zero skyrmion number), being topologically stable. In a 2CS skyrmion, the meron and the antimeron centers are positioned at the skyrmion centers.

Fig. 1 shows the skyrmion configuration in a discrete lattice with $R = 4a$ obtained as follows: we divide the antiferromagnetic (AFM) lattice into two sublattices A and B and, for each spin \mathbf{S}_i in the sublattice A (also given by Eq. (3)) corresponds an almost contrary spin ($-\mathbf{S}_i$) in the sublattice B . If one considers the Néel field \mathbf{n} , the configuration

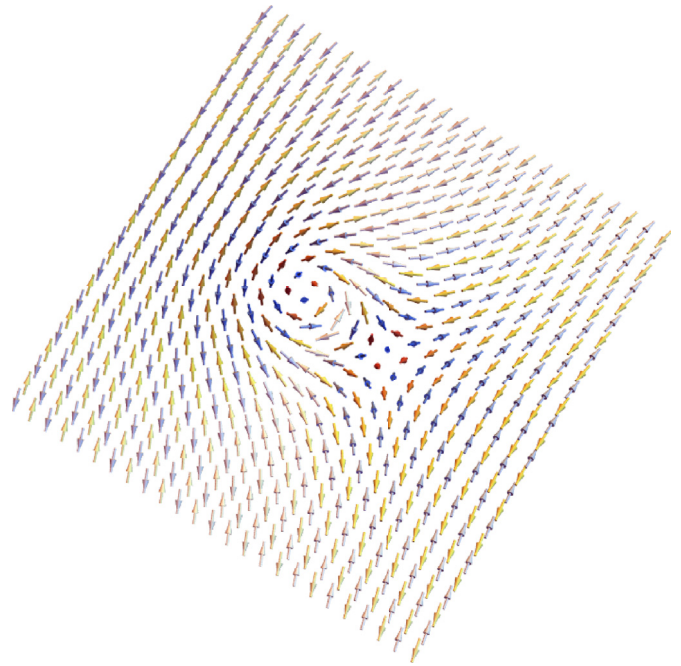


Fig. 1. 2CS skyrmion configuration in a discrete antiferromagnetic lattice.

would be similar to the configuration of only one sublattice A or B . The study of this spin texture must also be relevant because in a thin film with no intrinsic anisotropy, the magnetization is forced to stay mainly in the plane of the film by dipolar interactions. However, we do not consider the dipolar interaction since it causes a rapid fusion of the two centers, constituting in an extra factor that favors the annihilation of the skyrmion configuration given by Fig. 1. Therefore, our 2d lattice is a very coarse approximation of a thin film, which in most cases is not actually a monoatomic system. On the other hand, there is a large class of layered insulators that have been shown to exhibit the experimental characteristic of two-dimensional magnetism and our calculations could be applied to them (for instance, the isotropic spin-5/2 layered manganese compounds [1,20] and n -propylammonium tetrachloromanganate [5] are good candidates). Indeed, for some typically layered insulators, the interlayer coupling J' is very small as compared with the intralayer coupling J ($J'/J \ll 1$) and the material becomes effectively 2d for finite temperatures ($T \neq 0$). In addition to the classical aspects contemplated here, such a spin texture may be relevant even in the quantum level, where the 2CS and similar structures were investigated in the context of possible 2d spin liquid materials with merons behaving like spinons, which must suffer deconfinement due to quantum fluctuations [21,22]. Also, similar structures known as bi-merons (compact two-meron states) are interesting objects in planar chiral magnets [23,24]. Here, we believe that our results are the first step in the direction concerning magnetic thin films and can give important insights about these structures in more realistic materials.

As mentioned before, our aim is to investigate how the skyrmion shown in Fig. 1 behaves in a discrete and finite lattice. Therefore, in order to explore its dynamical behavior, we performed numerical integration of the equations of motion for each spin lattice. These equations are given by:

$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{S}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \times \mathbf{S}_i, \quad (4)$$

where $\mathcal{H} = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ represents the isotropic Heisenberg Hamiltonian and $J > 0$ is the exchange constant for the antiferromagnet (AFM). The method used for the numerical integration is the a fourth-order predictor-corrector that provides good performance, keeping the spin length and energy conservation. Periodic boundary conditions is

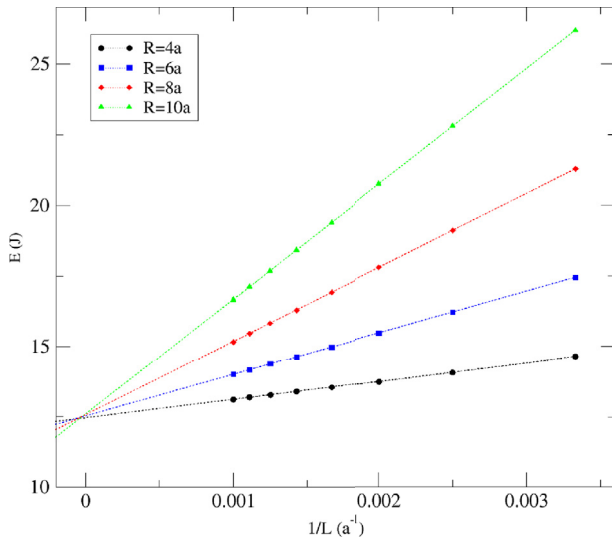


Fig. 2. Energy of skyrmion as a function of the inverse of the lattice size L .

considered to minimize finite size effects. We performed simulations in lattices up to 1000×1000 spins.

2.1. Lattice without impurities

Firstly we consider the case of a pure system, i.e., without the presence of nonmagnetic impurities. We perform simulations for different skyrmion sizes R on different lattice sizes L . Fig. 2 shows the texture energy E as a function of $1/L$. The energy E is calculated directly from the classical Heisenberg Hamiltonian $\mathcal{H} = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, disregarding the ground state energy $-2JN$ (with $N = L \times L$). This is the total energy of the system and is a conserved quantity in the simulation. Indeed, since the skyrmion in AFM is very unstable in the discrete lattice, the kinetic energy term \dot{R}^2 in Eq. (2) is no longer zero and depends on the quantity $dR(t)/dt$, where $R(t)$ is the skyrmion size. Therefore, as the kinetic term increases with t , the gradient term in Eq. (2) decreases by the same amount, keeping constant the total energy E . Note in Fig. 2 that, for small lattices, the skyrmion energy becomes strongly dependent of its size R and higher than that found in its continuum counterpart, namely, $4\pi J$. This result is expected since the lattice is finite and the discreteness leads to a relative loss of the topological properties of this structure. However, as L goes to infinity, the energy becomes independent of R and tends to the usual value $4\pi J$, as it can be seen from an extrapolation of the data. Therefore, a double core skyrmion in a 2d AFM becomes stable only in the limit $L \rightarrow \infty$. In a finite lattice, additional interactions are required to stabilize it.

Now, with regard to the dynamical aspects, we get that in the antiferromagnet, double core skyrmions are very unstable even in large lattices. For example, in a system of size $1000a \times 1000a$, the excitation (with initial size $R_0 = 10a$) collapse to the ground state at approximately $t = 125J/h$. It is a lifetime much smaller than that of 2CS in the 2d ferromagnetic counterpart [19]. Moreover, our results show that the lifetime of this object does not just depend on the size lattice L , but also on the skyrmion initial size R (see $R(t)$ in Fig. 3). Therefore, small skyrmions collapse faster than large skyrmions. Another relevant aspect is that, differently from the picture observed in the ferromagnet (FM) case, double core skyrmions in 2d AFM do not revolve around its center. Just for comparison, in Ref. [19], the authors obtained that in a finite FM lattice (if R is not small enough), the two cores of the skyrmion rotate with a defined frequency ω , being its energy expressed as $E = 4\pi J + a\omega(L)$. They also obtained that the size R is approximately constant over the time simulation t . On the other hand, here for the AFM case, the cores of a skyrmion do not rotate. However, they approximate each other with $R(t)$ decreasing ever faster, until the cores

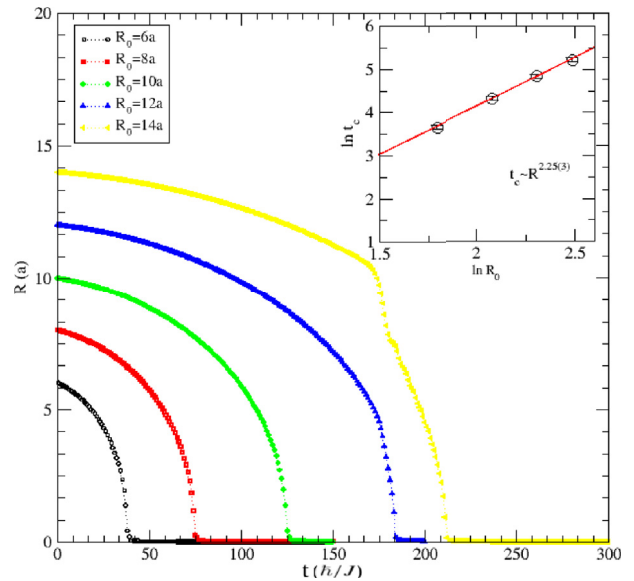


Fig. 3. Skyrmion size R as a function of the time simulation time t .

meet in the mass center and the skyrmion decays into spin waves. The merons do not rotate in antiferromagnets because the sublattices tend to turn in opposite directions. Therefore, without rotation, the merons are then impelled to each other due to lattice finite size. As shown in Fig. 3, by considering a lattice size equal to $1000a \times 1000a$, the lifetime of a skyrmion in a finite system increases with its initial size R_0 . Keeping constant the lattice size L , discreteness effects become more significant, affecting the topological stability of these skyrmions. Consequently, as the skyrmion size becomes smaller, the lifetime of skyrmions with initial size R_0 decreases as R_0 decreases and it is annihilated generating spin waves. For an infinite lattice, skyrmions of any dimension must become stable even in a discrete lattice, because their energy tends to $4\pi J$, independent of R (see Fig. 2). These results are in qualitative agreement (in some aspects) with results obtained in Ref. [15]. In this work, the authors studied analytically and by numerical solutions, skyrmions of one core in ferro- and antiferromagnetic lattices. They obtained that their lifetimes scale with the initial size R_0 as R_0^5 for ferromagnets and as $R_0^{2.15}$ for antiferromagnets. This means that ferromagnetic skyrmions are more stables than antiferromagnetic skyrmions. Following this reasoning, we also calculate how the lifetime of the double core skyrmion scales with its initial size R_0 . The results are shown in the insertion of the graphic in Fig. 3. Here, we obtain that the collapse time scales as $t_c = R_0^{2.25}$. Therefore, very close to the value obtained for the one core case of Ref. [15]. Indeed, our results lead to the conclusion that, in antiferromagnets, 1CS and 2CS have very similar behaviors. We really expect that these two merons spin texture could be directly found in a near future in some magnetic materials with special features.

2.2. Lattice with impurities

In addition to the lattice discreteness effects in the skyrmion stability and dynamics, it would be very useful to investigate how the 2CS behaves in the presence of nonmagnetic impurities. In fact, a lot of studies showed that nonmagnetic impurities affect the dynamics of solitons, specially vortices in the two dimensional XY magnets [25]. So we consider in our system a skyrmion configuration with initial size $R_0 = 10a$ and mass center localized at the origin $(0, 0)$ and a spin vacancy located at the site $(12a, 10a)$. The lattice size is $L = 1000$ and the time evolution of the initial structure is shown in Fig. 4 up to $t = 120(J/h)$. The colors intensity refers to the z-component of the spin S^A (A refers to the sublattice) and the black circle represents the

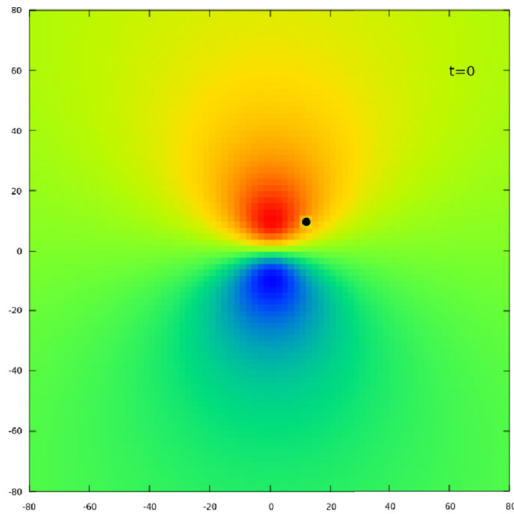
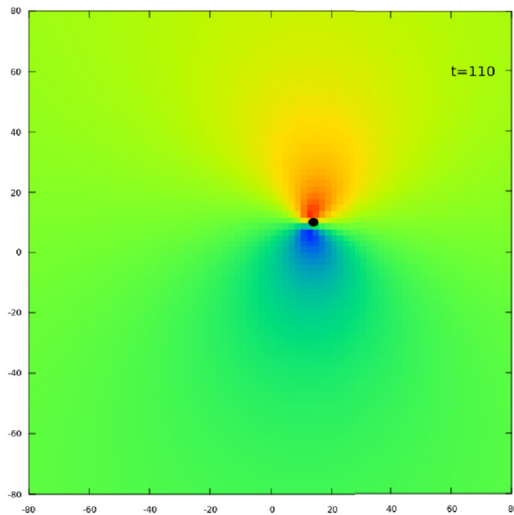
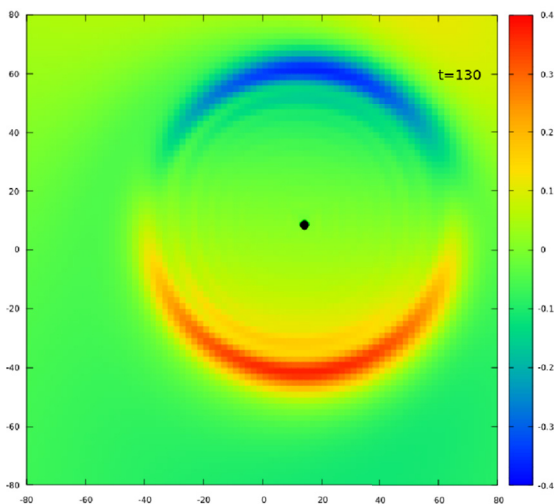
(a) Time $t=0$.(b) Time $t=110$.(c) Time $t=130$.

Fig. 4. Time evolution of skyrmion in the presence of nonmagnetic impurities located at site (12a, 10a).

vacancy. As one can see, the simulation results show that the skyrmion center is not static, but rather, it goes towards the impurities, i.e. the skyrmion as a whole is attracted to the lattice defect. During this process, the spin vacancy does not deform the two merons structure, but just pull it as a whole. A similar behavior was obtained by Mól et al. [26] in the context of planar vortices. In this work, the authors showed by Monte Carlo simulation as well as by analytical calculations that an individual planar vortex is attracted and trapped by nonmagnetic impurities, which works as an attractive potential [26]. It occurs because the exchange interaction between spins is higher in the vortex center than in the vortex periphery (since the angle between neighbor spins is larger near the vortex center). Then, to minimize the energy, it is better the center of the vortex to be located at the spinless atom. These authors also showed that the vortex structure does not appreciably change its configuration in the presence of an impurity. However, we have found here an important difference for the skyrmion case. Indeed, when one of the cores falls into the vacancy, the 2CS collapses completely. Therefore, we conclude that the lifetime of a skyrmion in antiferromagnets reduces considerably in the presence of impurities. It is important to point out that in the process of annihilation, the skyrmion size R decreases with time t due to discreteness effect, as previously mentioned. Lastly, the simulations show that the mass center of skyrmion does not move appreciably to great distances (about $2R$) between the skyrmion and the vacancy.

2.3. 2CS skyrmion in a magnetic field

We have also investigated the 2CS skyrmion in the presence of applied external magnetic fields. Since this spin texture is not cylindrically symmetric, two cases are analyzed: (a) the field is applied perpendicularly to the line joining the merons centers; (b) the field is applied parallel to the line joining the merons centers. In both cases, the dynamic of the skyrmion is strongly affected. First, we present the case (a). A constant magnetic field is applied along the x -direction, e.g. aligned with the lattice edge spins. Basically, the effect of this field is to induce a rotation of the skyrmion cores counterclockwise around its “mass” center with a defined frequency $\omega \propto B_x$. In this process, the skyrmion center does not move, but it stays at the initial place during all the time. Moreover, the field does not affect the lifetime of the structure, which collapse at a time t_c equal to the previous case without the field. Therefore, in principle, for an infinite lattice (where the skyrmion is stable), the two merons can rotate around the mass center of the spin texture (the skyrmion center) when a static field is applied in the system.

On the other hand, by applying a magnetic field along the y -direction (case (b)), we observe a more interesting behavior of the skyrmion as a whole. Initially the skyrmion centers are placed at (0, -10) and (0, 10). After applying the field, the spins start to precess around the field and the spins of the system borders rotate practically perpendicular to the field (since the initial conditions imply $\mathbf{S} = (\pm 1, 0, 0)$ at $x \rightarrow \infty$). Therefore, as the borders spins tend to become out of plane, the 2CS is continuously deformed in a 1CS since both configurations have the same topological charge and energy. As the spins remain rotating (due to the presence of the field), the 1CS is continuously transformed in a 2CS and this process repeats periodically with frequency $\omega \propto B_y$ until the collapses of the structure (in a finite lattice). Fig. 5 presents the z -component of the spin S_z^A (spins belonging to the sublattice A) as a function of the position along the y -axis (keeping $x = 0$) for two different instants of time ($t = 0$ and $t = 2\pi$).

At $t = 0$ (black line), one can see the two-centers of the AFM skyrmion (2CS) as indicated by the two peaks in the graphic, which correspond to the two merons cores (of course, the spins on the edge of the lattice point out along the x -direction). As time evolves, the skyrmion configuration changes in such a way that, at $t = 2\pi$, these peaks become only one (and the edge spins point out along the z -direction). This is exactly the skyrmion with only one center (1CS) also with $Q = 1$.

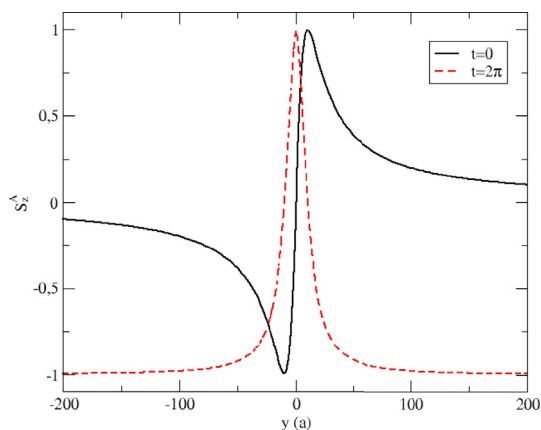


Fig. 5. The z -component of the spin S_z^A as a function of the position along the y -axis (keeping $x = 0$) for two different instants of time ($t = 0$ and $t = 2\pi$).

Indeed, the 2CS-type excitation become 1CS-type and so on. Analyzing only the sublattice magnetization (for instance, sublattice A), the first transformation of a 2CS skyrmion leads to a 1CS with central spins pointing positively along z -direction while the second transformation leads to 1CS with central spins pointing negatively along z -direction and so on. Topologically, the magnetic field works like an apparatus that deforms continuously the 2CS structure in a 1CS structure and vice-versa since these two structures are in the same topological sector ($Q = 1$ -sector for both). Although 1CS and 2CS are not substantially distinct topologically, it is important to say that the formation of these structures depends on the properties of the material; for instance, magnetic fields and small anisotropy could determine the tendency of the spins (in-plane or out-of-plane) and dipolar interaction tend to keep the spins parallel to the plane. Objects very similar to the 2CS investigated here (bimerons) are now considered in ferromagnetic materials in structures such as racetracks [12].

3. Conclusion

In summary, we have investigated the behavior of skyrmions constituted by two merons in two-dimensional Heisenberg antiferromagnetic materials. The effects of lattice discreteness on the topological stability are small if these skyrmions are large enough. Of course, our investigations considered finite lattices, which imply that the skyrmion energy is larger than $4\pi J$. Indeed, the lattice finiteness impels an attraction between the merons, destroying the whole structure. When the distance between the two merons shrinks to the lattice scale, the skyrmion decays into spin waves. The presence of magnetic fields can also induce interesting behaviors in the skyrmion and merons, such as the transformation of a two centers skyrmion in a cylindrically symmetric skyrmion and vice-versa in a cyclic process.

Acknowledgments

The authors thank CNPq, FAPEMIG and CAPES for financial support.

References

[1] F. Waldner, Two dimensional soliton energy and esr in afm, *J. Magn. Magn Mater.*

- 54–57 (1986) 873–874 [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(86\)90293-3](https://doi.org/10.1016/0304-8853(86)90293-3).
- [2] F. Waldner, Comment on “spin correlations of 2d quantum antiferromagnet at low temperatures and a direct comparison with neutron-scattering experiments”, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 1519, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.1519>.
- [3] F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, C. Kawabata, Dynamical correlations from mobile vortices in two-dimensional easy-plane ferromagnets, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 591–602, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.591>.
- [4] M.E. Gouva, G.M. Wysin, A.R. Bishop, F.G. Mertens, Vortices in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 11840–11849, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.11840>.
- [5] C.E. Zaspel, T.E. Grigereit, J.E. Drumheller, Soliton contribution to the electron paramagnetic resonance linewidth in the two-dimensional antiferromagnetic, *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995) 4539–4542, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.4539>.
- [6] K. Subbaraman, C.E. Zaspel, J.E. Drumheller, Impurity-pinned solitons in the two-dimensional antiferromagnet detected by electron paramagnetic resonance, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2201–2204, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.2201>.
- [7] F.M. Paula, A.R. Pereira, G.M. Wysin, Contribution of impurity-pinned vortices to the response function in a randomly diluted easy-plane ferromagnet on a square lattice, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 094425, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.094425>.
- [8] X.Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J.H. Park, J.H. Han, Y. Matsui, Y. Nagaosa, Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal, *Nature* 465 (7300) (2010) 901–904.
- [9] S. Heinze, K. von Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer, S. Blugel, Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions, *Nat. Phys.* 7 (9) (2011) 713–718, <https://doi.org/10.1038/nphys2045>.
- [10] A. Fert, V. Cros, J.P.A. Sampaio, Skyrmions on the track, *Nat. Nanotechnol.* 8 3 (2013) 152–156.
- [11] R. Loreto, W. Moura-Melo, A. Pereira, X. Zhang, Y. Zhou, M. Ezawa, C. de Araujo, Creation, transport and detection of imprinted magnetic solitons stabilized by spin-polarized current, *J. Magn. Magn Mater.* 455 (2018) 25–31 magnetic skyrmions as future information carriers).
- [12] B. Göbel, A. Mook, J. Henk, I. Mertig, O. A. Tretiakov, Magnetic Bimerons as Skyrmion Analogues in In-plane Magnets, [arxiv:1811.07068](https://arxiv.org/abs/1811.07068).
- [13] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, Skyrmion lattice in a chiral magnet, *Science* 323 (2009) 915, <https://doi.org/10.1126/science.1166767> [arXiv:0902.1968](https://arxiv.org/abs/0902.1968).
- [14] A. Abanov, V.L. Pokrovsky, Skyrmion in a real magnetic film, *Phys. Rev. B* 58 (1998) R8889–R8892, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.R8889>.
- [15] L. Cai, E.M. Chudnovsky, D.A. Garanin, Collapse of skyrmions in two-dimensional ferromagnets and antiferromagnets, *Phys. Rev. B* 86 (2) (2012) 024429.
- [16] R. Hertel, C.M. Schneider, Exchange explosions: magnetization dynamics during vortex-antivortex annihilation, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 177202, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.177202>.
- [17] B. Van Waeyenberge, A. Puzic, H. Stoll, K. Chou, T. Tyliczszak, R. Hertel, M. Fähnle, H. Brückl, K. Rott, G. Reiss, I. Neudecker, D. Weiss, C. Back, G. Schütz, Magnetic vortex core reversal by excitation with short bursts of an alternating field, *Nature* 444 (7118) (2006) 461–464.
- [18] K.-S. Lee, S. Choi, S.-K. Kim, Radiation of spin waves from magnetic vortex cores by their dynamic motion and annihilation processes, *Appl. Phys. Lett.* 87 (19) (2005) 192502, <https://doi.org/10.1063/1.2128478>.
- [19] M. Amaral, R. Silva, A. Pereira, W. Moura-Melo, Discrete double core skyrmions in magnetic thin films, *J. Magn. Magn Mater.* 321 (19) (2009) 3360–3363 <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.06.015>.
- [20] F. Waldner, Are skyrmions (2d solitons) observable in 2d antiferromagnets? *J. Magn. Magn Mater.* 104–107 (1992) 793–794 [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(92\)90362-R](https://doi.org/10.1016/0304-8853(92)90362-R).
- [21] G. Baskaran, Spinon deconfinement above a finite energy gap in two-dimensional quantum heisenberg antiferromagnets, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 212409, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.212409>.
- [22] A.R. Moura, A.R. Pereira, A.S.T. Pires, Casimir-energy-induced confinement and deconfinement of spinons in a two-dimensional anisotropic nonlinear σ model, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 014431, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.014431>.
- [23] M. Ezawa, Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 100408, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.100408>.
- [24] R.L. Silva, L.D. Secchin, W.A. Moura-Melo, A.R. Pereira, R.L. Stamps, Emergence of skyrmion lattices and bimerons in chiral magnetic thin films with nonmagnetic impurities, *Phys. Rev. B* 89 (2014) 054434, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.054434>.
- [25] A.R. Pereira, G.M. Wysin, Hole-vortex-magnon interactions in diluted layered antiferromagnets with planar symmetry, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 214402, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.214402>.
- [26] A.R. Pereira, L.A.S. Mól, S.A. Leonel, P.Z. Coura, B.V. Costa, Vortex behavior near a spin vacancy in two-dimensional xy magnets, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 132409, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.132409>.

Capítulo 5

Considerações Finais

Além dos trabalhos escolhidos para desenvolvimento e descrição dos capítulos 2 ao 4, os 4+1 anos de estudo e pesquisa deste doutorado também renderam outros trabalhos e colaborações, a listar:

- A.R. Moura and R.J.C. Lopes. *On coherent states and the self-consistent harmonic approximation*. JMMM, **472** 1-6, (2019). [107]

Neste trabalho analisamos a magnetização para sistemas bidimensionais dentro das condições suficientes para obtenção de estados coerentes. Desenvolvemos uma generalização da aproximação harmônica autoconsistente para modelos de spin com estados coerentes. Uma vez que os operadores S_z e φ são operadores canonicamente conjugados, obtivemos o mínimo princípio da incerteza, justificando assim a adoção da aproximação harmônica. Mostramos que a aplicação de um campo magnético dinâmico perpendicular ao plano da amostra gera as condições suficientes para o surgimento de uma precessão coerente da magnetização. A análise da termodinâmica em baixas temperaturas também foi desenvolvida concordando com resultados teóricos e experimentais prévios.

- R.J.C. Lopes, R.C. Silva, R.L. Silva, W.A. Moura-Melo, and A.R. Pereira. *Antiferromagnetic-vortex dynamics driven by spin-polarized current in small thin disks*. PLA **384**(18) 126376 (2020). [108]

Foi investigado configurações tipo vórtice confinadas em filmes finos antiferromagnéticos. Com auxílio de uma corrente spin-polarizada alternada, utilizamos a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert modificada com o termo de Berger-Slonczewski e mostramos que estes vórtices adquirem dinâmica oscilatória com frequência bem definida, o que abre a possibilidade de controle da dinâmica de vórtice através de meios puramente eletrônicos. Entre a região de parâmetros onde predominam os vórti-

ces circulares e a região predominante de vórtices divergentes, também observamos configurações intermediárias tipo-“cebola”.

- A. S. Araújo, R. J. C. Lopes, V. L. Carvalho-Santos, A. R. Pereira, R. L. Silva, R. C. Silva, and D. Altbir. *Typical skyrmions versus bimerons: A long-distance competition in ferromagnetic racetracks*. PRB **102** 104409 (2020). [109]

Investigamos o movimento de skyrmions e bimerons ferromagnéticos em uma “pista de corrida” composta por uma rede de spins cujo comprimento é maior que a sua largura. Ambas as texturas estão sujeitas a uma força Magnus, induzindo um efeito Hall de skyrmion apreciável que, eventualmente, leva à destruição da textura nas bordas desta “pista”. O movimento dos spins é induzido através da introdução de uma corrente spin-polarizada. Mostramos que este movimento é intimamente dependente da matriz de massa dos skyrmions e dos bimerons, onde pequenas variações nos elementos da matriz de massa levam a modificações na sua trajetória. Além disso, mostramos que bimerons posicionados verticalmente em relação à sua velocidade de movimento atingem maiores distâncias em relação aos bimerons posicionados horizontalmente que por sua vez também atingem distâncias maiores que os skyrmions.

- Neeti Keswani, Ricardo J. C. Lopes, Yoshikata Nakajima, Ranveer Singh, Neha Chauhan, Tapobrata Som, D. Sakthi Kumar, Afranio R. Pereira, and Pintu Das. *Controlled creation and annihilation of isolated robust emergent magnetic monopole like charged vertices in square artificial spin ice*. Scientific Reports **11** 13593 (2021). [110]

Neste trabalho é demonstrado computacional e experimentalmente a estabilização de vértices tipo monopolo magnético em recortes extremamente finitos de uma rede quadrada de gelos de spin, tanto no caso normal como na presença de pequenas deformações em alguns domínios magnéticos. Além de mostrar a existência de uma possível rota para o surgimento de excitações tipo-monopolo entre os estados em um sistema de gelo de spin, a replicação deste resultado em sistemas maiores pode ajudar no estudo da dinâmica de linhas de Faraday [111]. Também é especulada a possibilidade de testar a inversão de helicidade em partículas de Dirac espalhadas por monopolos magnéticos [112].

Todos estes trabalhos desenvolvidos foram capazes de gerar resultados inovadores, além de diversas contribuições para temas e áreas ainda em desenvolvimento na literatura. Pessoalmente, considero prolífico este longo, porém rápido período de minha formação. Ressalto ainda a possibilidade de continuidade e de realização de novas colaborações, com outros grupos ao qual pude ter contato e algumas ligações mas, em especial, com este grupo ao qual devo a minha formação.

Bibliografia

- [1] R. J. C. Lopes, A. R. Moura, and W. A. Moura-Melo. Berezinskii-kosterlitz-thouless transition effects on spin current: The normal-metal–insulating-ferromagnet junction case. *Phys. Rev. B*, 102:184422, Nov 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.184422>.
- [2] R.J.C. Lopes and A.R. Moura. Possible extinction of berezinskii–kosterlitz–thouless transition by diagonal interactions in the checkerboard lattice. *Physics Letters A*, 382(22):1492–1498, 2018. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960118303530>.
- [3] R.L. Fernandes, R.J.C. Lopes, and A.R. Pereira. Skyrmions and merons in two-dimensional antiferromagnetic systems. *Solid State Communications*, 290:55–59, 2019. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109818305799>.
- [4] P. W. Anderson. More is different. *Science*, 177(4047):393–396, August 1972. <https://science.sciencemag.org/content/177/4047/393>.
- [5] Kurt Godel. *On Formally Undecidable Propositions of Principia Mathematica And Related Systems*, volume 1. Dover Publications, 1992. <https://store.doverpublications.com/0486669807.html>.
- [6] Stephen C. Kleene Gregory H. Moore Robert M. Solovay Jean van Heijenoort Solomon Feferman, John W. Dawson Jr. *Kurt Gödel Collected Works: Volume I: Publications 1929-1936*, volume 1. Oxford University Press, 2001. <https://global.oup.com/academic/product/collected-works-9780195147209?cc=us&lang=en&>.
- [7] Toby S. Cubitt, David Perez-Garcia, and Michael M. Wolf. Undecidability of the spectral gap. *Nature*, 528(7581):207–211, December 2015. <https://doi.org/10.1038/nature16059>.
- [8] T. H. R. Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, April 1962. [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(62\)90775-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(62)90775-7).
- [9] T. H. R. Skyrme. A non-linear field theory. *Proceedings of the Royal Society A*, 260:127–138, 1961. <https://doi.org/10.1098/rspa.1961.0018>.
- [10] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Particles*. Cambridge University Press, 2007. <https://doi.org/10.1017/CB09780511815898>.
- [11] Herbert Goldstein, Charles Poole, and John Safko. *Classical Mechanics*. Pearson Education, 2002. <https://books.google.com.br/books?id=EE-wQgAACAAJ>.
- [12] Assa Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag New York, 1994. <https://www.springer.com/gp/book/9780387942865>.
- [13] Stephen Blundell. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, 2001. <https://global.oup.com/ukhe/product/magnetism-in-condensed-matter-9780198505914>.

- [14] J. M. D. Coey. *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, 2010. <https://doi.org/10.1017/CB09780511845000>.
- [15] Alexander Altland and Ben Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2010. <https://www.cambridge.org/9780521769754>.
- [16] Daniel C. Mattis. *The Theory of Magnetism I*, volume 17. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1981. <https://www.springer.com/gp/book/9783540184256>.
- [17] Daniel C. Mattis. *The Theory of Magnetism II*, volume 55. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1985. <https://www.springer.com/gp/book/9783642824074>.
- [18] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics. Elsevier Science, 1981. <https://books.google.com.br/books?id=SvdoN3k8EysC>.
- [19] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, and L.P. Pitaevskii. *Course of Theoretical Physics: Statistical Physics, Part 2*. Number 9. 1980. <https://books.google.com.br/books?id=QAcenQAACAAJ>.
- [20] F. D. M. Haldane. Exact jastrow-gutzwiller resonating-valence-bond ground state of the spin-1/2 antiferromagnetic heisenberg chain with $1/r^2$ exchange. *Phys. Rev. Lett.*, 60:635–638, Feb 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.60.635>.
- [21] B. Sriram Shastry. Exact solution of an $s=1/2$ heisenberg antiferromagnetic chain with long-ranged interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 60:639–642, Feb 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.60.639>.
- [22] Antônio R. Moura and Afrânio R. Pereira. Study of the bilinear biquadratic heisenberg model on a honeycomb lattice via schwinger bosons. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 342:11–16, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.04.017>.
- [23] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. *Communications in Mathematical Physics*, 115(3):477–528, 1988. <https://doi.org/10.1007/BF01218021>.
- [24] Ido Niesen and Philippe Corboz. Ground-state study of the spin-1 bilinear-biquadratic heisenberg model on the triangular lattice using tensor networks. *Phys. Rev. B*, 97:245146, Jun 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.245146>.
- [25] B. A. Ivanov, A. Yu. Galkin, R. S. Khymyn, and A. Yu. Merkulov. Nonlinear dynamics and two-dimensional solitons for spin-1 ferromagnets with biquadratic exchange. *Phys. Rev. B*, 77:064402, Feb 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.064402>.
- [26] G. Fáth and J. Sólyom. Search for the nondimerized quantum nematic phase in the spin-1 chain. *Phys. Rev. B*, 51:3620–3625, Feb 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.3620>.

- [27] Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh. Transmission of electrical signals by spin-wave interconversion in a magnetic insulator. *Nature*, 464(7286):262–266, mar 2010. <https://www.nature.com/articles/nature08876>.
- [28] F. Bloch. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 61(3):206–219, mar 1930. <https://doi.org/10.1007/BF01339661>.
- [29] F. Bloch. Zur theorie des austauschproblems und der remanenzerscheinung der ferromagnetika. *Zeitschrift für Physik*, 74(5):295–335, may 1932. <https://doi.org/10.1007/BF01337791>.
- [30] N. F. Berk and J. R. Schrieffer. Effect of ferromagnetic spin correlations on superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 17:433–435, Aug 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.433>.
- [31] S. Doniach and S. Engelsberg. Low-temperature properties of nearly ferromagnetic fermi liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 17:750–753, Oct 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.750>.
- [32] Sergio M. Rezende, Antonio Azevedo, and Roberto L. Rodríguez-Suárez. Introduction to antiferromagnetic magnons. *Journal of Applied Physics*, 126(15):151101, oct 2019. <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5109132>.
- [33] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak. Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015005, Feb 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.90.015005>.
- [34] Satoshi Okamoto. Flipping handedness in ferrimagnets. *Nature Materials*, 19(9):929–930, sep 2020. <https://doi.org/10.1038/s41563-020-0779-4>.
- [35] Y. Shiomi and E. Saitoh. Paramagnetic spin pumping. *Phys. Rev. Lett.*, 113:266602, Dec 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.266602>.
- [36] Devin Wesenberg, Tao Liu, Davor Balzar, Mingzhong Wu, and Barry L. Zink. Long-distance spin transport in a disordered magnetic insulator. *Nature Physics*, 13(10):987–993, oct 2017. <https://www.nature.com/articles/nphys4175>.
- [37] Joanna Rose, Thors Hans Hansson, David Haviland, and Gunnar Ingelman. Strange phenomena in matter’s flatlands. The Royal Swedish Academy of Sciences, oct 2016. The Nobel prize in physics 2016, popular science background. <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/popular-physicsprize2016.pdf>.
- [38] Jiadong Zang (ed.), Vincent Cros (ed.), Axel Hoffmann (ed.), Carolin Behncke, Christian F. Adolff, and Guido Meier. *Topology in Magnetism. Chapter 3 - Magnetic Vortices*, volume 1. Springer, Cham, 2018. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-97334-0>.
- [39] T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, and T. Ono. Magnetic Vortex Core Observation in Circular Dots of Permalloy. *Science*, 289(5481):930–932, aug 2000. <https://www.science.org/lookup/doi/10.1126/science.289.5481.930>.

- [40] A. Wachowiak, J. Wiebe, M. Bode, O. Pietzsch, M. Morgenstern, and R. Wiesendanger. Direct Observation of Internal Spin Structure of Magnetic Vortex Cores. *Science*, 298(5593):577–580, oct 2002. <https://www.science.org/doi/10.1126/science.1075302>.
- [41] Claire Donnelly, Konstantin L. Metlov, Valerio Scagnoli, Manuel Guizar-Sicairos, Mirko Holler, Nicholas S. Bingham, Jörg Raabe, Laura J. Heyderman, Nigel R. Cooper, and Sebastian Gliga. Experimental observation of vortex rings in a bulk magnet. *Nature Physics*, 17(3):316–321, jan 2021. <https://www.nature.com/articles/s41567-020-01057-3>.
- [42] Toshiaki Tanigaki, Yoshio Takahashi, Tomokazu Shimakura, Tetsuya Akashi, Ruriko Tsuneta, Akira Sugawara, and Daisuke Shindo. Three-Dimensional Observation of Magnetic Vortex Cores in Stacked Ferromagnetic Discs. *Nano Letters*, 15(2):1309–1314, feb 2015. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl504473a>.
- [43] Carolin Behncke, Christian F. Adolff, Sebastian Wintz, Max Hänze, Benedikt Schulte, Markus Weigand, Simone Finizio, Jörg Raabe, and Guido Meier. Tunable geometrical frustration in magnonic vortex crystals. *Scientific Reports*, 8:186, jan 2018. <https://www.nature.com/articles/s41598-017-17480-1>.
- [44] compiled by the Class for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences. Topological phase transitions and topological phases of matter. The Royal Swedish Academy of Sciences, oct 2016. Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2016. <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/advanced-physicsprize2016.pdf>.
- [45] T. H. R. Skyrme. A Non-Linear Field Theory. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 260(1300):127–138, feb 1961. <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1961.0018>.
- [46] T. H. R. Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, apr 1962. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0029558262907757>.
- [47] A. A. Belavin and A. M. Polyakov. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 22:245, nov 1975. http://jetpletters.ru/ps/1529/article_23383.shtml.
- [48] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet. *Science*, 323(5916):915, feb 2009. <https://www.science.org/lookup/doi/10.1126/science.1166767>.
- [49] Niklas Romming, Christian Hanneken, Matthias Menzel, Jessica E. Bickel, Boris Wolter, Kirsten von Bergmann, André Kubetzka, and Roland Wiesendanger. Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions. *Science*, 341(6146):636–639, aug 2013. <https://www.science.org/lookup/doi/10.1126/science.1240573>.
- [50] Albert Fert, Vincent Cros, and João Sampaio. Skyrmions on the track. *Nature Nanotechnology*, 8(3):152–156, March 2013. <https://www.nature.com/articles/nnano.2013.29>.

- [51] M. Kardar. *Statistical Physics of Fields*. Cambridge University Press, 2007. <https://doi.org/10.1017/CB09780511815881>.
- [52] H.E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, 1987. https://books.google.com.br/books?id=XK_vAAAAMAAJ.
- [53] Michel Le Bellac, Fabrice Mortessagne, and G. George Batrouni. *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, 2004. <https://doi.org/10.1017/CB09780511606571>.
- [54] J. Zinn-Justin. *Phase Transitions and Renormalization Group*. Oxford Graduate Texts. OUP Oxford, 2007. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199227198.001.0001>.
- [55] C. N. Yang and T. D. Lee. Statistical theory of equations of state and phase transitions. i. theory of condensation. *Phys. Rev.*, 87:404–409, Aug 1952. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.404>.
- [56] T. D. Lee and C. N. Yang. Statistical theory of equations of state and phase transitions. ii. lattice gas and ising model. *Phys. Rev.*, 87:410–419, Aug 1952. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.410>.
- [57] Michael E. Fisher. *THE NATURE OF CRITICAL POINTS*, volume 1. University of Colorado Press, 1965. http://personal.rhul.ac.uk/UHAP/027/PH4211/PH4211_files/Fisher-1965.pdf.
- [58] V. L. Berezinskiĭ. Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems having a Continuous Symmetry Group I. Classical Systems. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 32:493, Jan 1971. <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index/e/32/3/p493?a=list>.
- [59] V. L. Berezinskiĭ. Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems Possessing a Continuous Symmetry Group. II. Quantum Systems. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 34:610, Jan 1972. <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index/e/34/3/p610?a=list>.
- [60] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181–1203, apr 1973. <https://doi.org/10.1088%2F0022-3719%2F6%2F7%2F010>.
- [61] Sadamichi Maekawa. *Concepts in Spin Electronics*. Series on Semiconductor Science and Technology. Oxford University Press, 2006. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198568216.001.0001>.
- [62] M. Julliere. Tunneling between ferromagnetic films. *Physics Letters A*, 54(3):225–226, 1975. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(75\)90174-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(75)90174-7).
- [63] Mark Johnson and R. H. Silsbee. Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1790–1793, Oct 1985. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.55.1790>.

- [64] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2472–2475, Nov 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2472>.
- [65] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Phys. Rev. B*, 39:4828–4830, Mar 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.4828>.
- [66] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, 76:323–410, Apr 2004. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>.
- [67] Mamoru Matsuo, Junichi Ieda, and Sadamichi Maekawa. Mechanical generation of spin current. *Frontiers in Physics*, 3:54, 2015. <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fphy.2015.00054>.
- [68] Jairo Sinova, Sergio O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth. Spin hall effects. *Rev. Mod. Phys.*, 87(4):1213–1260, Oct 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.87.1213>.
- [69] David Awschalom and Nitin Samarth. Spintronics without magnetism. *Physics*, 2(50), 2009. <http://link.aps.org/doi/10.1103/Physics.2.50>.
- [70] Sakimura Hiroto, Tashiro Takaharu, and Ando Kazuya. Nonlinear spin-current enhancement enabled by spin-damping tuning. *Nature Communications*, 5, dec 2014. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms673010.1038/ncomms6730>.
- [71] S. Takahashi, E. Saitoh, and S. Maekawa. Spin current through a normal-metal/insulating-ferromagnet junction. *Journal of Physics: Conference Series*, 200(6):062030, 2010. <http://stacks.iop.org/1742-6596/200/i=6/a=062030>.
- [72] Satoshi Okamoto. Spin injection and spin transport in paramagnetic insulators. *Physical Review B*, 93:064421, Feb 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.064421>.
- [73] Matthias B. Jungfleisch, Wei Zhang, and Axel Hoffmann. Perspectives of antiferromagnetic spintronics. *Physics Letters A*, 382(13):865 – 871, 2018. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960118300343>.
- [74] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak. Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 90(1):015005, Feb 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.90.015005>.
- [75] Dali Sun and Et.al. Spintronic detection of interfacial magnetic switching in a paramagnetic thin film of tris(8-hydroxyquinoline)iron(iii). *Phys. Rev. B*, 95(5):054423, Feb 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.054423>.
- [76] Yaroslav Tserkovnyak, Arne Brataas, and Gerrit E. W. Bauer. Spin pumping and magnetization dynamics in metallic multilayers. *Phys. Rev. B*, 66(22):224403, Dec 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.224403>.

- [77] K. Hirakawa, H. Yoshizawa, and K. Ubukoshi. Neutron Scattering Study of the Phase Transition in Two-Dimensional Planar Ferromagnet K_2CuF_4 . *Journal of the Physical Society of Japan*, 51:2151, July 1982. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1982JPSJ...51.2151H>.
- [78] K. Hirakawa. Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional planar ferromagnet K_2CuF_4 (invited). *Journal of Applied Physics*, 53:1893–1898, March 1982. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1982JAP...53.1893H>.
- [79] V. Yu. Irkhin and A. A. Katanin. Kosterlitz-thouless and magnetic transition temperatures in layered magnets with a weak easy-plane anisotropy. *Phys. Rev. B*, 60(5):2990–2993, Aug 1999. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.2990>.
- [80] B. Sachs, T. O. Wehling, K. S. Novoselov, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson. Ferromagnetic two-dimensional crystals: Single layers of k_2cuf_4 . *Phys. Rev. B*, 88(20):201402, Nov 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.201402>.
- [81] Assa Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer-Verlag New York, 1 edition, 1994. <https://www.springer.com/1a/book/9780387942865>.
- [82] J. Villain. Quantum theory of one- and two-dimensional ferro- and antiferromagnets with an easy magnetization plane . i. ideal 1-d or 2-d lattices without in-plane anisotropy. *J. Phys. France*, 35(1):27–47, 1974. <https://doi.org/10.1051/jphys:0197400350102700>.
- [83] C. Zener. Interaction between the d shells in the transition metals. *Phys. Rev.*, 81(3):440–444, Feb 1951. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.81.440>.
- [84] J. Kondo. Theory of dilute magnetic alloys. *Solid State Physics*, 23:183 – 281, 1970. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0081194708606165>.
- [85] Kazuya Ando. A new degree of control for spintronics. March 2015. <https://bit.ly/2JYKi7y>.
- [86] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, and M.E. Gouêa. Spin-wave scattering by vortices in a two-dimensional easy-plane ferromagnetic model. *Solid State Communications*, 86(3):187 – 189, 1993. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003810989390899X>.
- [87] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, and M.E. Gouvêa. Spin-wave scattering by solitons in a two-dimensional easy-axis ferromagnetic model. *Physics Letters A*, 176(3):279 – 283, 1993. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960193910516>.
- [88] Samir Garzon, Igor Žutić, and Richard A. Webb. Temperature-dependent asymmetry of the nonlocal spin-injection resistance: Evidence for spin nonconserving interface scattering. *Phys. Rev. Lett.*, 94:176601, May 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.176601>.

- [89] Junxue Li, Yadong Xu, Mohammed Aldosary, Chi Tang, Zhisheng Lin, Shufeng Zhang, Roger Lake, and Jing Shi. Observation of magnon-mediated current drag in Pt/yttrium iron garnet/Pt(Ta) trilayers. *Nature Communications*, 7:10858, March 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms10858>.
- [90] A.R. Moura. Phase transitions and order-by-quantum disorder for the antiferromagnetic xy model in the checkerboard lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 394(22):60 – 66, 2015. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488531530250X>.
- [91] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
- [92] David P. Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2009.
- [93] Ulli Wolff. Collective monte carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, 62:361–364, 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>.
- [94] Takao Ohta and David Jasnow. Xy model and the superfluid density in two dimensions. *Physical Review B*, 20(1):139–146, Jul 1979. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.139>.
- [95] D. H. Lee, J. D. Joannopoulos, J. W. Negele, and D. P. Landau. Symmetry analysis and monte carlo study of a frustrated antiferromagnetic planar xy model in two dimensions. *Physical Review B*, 33(1):450–475, Jan 1986. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.33.450>.
- [96] David R. Nelson and J. M. Kosterlitz. Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Physical Review Letters*, 39(19):1201–1205, Nov 1977. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.39.1201>.
- [97] S. T. Bramwell and P. C. W. Holdsworth. Magnetization: A characteristic of the kosterlitz-thouless-berezinskii transition. *Physical Review B*, 49(13):8811–8814, Apr 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.8811>.
- [98] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*. North-Holland personal library. North-Holland Publishing Company, 1982. <https://books.google.com.br/books?id=1XucQgAACAAJ>.
- [99] Motohiko Ezawa. Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films. *Phys. Rev. B*, 83:100408, Mar 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.100408>.
- [100] R. L. Silva, L. D. Secchin, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, and R. L. Stamps. Emergence of skyrmion lattices and bimerons in chiral magnetic thin films with nonmagnetic impurities. *Phys. Rev. B*, 89:054434, Feb 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.054434>.

- [101] Shinichiro Seki and Masahito Mochizuki. *Skyrmions in Magnetic Materials*, volume 1. Springer International Publishing, 2016. <https://www.springer.com/gp/book/9783319246499>.
- [102] X. Z. Yu, W. Koshibae, Y. Tokunaga, K. Shibata, Y. Taguchi, N. Nagaosa, and Y. Tokura. Transformation between meron and skyrmion topological spin textures in a chiral magnet. *Nature*, 564(7734):95–98, dec 2018. <https://www.nature.com/articles/s41586-018-0745-3>.
- [103] Liufei Cai, Eugene M. Chudnovsky, and D. A. Garanin. Collapse of skyrmions in two-dimensional ferromagnets and antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 86:024429, Jul 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.024429>.
- [104] M.A. Amaral, R.L. Silva, A.R. Pereira, and W.A. Moura-Melo. Discrete double core skyrmions in magnetic thin films. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321(19):3360–3363, 2009. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885309006489>.
- [105] M. Krech, Alex Bunker, and D.P. Landau. Fast spin dynamics algorithms for classical spin systems. *Computer Physics Communications*, 111(1):1–13, 1998. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465598000095>.
- [106] R. Burden and J. Faires. *Numerical Analysis*. Cengage Learning, 2004. <https://books.google.com.br/books?id=wmcL0y2avuUC>.
- [107] A.R. Moura and R.J.C. Lopes. On coherent states and the self-consistent harmonic approximation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 472:1–6, 2019. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885318327379>.
- [108] R.J.C. Lopes, R.C. Silva, R.L. Silva, W.A. Moura-Melo, and A.R. Pereira. Antiferromagnetic-vortex dynamics driven by spin-polarized current in small thin disks. *Physics Letters A*, 384(18):126376, 2020. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596012030195X>.
- [109] A. S. Araújo, R. J. C. Lopes, V. L. Carvalho-Santos, A. R. Pereira, R. L. Silva, R. C. Silva, and D. Altbir. Typical skyrmions versus bimerons: A long-distance competition in ferromagnetic racetracks. *Phys. Rev. B*, 102:104409, Sep 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.104409>.
- [110] Neeti Keswani, Ricardo J. C. Lopes, Yoshikata Nakajima, Ranveer Singh, Neha Chauhan, Tapobrata Som, D. Sakthi Kumar, Afranio R. Pereira, and Pintu Das. Controlled creation and annihilation of isolated robust emergent magnetic monopole like charged vertices in square artificial spin ice. *Scientific Reports*, 11:13593, jan 2021. <https://www.nature.com/articles/s41598-021-92877-7>.
- [111] Cristiano Nisoli. Topological order of the rydberg f-model and its breakdown in realistic square spin ice: Topological sectors of faraday loops. *EPL - Europhysics Letters*, 132(4):47005, jan 2021. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/132/47005>.
- [112] Yoichi Kazama, Chen Ning Yang, and Alfred S. Goldhaber. Scattering of a dirac particle with charge ze by a fixed magnetic monopole. *Phys. Rev. D*, 15:2287–2299, Apr 1977. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.15.2287>.