

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA**

**Novas aplicações do método de aproximação harmônica auto-consistente**

Gabriel de Carvalho Villela  
*Doctor Scientiae*

**VIÇOSA - MINAS GERAIS**  
**2026**

**GABRIEL DE CARVALHO VILLELA**

**Novas aplicações do método de aproximação harmônica auto-consistente**

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: Antonio Ribeiro de Moura

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2026**

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

T

V735n  
2026  
Villela, Gabriel de Carvalho, 1997-  
Novas aplicações do método de aproximação harmônica  
auto-consistente / Gabriel de Carvalho Villela. – Viçosa, MG,  
2026.

1 tese eletrônica (106 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa,  
Departamento de Física, 2026.

Referências bibliográficas: f. 93-99.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2026.372>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Spintrônica. 2. Antiferromagnetismo. I. Moura, Antonio  
Ribeiro de, 1984-. II. Universidade Federal de Viçosa.  
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.  
III. Título.

CDD 22. ed. 539.725

**GABRIEL DE CARVALHO VILLELA**

**Novas aplicações do método de aproximação harmônica auto-consistente**

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: 24 de abril de 2026.

Assentimento:

---

Gabriel de Carvalho Villela  
Autor

---

Antonio Ribeiro de Moura  
Orientador

Essa tese foi assinada digitalmente pelo autor em 16/06/2026 às 21:03:25 e pelo orientador em 17/06/2026 às 08:00:42. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **EGES.4QEE.TP66** e clique no botão 'Validar documento'.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por ter me dado forças para prosseguir nessa árdua jornada e por ter me abençoado com a companhia de pessoas maravilhosas ao longo de toda essa etapa. Minha jornada acadêmica não teria sido possível sem todo o apoio e suporte que recebi ao longo desses anos. Palavra alguma será capaz de expressar toda a gratidão que sinto por cada pessoa que será citada aqui, direta ou indiretamente.

Agradeço à minha esposa, Giulie, que me apoiou durante todo esse tempo, enfrentando a distância e a saudade ao longo de quatro longos anos. Você é a minha inspiração para me tornar alguém melhor a cada dia, e seu carinho e companheirismo são meu afago nos dias difíceis.

Aos meus pais, Daniel e Michele, que me educaram e deram todo o suporte para que eu pudesse me dedicar aos estudos. À todos os meus familiares que, junto com meus pais, comemoraram minhas conquistas e contribuíram para que eu me tornasse o homem que sou hoje. Se cheguei até aqui, foi graças a todos vocês.

Aos meus amigos de longa data, que me fizeram companhia virtual, especialmente durante meu primeiro ano longe de casa, tornando meus dias menos solitários.

Ao meu orientador, Antônio Ribeiro de Moura, sem o qual este trabalho não teria sido possível. Cheguei a Viçosa, em 2022, sem saber como realizar uma pesquisa, mas sua orientação e seus ensinamentos me tornaram o pesquisador que sou hoje. Obrigado pela confiança e pela paciência ao longo dessa etapa.

Aos amigos que fiz em Viçosa, que tornaram esses anos de trabalho alguns dos melhores da minha vida. O companheirismo e o carinho que compartilhamos tornaram os dias mais leves, o estresse do trabalho mais suportável e as datas festivas longe da família mais alegres. Hoje guardo cada um de vocês com imenso carinho. Faço um agradecimento especial a Emilio, Hugo, João, Juliane, Kelly, Lâna, Pedro, Rebecca, Robson e Thainá.

À Universidade Federal de Viçosa (UFV) e ao Departamento de Física (DPF), por terem fornecido a infraestrutura e a oportunidade de realizar este trabalho. Em especial, aos professores que me permitiram ingressar no programa de pós-graduação e que participaram, de alguma forma, da minha formação como pesquisador.

Este trabalho foi realizado com o apoio das seguintes agências de pesquisa brasileiras: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

"Such a tiny universe, there's nowhere left to hide.  
And I worry, does the cosmos see what I hold inside?"

All Directions - Rival Sons

## RESUMO

VILLELA, Gabriel de Carvalho, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, abril de 2026.  
**Novas aplicações do método de aproximação harmônica auto-consistente.**  
Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.

A concepção de novas possibilidades tecnológicas nos levou à spintrônica, uma proposta que visa à exploração do grau de liberdade de spin para o transporte de informação. Essa ideia fundamenta uma área de pesquisa em constante expansão que visa explorar sistemas e fenômenos relevantes para dispositivos à base de spin. Nesse trabalho, visamos colaborar para a base teórica dessa área utilizando o método da aproximação harmônica auto-consistente (AHAC). A AHAC foi proposta inicialmente como uma abordagem teórica para o estudo de transições de fase em sistemas magnéticos, porém, recentemente, se mostrou um método eficiente para estudos teóricos de spintrônica em materiais ferromagnéticos (FM). Buscando novas aplicações para a AHAC, exploramos principalmente materiais antiferromagnéticos (AFM), cuja alta frequência de excitação de seus spins e sua baixa sensibilidade a perturbações magnéticas externas os tornam de grande interesse para a spintrônica. Com o intuito de aperfeiçoar o método para sistemas quânticos, apresentamos uma construção puramente quântica para a AHAC utilizando o formalismo de integrais de caminho. Em sistemas AFM, utilizamos a AHAC e o formalismo de estados coerentes para analisarmos o fenômeno de ressonância antiferromagnética. Os resultados obtidos também possibilitaram o estudo de correntes de spin em bicamadas com materiais AFM. Exploramos também excitações de ondas de spin nucleares, motivados pela observação recente de correntes de spin nucleares. Os resultados obtidos demonstram a eficiência da AHAC como método teórico para a exploração de sistemas magnéticos e spintrônica.

Palavras-chave: spintrônica; renormalização; antiferromagnetismo; estados coerentes

## ABSTRACT

VILLELA, Gabriel de Carvalho, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April, 2026.  
**New applications of the self-consistent harmonic approximation method.**  
Adviser: Antonio Ribeiro de Moura.

The conception of new technological possibilities has led us to spintronics, a proposal that aims to exploit the spin degree of freedom as to information transport. This idea establishes a rapidly growing research field focused on exploring relevant systems and phenomena to spin-based devices. In this work, we seek to contribute to the theoretical groundwork of this field by employing the self-consistent harmonic approximation (SCHA). The SCHA was initially proposed as a theoretical approach for studying phase transitions in magnetic systems, however, it has recently proven to be an efficient method for theoretical studies of spintronics in ferromagnetic materials (FM). In search of new applications for the SCHA, we focus to investigate antiferromagnetic materials (AFM), whose high spin excitation frequencies and low sensitivity to external magnetic perturbations make them highly attractive for spintronics. In order to improve the method to quantum systems, we present a fully quantum construction of the SCHA using the path integral formalism. In AFM systems, we employ the SCHA combined with the coherent state formalism to analyze the antiferromagnetic resonance phenomena. The results obtained also enable the study of spin currents in bilayers with AFM materials. We further explore nuclear spin wave excitations, motivated by the recent observation of nuclear spin currents. The obtained results demonstrate the effectiveness of the SCHA as a theoretical method for investigating magnetic systems and spintronics.

Keywords: spintronics; renormalization; antiferromagnetism; coherent states

# Sumário

<b>I</b>	<b>Introdução e motivação</b>	<b>9</b>
<b>II</b>	<b>Fundamentação teórica</b>	<b>13</b>
2.1	Aproximação harmônica auto-consistente . . . . .	16
2.2	Estados coerentes . . . . .	18
<b>III</b>	<b>Aproximação harmônica auto-consistente quântica</b>	<b>22</b>
3.1	Modelo teórico . . . . .	22
3.2	Parâmetro de renormalização . . . . .	24
3.2.1	Formalismo dos estados coerentes de spin . . . . .	25
3.2.2	Valores esperados . . . . .	28
3.2.3	Equação auto-consistente . . . . .	32
3.3	Resultados . . . . .	33
3.4	Conclusões . . . . .	39
<b>IV</b>	<b>Ressonância antiferromagnética</b>	<b>41</b>
4.1	Aproximação harmônica auto-consistente . . . . .	43
4.1.1	Abordagem semiclássica . . . . .	43
4.1.2	Abordagem quântica . . . . .	46
4.1.3	Parâmetro de renormalização . . . . .	49
4.2	Estados coerentes . . . . .	51
4.2.1	Nível de coerência, dinâmica de precessão e susceptibilidades . . . . .	55
4.3	Conclusões . . . . .	58
<b>V</b>	<b>Mágnons nucleares</b>	<b>60</b>
5.1	Modelo teórico . . . . .	61
5.2	Aproximação harmônica auto-consistente . . . . .	62
5.2.1	Abordagem semiclássica . . . . .	63
5.2.2	Abordagem quântica . . . . .	65
5.2.3	Parâmetro de renormalização . . . . .	70
5.3	Estados coerentes . . . . .	73
5.3.1	Sistemas FM . . . . .	75
5.3.2	Sistemas AFM . . . . .	76

5.3.3	Formalismo de Holstein-Primakoff . . . . .	78
5.4	Conclusões . . . . .	80
<b>VI</b>	<b>Correntes de spin em antiferromagnetos</b>	<b>81</b>
6.1	Spin-Transfer Torque . . . . .	83
6.1.1	Fase AF . . . . .	84
6.1.2	Fase SF . . . . .	85
6.2	Spin Pumping . . . . .	85
6.2.1	Fase AF . . . . .	86
6.2.2	Fase SF . . . . .	86
6.3	Correntes de spin nucleares . . . . .	87
6.4	Próximas etapas . . . . .	88
<b>VII</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>90</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>93</b>
<b>A</b>	<b>Valores médios de campos não-interagentes</b>	<b>100</b>
<b>B</b>	<b>Interação de Suhl-Nakamura</b>	<b>102</b>
<b>C</b>	<b>Artigos Publicados</b>	<b>104</b>
C.1	Unveiling antiferromagnetic resonance: A comprehensive analysis via the self-consistent harmonic approximation . . . . .	105
C.2	The quantum self-consistent harmonic approximation: A unified framework for quantum spin systems . . . . .	106

# Capítulo I

## Introdução e motivação

A tecnologia, desde quando concebida, está em constante renovação. Toda revolução tecnológica está fadada a ser ultrapassada em algum momento. Por vezes, a tecnologia existente não se dispõe mais a acompanhar as necessidades da sociedade em evolução e essa renovação se faz necessária. Nesse caso, cabe à ciência buscar novas formas de satisfazer os anseios da sociedade atual e futura por novos dispositivos. A eletrônica, considerada a base tecnológica atual, vem encontrado dificuldades para progredir, pois a miniaturização de seus componentes chegou em um nível no qual os efeitos quânticos não podem mais ser desprezados. Com a descoberta da magnetorresistência gigante, em 1988, surgiu a ideia de explorar o spin do elétron, um grau de liberdade de origem puramente quântica que até então era ignorado. Desta ideia se originou o que chamamos hoje de spintrônica, uma nova proposta de tecnologia que visa alcançar a utilização desses graus de liberdade em sistemas de estado sólido. Nos dias atuais, já utilizamos algumas tecnologias à base de spin (por exemplo, nos HDs e MRAMs) e existem propostas de dispositivos de computação quântica com base na spintrônica, visando a superação dos limites existentes na eletrônica [1–5].

Na spintrônica, além do transporte de cargas elétricas, o transporte de informação também pode ser mediado por correntes de spin, no qual ocorre um transporte efetivo do momento angular de spin. Esta corrente pode ser observada tanto em materiais condutores quanto em materiais isolantes. Nos condutores, esta corrente consiste em uma corrente elétrica spin-polarizada, na qual existe uma diferença na densidade de elétrons *up* e *down* [6, 7]. Já os materiais magnéticos isolantes apresentam outras características interessantes, devido à alta correlação de seus spins dispostos de forma localizada em sua rede cristalina. Nesses materiais, observamos interações magnéticas de origem quântica, que resultam em certos ordenamentos magnéticos espontâneos. Esse configura o caso de materiais ferromagnéticos (FM) e antiferromagnéticos (AFM), ou até mesmo em transições de fase quânticas. Em redes ordenadas podemos observar o surgimento de excitações coletivas e não-localizadas nos spins da rede, que transportam momento angular de spin [8]. Estas perturbações podem se propagar no sistema por meio de ondas de spin, cujos quanta são chamados de mágnons, ou por spinons, que são perturbações exóticas observadas

principalmente em sistemas de baixa dimensionalidade [9, 10]. Estas excitações somente envolvem os graus de liberdade de spin dos elétrons do sistema, logo, são consideradas correntes puras de spin. Focando nas ondas de spin, vemos diversas características interessantes para possíveis aplicações tecnológicas, como uma baixa dissipação, uma maior possibilidade de controle de suas propriedades, um baixo consumo energético, entre outras [11–15]. A ideia de explorar as ondas de spin para o desenvolvimento de novas tecnologias deu origem à magnônica, um ramo da spintrônica que visa produzir, entender e manipular estas excitações.

Nosso trabalho busca explorar uma nova formulação teórica para estudar spintrônica, em especial os fenômenos observados na magnônica de antiferromagnetos (AFM). Essa escolha se dá pelas possibilidades que esses materiais agregam na concepção de novos dispositivos spintrônicos. Sistemas AFM exibem baixa susceptibilidade e magnetização macroscópica desprezível, o que os torna praticamente insensíveis a perturbações magnéticas externas. Além disso, as ondas de spin geradas nestes materiais podem atingir frequências da ordem de THz, enquanto os materiais ferromagnéticos (FM), que são os mais explorados na spintrônica, exibem frequências da ordem de GHz. Esta alta frequência se mostra extremamente interessante para a construção de tecnologias de informação mais rápidas e eficientes. Desta forma, torna-se natural considerarmos a magnônica de antiferromagnetos uma opção promissora para o desenvolvimento da spintrônica [16, 17].

No estudo de spintrônica, dois fenômenos a que devemos nos atentar são os processos de *Spin-Transfer Torque* (STT) e de *Spin Pumping* (SP), que possibilitam a injeção e a detecção de correntes de spin em multicamadas magnéticas. Vamos considerar uma junção composta de uma camada de material magnético (MM) e uma camada de material não-magnético condutor (MN). Ambos os fenômenos podem ser entendidos por meio de um processo de espalhamento, representado na figura 1.1, que ocorre devido à interação entre os sítios do MM presentes na interface e os elétrons livres do MN. Nos dois casos, os elétrons livres sofrem um espalhamento com inversão de spin (*spin-flip*) na interface, emitindo ou absorvendo mágnons do MM. A diferença entre eles se dá pelo mecanismo que fomenta esse espalhamento e o sentido da corrente de spin induzida. No STT, um acúmulo de elétrons no MN, devido ao desbalanceio no potencial químico de spins (mais spins *up* do que *down*, ou vice versa), gera excitações de mágnons no MM. Já no SP vemos o processo contrário, no qual os mágnons excitados no MM transferem momento para o MN, gerando uma corrente de spin. Neste processo, vamos considerar uma excitação de mágnons por meio de um campo oscilante, na qual usualmente consideramos a aplicação de um campo estático no MM que nos permite regular a frequência dos mágnons para coincidir com a frequência de oscilação desse campo, resultando em um processo de ressonância [18–20]. Outro fenômeno amplamente explorado na spintrônica para gerar estas correntes de spin é por meio do efeito *Spin Seebeck* (ESS). Este efeito é um análogo ao efeito *Seebeck*, descoberto por T. J. Seebeck em 1821, no qual surge uma diferença de potencial em

um metal (ou semicondutor) devido a um gradiente de temperatura. No ESS, de forma semelhante, uma “voltagem de spin” surge como resultado de um gradiente de temperatura no sistema [6, 14, 21–23].

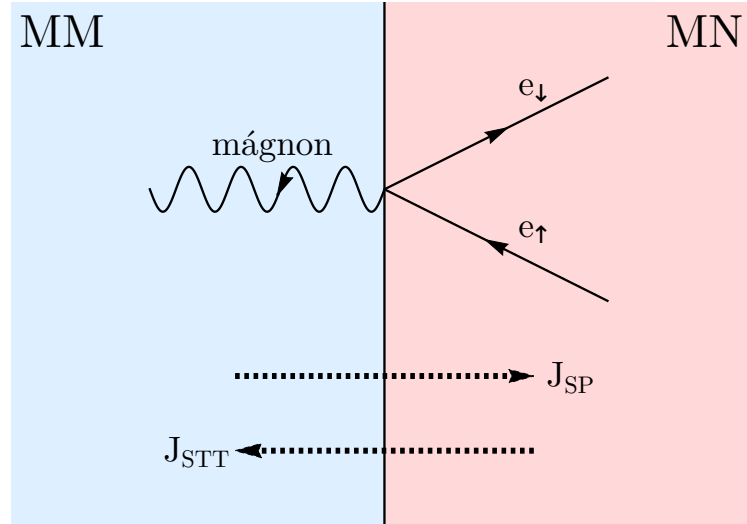


Figura 1.1: Representação gráfica do processo de espalhamento que ocorre nos processos de *Spin Pumping* e Spin-Transfer Torque. Nesta figura, vemos um elétron *up* sofrendo um *spin-flip* na interface e emitindo um magnon no MM. A corrente de spin  $J_{SP}$  vai surgir quando este processo ocorrer por meio de um acúmulo de magnons no MM, e a corrente  $J_{STT}$  vai surgir quando este processo ocorrer por meio de um acúmulo de elétrons no MN.

Todos os processos descritos visam a produção e manipulação dos spins dos elétrons da rede, mas certos materiais também podem exibir grau de liberdade de spin associado ao seu núcleo atômico. Esses spins nucleares também podem ser induzidos a uma precessão por meio de um processo de ressonância, como foi demonstrado pela primeira vez em 1938 por I. I. Rabi [24]. A interação entre os spins nucleares da rede se dá de forma indireta, mediada pela interação hiperfina entre o spin nuclear e o spin eletrônico do átomo, como proposto por H. Suhl [25] e T. Nakamura [26]. Em 1963, P. G. De Gennes [27] mostrou que, devido à interação de Heisenberg entre os spins eletrônicos da rede, a interação de Suhl-Nakamura possibilita uma excitação coletiva dos spins nucleares da rede. Recentemente, foram observados os efeitos SP [28, 29] e *Spin Seebeck* [30] para essas ondas de spin nucleares, o que possibilita a exploração dessas excitações para aplicações em dispositivos spintrônicos e na computação quântica [31–33].

Existem diversos formalismos que possibilitam a descrição teórica de sistemas magnéticos. A representação de Holstein-Primakoff (HP) tem sido utilizada como método usual para descrever com sucesso uma gama de fenômenos envolvendo magnons. Porém, quando as interações entre magnons são relevantes, como em estudos termodinâmicos próximos da temperatura de transição, precisamos incluir termos de ordem superior neste formalismo, agregando a interação entre magnons, porém complicando seu desenvolvimento. Visando um estudo completo dos tópicos mencionados, adotamos o formalismo chamado aproxima-

ção harmônica auto-consistente (AHAC). A AHAC consiste em um método quadrático simples, no qual são implementadas correções por meio de um parâmetro de renormalização dependente da temperatura, agregando em si possíveis correções de ordem superior. Esta característica possibilita o estudo da termodinâmica do sistema de forma mais simples se comparado com a representação de HP, pois as correções necessárias para incluirmos as interações entre mágnons estão sendo consideradas na renormalização, sem a necessidade de incluirmos esses termos em nosso desenvolvimento. Posteriormente, iremos mostrar que esta abordagem também se mostra uma escolha natural para estudar o fenômeno de ressonância magnética. Este formalismo foi proposto para estudar transições de fase topológicas em sistemas magnéticos [34], mas recentemente se mostrou promissor para estudar spintrônica [35–38].

Apesar de ser possível desenvolvermos a AHAC por meio de uma abordagem quântica, tradicionalmente adotamos em algum momento uma aproximação semiclássica para o sistema de spins. Porém, como mencionado anteriormente, as principais interações magnéticas existentes em nossos sistemas de interesse são de origem quântica. Assim, a utilização dessa aproximação pode ocasionar alguma perda de informação sobre os efeitos quânticos existentes, cuja exploração pode ser fundamental para o desenvolvimento e entendimento da spintrônica [2, 19]. As abordagens teóricas usualmente utilizadas que agregam essa característica quântica do sistema, possuem as limitações que já foram apresentadas quanto à incorporação de efeitos térmicos. Assim, observamos que seria interessante reescrevermos a forma como a abordagem quântica da AHAC é feita, a fim de construirmos um modelo teórico que possibilite uma descrição quântica do sistema, agregando correções térmicas de forma simplificada, por meio de um parâmetro de renormalização. Essa nova construção é feita de forma puramente quântica, por meio do formalismo de integrais de caminho, sem a necessidade de aproximações semiclássicas.

Durante esse período de doutoramento, nos empenhamos em buscar novas aplicações para a AHAC. Para desenvolver nossa pesquisa, utilizamos a AHAC e o formalismo dos estados coerentes (EC) como principais fundamentações teóricas, que serão apresentadas com mais detalhes no capítulo II. Nos capítulos seguintes serão apresentados os trabalhos que foram desenvolvidos utilizando a AHAC. No capítulo III, apresentaremos uma demonstração compreensiva da aproximação harmônica auto-consistente quântica (AHACQ) desenvolvida com o intuito de agregar flutuações quânticas ao método da AHAC. No capítulo IV, exploraremos o fenômeno da ressonância antiferromagnética. No capítulo V, aplicaremos nosso método para estudar mágnons nucleares, os quanta de ondas de spin nucleares. No capítulo VI, iremos utilizar os resultados obtidos nos capítulos anteriores para investigar os fenômenos de STT e SP em bicamadas envolvendo AFM. Por fim, no capítulo VII serão apresentadas as considerações finais sobre a pesquisa desenvolvida.

## Capítulo II

### Fundamentação teórica

As ondas de spin podem ser entendidas olhando para o comportamento dos spins do sistema na presença de um campo magnético. Estes materiais costumam exibir ordenamento magnético, ou seja, seus spins tendem a se alinhar em um certo eixo, chamado eixo de magnetização. Este alinhamento se dá devido à interação existente entre spins vizinhos, chamada interação de troca (ou de Heisenberg) [8]. Do ponto de vista semiclássico, a presença do campo magnético induz os spins do sistema a realizarem um movimento de precessão em torno do eixo de magnetização. Se, por exemplo, considerarmos que apenas uma pequena parte dos spins do material é perturbada pelo campo, a interação que existe entre os spins vai induzir esta perturbação em todo o sistema (figura 2.1). Estas excitações coletivas são denominadas ondas de spin. No contexto quântico, vemos que estas excitações também são não-localizadas e quantizadas, ou seja, se propagam pelo sistema por meio de “pacotes” (*quanta*), chamados mágnons. O conceito de onda de spin foi introduzido por F. Bloch em 1930 [39], e desenvolvido posteriormente nos trabalhos de T. Holstein, H. Primakoff [40] e F. J. Dyson [41], que predisseram os mágnons como quasipartículas bosônicas pouco interagentes. Mais detalhes sobre estes conceitos podem ser encontrados nas referências [6, 14].

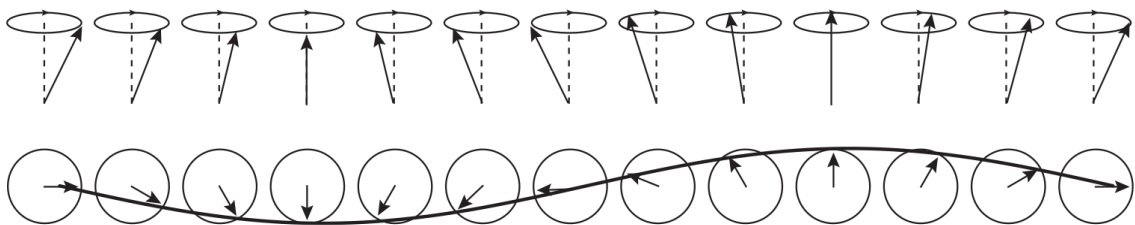


Figura 2.1: Representação de uma onda de spin em uma cadeia linear de spins vista lateralmente (figura de cima) e vista de cima (figura de baixo) [6].

Uma parte crucial do nosso trabalho consiste no estudo teórico das excitações de ondas de spin nos MM. Usualmente, este estudo é feito adotando uma representação bosônica que reescreve os operadores de spin em termos de operadores de criação e aniquilação, a

fim de obter uma hamiltoniana quadrática, semelhante ao oscilador harmônico quântico,

$$H_0 = \sum_q \epsilon_q \left( a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \right), \quad (2.1)$$

onde os estados excitados representam os mágnons. Como mencionado anteriormente, existem alguns formalismos bem difundidos, como a representação usual de HP, a representação de Dyson-Maleev (DM) e de Schwinger, cada uma com suas vantagens e desvantagens. No caso do formalismo de HP, a principal desvantagem está no procedimento para incluir estudos termodinâmicos mais precisos, como já foi apresentado. A representação de DM possibilita um tratamento mais simples desses sistemas, se comparado com HP, porém resultando em uma hamiltoniana não hermitiana<sup>1</sup>. No quesito maior gama de aplicações e precisão, o formalismo de Schwinger se destaca, sendo aplicável a qualquer estado fundamental, ordenado ou não-ordenado. Apesar disso, esse formalismo apresenta maior complexidade em seu desenvolvimento, se comparado com os demais [42]. Na nossa pesquisa, escolhemos utilizar uma representação menos convencional chamada aproximação harmônica auto-consistente (AHAC), na qual reescrevemos a hamiltoniana do sistema em termos da componente do spin na direção  $z$ ,  $S^z$ , e do ângulo canonicamente conjugado,  $\varphi$ .

A escolha da AHAC se mostra natural quando buscamos estudar a precessão dos spins, principalmente quando esta dinâmica é induzida por um processo de ressonância. Neste processo são aplicados dois campos magnéticos no MM: um estático, que visa garantir o alinhamento dos spins na direção de magnetização; e um oscilante, que induz o movimento de precessão (excita mágnons). Como a frequência dos mágnons depende da intensidade do campo estático aplicado, é possível ajustar este campo para que esta frequência seja igual à do campo oscilante, atingindo assim a condição de ressonância. Quando isto ocorre, os spins passam a exibir uma dinâmica em fase, exibindo uma dinâmica síncrona. A ressonância é descrita por meio do formalismo de estados coerentes (EC), proposto para mágnons por S. M. Rezende e N. Zagury [43,44]. Estes estados são os estados que exibem a menor incerteza, por isso são considerados os estados quânticos mais próximos da física clássica [45]. Por exemplo, para uma partícula em um potencial harmônico representada por um EC, observamos que sua posição,  $x$ , e seu momento,  $p$ , respeitam a relação de incerteza  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ , enquanto a função de onda descreve um pacote de onda não-dispersivo que se move harmonicamente ao redor do mínimo do potencial. Na ressonância, os spins do MM exibem um comportamento semiclássico similar a este quando reescrevemos o campo de spins do sistema em termos dos campos  $\varphi$  e  $S^z$ . A dinâmica destes campos pode ser entendida por meio de uma analogia com um momento angular clássico,  $\mathcal{S}$ , realizando um movimento de precessão em torno do eixo  $x$ , como representado na figura 2.2. Reescrevendo este vetor momento angular em coordenadas cilíndricas,

<sup>1</sup>No formalismo de DM,  $(S^+)^\dagger \neq S^-$ .

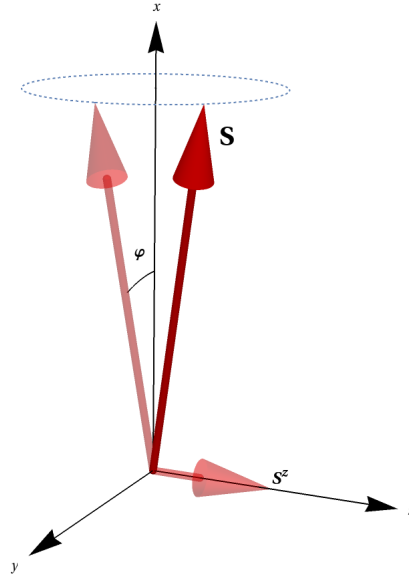


Figura 2.2: Representação do vetor momento angular  $\mathbf{S}$ .  $S^z$  representa a componente  $z$  do vetor e  $\varphi$  representa o ângulo polar.

podemos descrever sua dinâmica em termos de sua componente  $z$ , e do ângulo polar  $\varphi$ , que representa o ângulo que a projeção de  $\mathbf{S}$  no plano  $xy$  faz com o eixo  $x$ . Além disso, no caso em que  $S^x \gg S^y, S^z$ , temos  $S^y \propto \varphi$ . Assim, a dinâmica oscilatória das componentes transversais (plano  $yz$ ) passa a ser descrita por meio do movimento harmônico que  $\varphi$  e  $S^z$  exibem em torno de sua posição de equilíbrio. Olhando para o sistema como um todo, essas componentes são identificadas como campos canonicamente conjugados, ou seja, satisfazem o parêntese de Poisson  $\{\varphi_i, S_j^z\} = \delta_{ij}$ , para sítios  $i$  e  $j$  da rede. Esse sistema pode ser quantizado por meio de um processo padrão onde promovemos os campos a operadores que respeitam a relação de comutação  $[\varphi_i, S_j^z] = i\hbar \delta_{ij}^2$  e adotamos uma estatística quântica para o cálculo de valores médios. Estes operadores exibem uma relação semelhante à dos operadores  $x$  e  $p$ , em que obedecem à relação de incerteza mínima  $\Delta\varphi\Delta S^z = \hbar/2$ , semelhante ao caso da partícula no potencial harmônico, justificando o comportamento semiclássico dos spins. Assim, a AHAC se mostra uma representação mais conveniente para o estudo de ressonância em MM. Uma explicação mais detalhada sobre a AHAC e sobre os EC será dada nas seções 2.1 e 2.2, respectivamente.

<sup>2</sup>Como o operador  $\hat{S}^z$  possui um espectro de autovalores discretos  $(-S, -S+1, \dots, S-1, S)$  enquanto  $\hat{\varphi}$  terá um espectro de autovalores contínuo, definido entre  $[0, 2\pi)$ , não parece certo assumir essa relação de comutação para eles. Conforme mostrado por Judge [46, 47], esses operadores irão satisfazer a relação de comutação  $[\hat{\varphi}_i, \hat{S}_j^z] = i\hbar \delta_{ij} [1 - 2\pi\delta(\varphi_i - \pi)]$ , que se resume à relação apresentada para pequenos ângulos,  $\varphi_i \ll \pi$ .

## 2.1 Aproximação harmônica auto-consistente

A AHAC pode ser utilizada para estudar diversos sistemas magnéticos. A. S. T. Pires mostrou em diversos trabalhos que este é um bom método para se estudar transições de fase em sistemas magnéticos [48–53]. O estudo de spintrônica por meio deste método foi proposta por A. R. Moura [38], onde ele considera um processo de SP em uma interface FM/MN. Anteriormente, ele já havia proposto uma construção dos EC de um material FM utilizando a AHAC [35]. Os trabalhos de A. R. Moura mostraram que a AHAC é uma escolha adequada para estudos de fenômenos de spintrônica, obtendo bons resultados e possibilitando estudos termodinâmicos de forma mais simples que outras abordagens [54]. Nossos trabalhos visam expandir o uso da AHAC em sistemas spintrônicos.

No formalismo tradicional da AHAC podemos partir de uma análise semiclássica do sistema magnético. Como os spins podem exibir comportamento distinto para cada sítio, vamos fazer a nossa construção em termos do campo de spins do sistema. Assim, a fim de analisar a dinâmica de precessão dos spins do sistema, adotamos uma parametrização na qual reescrevemos o campo  $\mathbf{S}_i$  em termos de  $\varphi_i$  e  $S_i^z$ ,

$$S_i^x = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2} \cos \varphi_i \quad , \quad S_i^y = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2} \sin \varphi_i \quad , \quad (2.2)$$

onde o subíndice  $i$  representa o sítio da rede. Nesta construção, temos liberdade para analisar o nosso sistema utilizando uma abordagem semiclássica ou uma abordagem quântica, devido ao processo de quantização descrito anteriormente que pode ser adotado para os campos. Em ambos os casos, em algum momento adotamos  $\varphi$  e  $S^z$  como campos por meio de uma aproximação semiclássica, o que torna o procedimento da AHAC simples de se computar. Esse processo pode vir a ignorar possíveis flutuações de origem quântica, mas ainda se mostra muito efetivo para sistemas onde esses efeitos não são muito relevantes.

Para analisar a precessão dos spins, precisamos definir a direção do eixo de magnetização do sistema. Em seus trabalhos, A. S. T. Pires adotava a magnetização na direção  $z$ , mas isto não é obrigatório. Na nossa construção, escolhemos a direção  $x$  como o eixo de magnetização, como mostrado na figura 2.3. Para  $\varphi \ll 1$ , esta escolha implica  $S^x \gg S^y, S^z$  ( $S^x \approx S$ ). Veremos posteriormente que estas relações para  $\varphi$  e  $S^z$  são importantes para a obtenção de uma hamiltoniana quadrática por meio da AHAC. Com a magnetização na direção  $z$ , precisaríamos considerar  $S^z \ll 1$ , indicando uma limitação na nossa abordagem. Assim, a escolha adotada no nosso trabalho se torna mais conveniente.

A AHAC possui uma peculiaridade quando comparada com outras representações bosônicas: Quando calculamos as derivadas temporais de  $\varphi$  e  $S^z$  utilizando a hamiltoniana exata e a quadrática, obtemos o mesmo resultado para  $\dot{\varphi}$ , mas resultados diferentes para  $\dot{S}^z$ . Como  $\dot{S}^z \propto \varphi$ , podemos diminuir essa diferença por meio de um parâmetro de renormalização  $\rho$  [34], substituindo  $\varphi$  por  $\sqrt{\rho}\varphi$  na hamiltoniana quadrática. Este

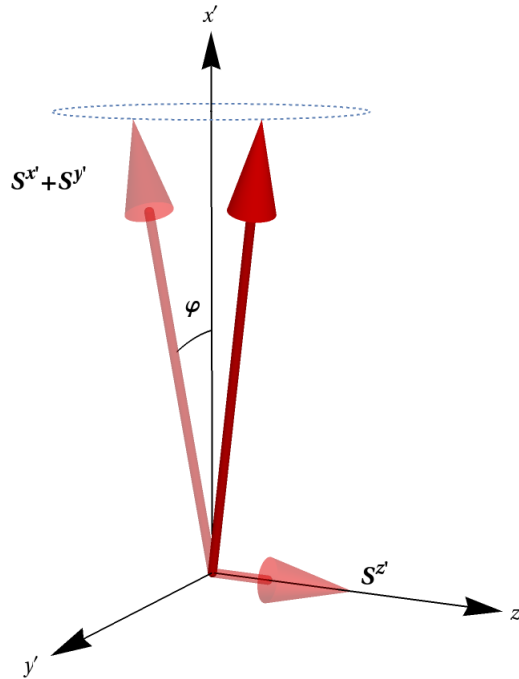


Figura 2.3: Representação dos spins utilizada na construção da AHAC.

parâmetro pode ser determinado por meio de equações auto-consistentes, obtidas através da comparação entre a média  $\langle \dot{S}_{-q}^z \dot{S}_q^z \rangle$  calculada utilizando a hamiltoniana exata e a quadrática, ou também por meio da desigualdade de Gibbs-Bogoliubov [55], que estima um limite superior para a energia livre de Helmholtz,  $F$ , associada a um sistema descrito por uma hamiltoniana  $H$ ,

$$F \leq F_0 - \langle H_0 \rangle_0 + \langle H \rangle_0, \quad (2.3)$$

onde  $H_0$  denota a hamiltoniana quadrática, utilizada para o cálculo de  $F_0$  e dos valores esperados  $\langle \dots \rangle_0$ . Na AHAC, o parâmetro  $\rho$ , incluso na hamiltoniana quadrática, é determinado com o objetivo de obtermos o valor mínimo do limite superior de  $F$ , ou seja,

$$\frac{d(F_0 - \langle H_0 \rangle_0 + \langle H \rangle_0)}{d\rho} = 0. \quad (2.4)$$

Na abordagem tradicional da AHAC, os valores esperados são calculados por meio de integrais Gaussianas simples e  $F_0 - \langle H_0 \rangle_0 \approx \sum_q k_B T (\ln \beta \epsilon_q - 1)$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura,  $\epsilon_q$  o espectro de energia do sistema (autovalores de  $H_0$ ) e  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Por exemplo, para uma hamiltoniana de Heisenberg, esse cálculo nos fornece a seguinte equação para o parâmetro de renormalização (ver [34, 54, 56]),

$$\rho = \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{S^2} \right) e^{-\frac{1}{2} \langle \Delta \varphi^2 \rangle_0}, \quad (2.5)$$

que resolvemos de forma auto-consistente, pois os valores esperados também dependem de  $\rho$ . Esse parâmetro é definido entre  $T = 0$  e  $T = T_c$ , onde ele sofre uma transição descontínua para zero, característica de uma transição de fase de primeira ordem. Porém, em sistemas magnéticos tridimensionais, o tipo de transição mais comum de ser observada é uma transição contínua, de segunda ordem, na qual o sistema passa de sua fase ordenada (FM, AFM) para uma fase desordenada (Paramagnética) quando atinge uma certa temperatura crítica. Essa análise costuma ser feita no comportamento da magnetização do sistema, mas na AHAC ela apresenta comportamento semelhante ao do parâmetro  $\rho$ . O erro na transição observada ocorre frequentemente em teorias fundamentadas em expansões harmônicas. Apesar desse ponto, a AHAC se mostra um formalismo útil para a análise de sistemas em temperaturas baixas ( $T < T_c$ ), apresentando discrepâncias apenas para temperaturas muito próximas da transição de fase, que é uma limitação observada até mesmo em formalismos mais tradicionais, como o de HP. No caso do formalismo de HP, para analisarmos o sistema em temperaturas próximas de sua temperatura crítica, precisamos incluir termos de interação entre ondas de spin no nosso desenvolvimento, a fim de renormalizar o espectro de energia das ondas de spin. Essa abordagem possibilita até uma estimativa da temperatura de transição de fase [57]. Uma das vantagens a AHAC está nesse ponto, pois ao assumirmos  $T_c$  como essa temperatura crítica do sistema, conseguimos estimar esse valor para sistemas clássicos de spin de forma mais simplificada, sem a necessidade de incluir interações de ordem superior, e com ótima concordância com os valores observados experimentalmente [54]. Para sistemas nos quais os efeitos quânticos exibem maior relevância, como os que apresentam valor de spin  $1/2$ , os resultados perdem precisão, o que nos mostra a necessidade de um tratamento mais meticuloso para esses casos, motivando assim a nossa abordagem puramente quântica para a AHAC, apresentada no capítulo III. A AHAC também nos fornece resultados dependentes da temperatura devido à inclusão do parâmetro de renormalização, permitindo análises do comportamento térmico do sistema de forma mais simples que as abordagens usuais.

## 2.2 Estados coerentes

Como mencionado anteriormente, um estado coerente (EC) é o estado quântico mais próximo da física clássica. Esta ideia surgiu dos trabalhos de E. Schrödinger de 1926, no início da construção da mecânica quântica, quando estava interessado em estudar os estados quânticos que conseguiriam reproduzir trajetórias clássicas. Alguns anos depois, J. von Neumann utilizou esta construção para investigar os processos de medição de posição e momento na teoria quântica. Este conceito foi tratado apenas como uma curiosidade até 1963, quando R. J. Glauber utilizou os EC para estabelecer os fundamentos teóricos da ótica quântica, trabalho que lhe rendeu o prêmio Nobel em 2005. Ele utilizou o novo formalismo para explicar com sucesso fenômenos coerentes na propagação da luz, por isso a escolha

do nome. Na mesma época, E. C. G. Sudarshan e J. R. Klauder também desenvolveram trabalhos independentes sobre estes estados. Estes três trabalhos constituem a base do que hoje são os estados coerentes [58–61].

De forma geral, a construção dos EC é feita por meio da teoria de grupos, mas para sistemas descritos por hamiltonianas análogas à de um oscilador harmônico quântico, podemos utilizar a construção de estados coerentes de Schrödinger-Klauder-Glauber, na qual temos três independentes e equivalentes para determiná-los [45, 60, 61]:

1) Os estados coerentes  $|\eta\rangle$  são auto-estados do operador aniquilação,

$$a|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \quad (2.6)$$

sendo  $\eta$  um autovalor complexo.

2) Os estados coerentes  $|\eta\rangle$  saturam o princípio de incerteza de Heisenberg,

$$\Delta A \Delta B = \hbar/2, \quad (2.7)$$

com  $A$  e  $B$  representando operadores canonicamente conjugados. Assim, estes estados representam os estados de menor incerteza.

3) Os estados coerentes  $|\eta\rangle$  podem ser obtidos a partir do estado de vácuo,  $|0\rangle$ , por meio da aplicação de um operador deslocamento,

$$|\eta\rangle = D(\eta)|0\rangle, \quad (2.8)$$

sendo  $D(\eta) = \exp(\eta a^\dagger - \bar{\eta} a)$  e estamos utilizando a notação  $\bar{\eta}$  para o conjugado complexo.

Para entender melhor essa terceira definição, vamos apresentar a construção desses estados coerentes por meio da teoria de grupos. Nos casos que estamos trabalhando, nos quais a hamiltoniana pode ser representada por  $H = H_0 + V$ , sendo  $H_0$  uma hamiltoniana quadrática semelhante à de um oscilador harmônico e  $V$  um termo de linear de perturbação, definimos um grupo de Lie que contém os operadores de criação, aniquilação, número e identidade como geradores, chamado de grupo  $H_4$  de Heisenberg-Weyl, cujo espaço de Hilbert é dado pelos auto-estados do operador número  $\hat{n}$  ( $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots\}$ , sendo  $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ ). Assim,  $H_0|n\rangle = \hbar\omega_n|n\rangle$ , e definimos  $|0\rangle$  como o estado extremo da construção. Precisamos também definir um subgrupo de estabilidade que mantém o estado extremo invariante, que no caso do grupo  $H_4$  seria o subgrupo  $U(1) \otimes U(1)$ , cujos elementos são dados por  $h = \exp[i(g\hat{n} + \vartheta\hat{I})]$ , com  $h|0\rangle = e^{i\vartheta}|0\rangle$ . O operador  $D(\eta)$  apresentado na terceira definição faz parte do espaço quociente  $H_4/U(1) \otimes U(1)$ , que determina o conjunto de elementos que fornecem uma decomposição única para qualquer elemento  $g \in H_4$  ( $g = Dh$ ). Definimos então um estado coerente como a atuação desses elementos quocientes no estado extremo, como apresentado na equação 2.8. Pela construção

apresentada, temos

$$g|0\rangle = D(\eta)h|0\rangle = D(\eta)|0\rangle e^{i\vartheta} = |\eta\rangle e^{i\vartheta}. \quad (2.9)$$

Apesar dessa construção ter sido apresentada para o modelo em questão, ela pode ser generalizada para outros casos [45, 60, 61].

Utilizando a base formada pelos estados coerentes, o valor esperado de operador  $A$  é dado por  $\langle A \rangle_\eta = \text{Tr}(\rho_\eta A)$ , com  $\rho_\eta = D(\eta)\rho_0 D^\dagger(\eta)$ , sendo  $\rho_0 = e^{-\beta H_0} / \text{Tr}(e^{-\beta H_0})$  é a matriz densidade de estados do sistema. Desta forma, incorporamos efeitos térmicos na nossa construção de estados coerentes [62]. Esta base nos leva a certos resultados interessantes, como por exemplo: o valor esperado do operador posição no oscilador harmônico passa a ter um comportamento senoidal, conforme esperado pela física clássica ( $\langle x(t) \rangle_\eta \propto \text{sen}\omega t$ ). Outro resultado interessante é obtido para o operador número:  $\langle a^\dagger a \rangle_\eta = |\eta|^2 + n_{BE}$ , onde observamos o surgimento do termo  $|\eta|^2$ , além da distribuição de Bose-Einstein  $n_{BE}$ . Esse termo surge pois, quando temos alguma coerência no sistema (seja devido à ressonância, ou a uma condensação), uma parte dos mágnons do sistema passa a ocupar um único estado quântico, enquanto os demais mágnons se distribuem de acordo com a estatística de Bose-Einstein (comportamento padrão). A figura 2.4 mostra uma extrapolação de como o número de mágnons nos estados coerentes muda com a temperatura.

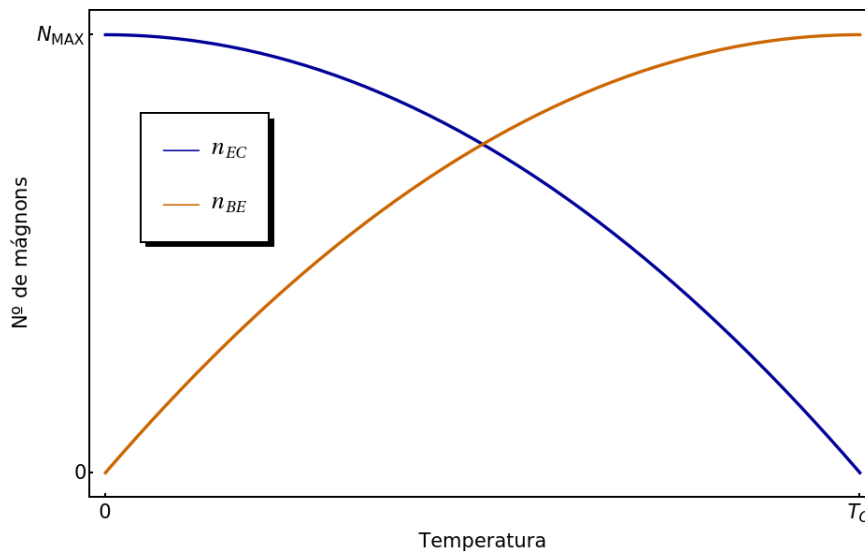


Figura 2.4: Número de mágnons em função da temperatura. A linha azul representa o número de mágnons coerentes ( $n_{EC} = |\eta|^2$ ) e a linha laranja representa o número de mágnons seguindo a estatística de Bose-Einstein ( $n_{BE}$ ).

No nosso contexto, a construção dos estados coerentes é feita a partir de uma hamiltoniana perturbada,  $H = H_0 + V$ . Utilizando o Formalismo de Interação, a evolução temporal de um operador é dada por  $A(t) = S^\dagger(t)\hat{A}(t)S(t)$ , com  $\hat{A}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A(0) e^{-iH_0 t/\hbar}$ , e

$$S(t) = T_t \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}(t') \right], \quad (2.10)$$

sendo  $S(t)$  a matriz-S, responsável por conectar o estado inicial do sistema,  $|0\rangle$  (antes da perturbação), com o seu estado final perturbado. Na abordagem que estamos trabalhando, o operador ordenamento temporal,  $T_t$ , pode ser substituído por uma fase global irrelevante  $\vartheta(t)$ <sup>3</sup>. Definindo o potencial retardado  $\hat{V}(t, t') = \hat{V}(t')\theta(t - t')$ , e adotando uma evolução temporal adiabática iniciada em um tempo muito distante, no qual o potencial se encontrava “desligado”, até o tempo presente  $t > 0$ , podemos reescrever

$$S(t) = e^{i\vartheta(t)} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{V}(t, t') \right]. \quad (2.11)$$

Na nossa construção, a perturbação irá gerar coerência no sistema, logo, o estado final será um estado coerente,  $|\eta\rangle$ . Assim, nossos estados coerentes serão definidos como  $|\eta(t)\rangle = S(t) |0\rangle$  [63]. Os autovalores de  $|\eta(t)\rangle$  serão obtidos pelo operador deslocamento por meio da definição 2.8, que implica em  $D(\eta(t)) = S(t)$ .

Toda a construção apresentada neste capítulo forma a base teórica utilizada na nossa pesquisa. Nos capítulos seguintes, estes conceitos serão utilizados para apresentar os trabalhos desenvolvidos durante esse período de doutoramento.

---

<sup>3</sup>O operador de ordenamento temporal é relevante em intervalos de tempo finitos, mas para intervalos infinitesimais podemos adotar essa aproximação [35]

## Capítulo III

# Aproximação harmônica auto-consistente quântica

Em sua formulação tradicional, vimos que a AHAC possui uma abordagem que chamamos de quântica, obtida ao promovermos os campos  $S^z$  e  $\varphi$  a operadores e adotarmos uma estatística quântica no lugar das médias Gaussianas convencionais. Porém, mesmo nessa abordagem quântica, em algum momento foi utilizada a aproximação semiclássica. Desta forma, não há como garantir que efeitos quânticos não tenham sido perdidos no processo. Esse pode ser um motivo para os resultados obtidos por meio da AHAC para sistemas quânticos (com valor de spin pequeno) não serem tão precisos. Visando um aprimoramento do método, apresentaremos nesse capítulo uma nova abordagem puramente quântica para a AHAC, sem a necessidade de aproximações semiclássicas.

### 3.1 Modelo teórico

Para o desenvolvimento dessa nova aproximação harmônica auto-consistente quântica (AHACQ), partimos de um modelo de material magnético isolante simples, representado por uma hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica<sup>1</sup>,

$$\hat{H} = \pm \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+ + 2\lambda \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right), \quad (3.1)$$

sendo  $J$  a constante de troca e  $\lambda$  uma constante de anisotropia. O sinal negativo (positivo) indica um sistema FM (AFM). A soma  $\langle i, j \rangle$  é feita entre primeiros vizinhos, onde estamos considerando uma rede periódica com espaçamento de rede  $a$ . No desenvolvimento apresentado, iremos convencionar que o sinal superior em  $\pm$  (ou  $\mp$ ) se refere ao caso AFM e o inferior se refere ao caso FM, além de representarmos operadores como  $\hat{A}$ , enquanto os campos serão representados como  $A$ . Adotaremos  $x$  como a direção preferencial para

---

<sup>1</sup>Também conhecida como modelo XXZ.

os spins do sistema, o que resulta em uma componente  $S^z$  e em um ângulo  $\varphi$  pequenos. Também adotaremos uma anisotropia de plano-fácil ( $\lambda < 1$ ). Outros casos, como interações com campos magnéticos externos e outros tipos de anisotropia, podem ser explorados por meio de pequenos ajustes no desenvolvimento apresentado.

A hamiltoniana pode ser reescrita em termos dos operadores  $\hat{S}_i^z$  e  $\hat{\varphi}_i$  por meio da representação de Villain [64],

$$\hat{S}_i^+ = e^{i\hat{\varphi}_i} \sqrt{\tilde{S}^2 - \hat{S}_i^z (\hat{S}_i^z + 1)} \quad , \quad \hat{S}_i^- = \sqrt{\tilde{S}^2 - \hat{S}_i^z (\hat{S}_i^z + 1)} e^{-i\hat{\varphi}_i} \quad , \quad (3.2)$$

sendo  $\tilde{S}^2 = S(S+1)$ . Como os operadores  $\hat{S}_i^z$  e  $\hat{\varphi}_i$  definem pequenas flutuações em torno do estado fundamental, assumimos que eles são muito pequenos e realizamos as expansões,

$$\sqrt{\tilde{S}^2 - \hat{S}_i^z (\hat{S}_i^z + 1)} \approx \tilde{S} \left[ 1 - \frac{\hat{S}_i^z (\hat{S}_i^z + 1)}{2\tilde{S}^2} \right] \quad , \quad e^{\pm i\hat{\varphi}_i} \approx 1 \pm i\hat{\varphi}_i - \frac{(\hat{\varphi}_i)^2}{2} \quad , \quad (3.3)$$

onde nos limitamos até a segunda ordem. Utilizando esses resultados na equação 3.1, obtemos uma hamiltoniana dividida em três partes,  $\hat{H} \approx E_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ , sendo  $E_0$  a energia do estado fundamental,  $\hat{H}_1 = \pm zJ \sum_i \hat{S}_i^z$  é uma hamiltoniana contendo os termos lineares, e

$$\hat{H}_2 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{\tilde{S}^2}{2} (\hat{\varphi}_i - \hat{\varphi}_j)^2 + \hat{S}_i^z (\hat{S}_i^z \pm \lambda \hat{S}_j^z) \right] \quad , \quad (3.4)$$

representa a hamiltoniana quadrática. Para o modelo AFM, adotamos uma rotação de  $\pi$  em torno do eixo  $z$  antes das expansões. O foco de nosso trabalho está na hamiltoniana quadrática, onde podemos analisar as excitações do sistemas e obter as grandezas físicas relevantes, visto que os valores esperados dos outros dois termos da hamiltoniana nos fornecem resultados nulos.

Para incorporar as contribuições de ordem superior, que foram ignoradas nas expansões, vamos introduzir um parâmetro de renormalização em nosso sistema, substituindo  $\varphi$  por  $\sqrt{\rho}\varphi$ , como é feito tradicionalmente na AHAC. Tomando as transformadas de Fourier para os operadores,

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{S}_q^z e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \quad , \quad \hat{\varphi}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{\varphi}_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \quad , \quad (3.5)$$

reescrevemos a hamiltoniana 3.4 no espaço dos momentos como,

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_q \left( h_q^\varphi \hat{\varphi}_q^\dagger \hat{\varphi}_q + h_q^z \hat{S}_q^{z\dagger} \hat{S}_q^z \right) \quad , \quad (3.6)$$

sendo os coeficientes dados por

$$h_q^\varphi = 2zJ\tilde{S}^2\rho(1 - \gamma_q) , \quad (3.7a)$$

$$h_q^z = 2zJ(1 \pm \lambda\gamma_q) . \quad (3.7b)$$

O termo  $\gamma_q = z^{-1} \sum_\eta e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\eta}}$  define o fator de estrutura, determinado pelos  $z$  primeiros vizinhos, localizados nas posições definidas por  $\boldsymbol{\eta}$ .

Podemos obter uma hamiltoniana diagonal, semelhante ao caso de oscilador harmônico, definindo novos operadores bosônicos de criação e aniquilação, a partir das relações,

$$\hat{\varphi}_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{h_q^z}{h_q^\varphi} \right)^{1/4} (a_{-q}^\dagger + a_q) , \quad (3.8a)$$

$$\hat{S}_q^z = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( \frac{h_q^\varphi}{h_q^z} \right)^{1/4} (a_{-q}^\dagger - a_q) . \quad (3.8b)$$

Esses operadores respeitam a relação de comutação  $[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}$ , e serão responsáveis por criar e aniquilar mágnons em nosso sistema de spins. Utilizando essas relações, obtemos

$$\hat{H}_0 = \sum_q \epsilon_q \left( a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \right) , \quad (3.9)$$

sendo  $\epsilon_q = \hbar\omega_q = \sqrt{h_q^\varphi h_q^z} = 2zJ\tilde{S}\sqrt{\rho(1 - \gamma_q)(1 \pm \lambda\gamma_q)}$  o espectro de energia dos mágnons do sistema. Esse resultado coincide com o que pode ser obtido pela abordagem de HP, a mais difundida para o estudo desses sistemas, porém com a correção  $S \rightarrow \tilde{S}$  intrínseca<sup>2</sup> e com o acréscimo do parâmetro  $\rho$ , que incorpora ao nosso sistema correções de ordem superior, o que seria bem mais trabalhoso de se fazer pela representação bosônica de HP.

## 3.2 Parâmetro de renormalização

No desenvolvimento mostrado, introduzimos um parâmetro de renormalização na expansão de  $\varphi$ , a fim de contabilizar a contribuição de termos de ordem superior. Essa adição já é algo padrão para o método da AHAC, mas a obtenção desse parâmetro é tradicionalmente feita após uma aproximação semiclássica, como visto na seção 2.1. Nosso intuito agora é obter uma expressão para parâmetro de renormalização de forma puramente quântica, partido da análise da desigualdade de Gibbs-Bogoliubov (equação 2.3). Na nossa abordagem, toda a termodinâmica do sistema será determinada a partir da função de

<sup>2</sup>A substituição  $S \rightarrow \tilde{S} = \sqrt{S(S+1)}$  surge ao conectarmos esse valor ao número quântico associado ao operador  $\hat{S}^2$ , o que otimiza análises realizadas no regime quântico. Na AHACQ, o termo  $\tilde{S}$  surge desde o início do tratamento, devido à abordagem puramente quântica adotada.

partição,

$$Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_0} = \prod_q \left[ 2 \sinh \left( \frac{\beta \epsilon_q}{2} \right) \right]^{-1}, \quad (3.10)$$

obtida por meio da hamiltoniana quadrática. Utilizando a equação 3.10, obtemos a energia livre de Helmholtz,

$$F_0 = -k_B T \ln Z_0 = k_B T \sum_q \ln \left[ 2 \sinh \left( \frac{\beta \epsilon_q}{2} \right) \right], \quad (3.11)$$

e o valor médio da hamiltoniana quadrática 3.9,

$$\langle \hat{H}_0 \rangle_0 = Z_0^{-1} \text{Tr} (e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{H}_0) = \sum_q \epsilon_q \left( n_q + \frac{1}{2} \right), \quad (3.12)$$

onde  $n_q = (e^{\beta \epsilon_q} - 1)^{-1}$  indica a distribuição de Bose-Einstein. Assim, utilizando  $2 \sinh \left( \frac{\beta \epsilon_q}{2} \right) = e^{\frac{\beta \epsilon_q}{2}} (1 - e^{-\beta \epsilon_q})$ , obtemos,

$$F_0 - \langle \hat{H}_0 \rangle_0 = \sum_q [k_B T \ln (1 - e^{-\beta \epsilon_q}) - \epsilon_q n_q]. \quad (3.13)$$

Para obter o parâmetro de renormalização, precisamos agora calcular o valor esperado  $\langle \hat{H} \rangle_0$ . Para isso, vamos utilizar o formalismo das integrais de caminho para spin, que possibilita uma conexão entre a álgebra discreta do formalismo quântico de spins com campos vetoriais contínuos [8, 58].

### 3.2.1 Formalismo dos estados coerentes de spin

Um estado coerente de spin, que iremos denotar por<sup>3</sup>  $|\theta, \varphi\rangle \equiv |\Omega\rangle$ , é obtido pela rotação do estado completamente polarizado,  $|S, S\rangle$ , nas direções definidas pelos ângulos polar e azimutal,  $\theta, \varphi$ , ou seja,

$$|\Omega\rangle = e^{-i\varphi \hat{S}_z} e^{-i\theta \hat{S}_y} |S, S\rangle. \quad (3.14)$$

Esses estados formam uma base no espaço de Hilbert, com relação de completeza dada por

$$\hat{I} = \frac{2S+1}{4\pi} \int d\Omega |\Omega\rangle \langle \Omega|, \quad (3.15)$$

com  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ . Considerando o operador de spin  $\hat{\mathbf{S}} = S \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ , sendo  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  um operador definido pelas matrizes de Pauli,  $(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ , vemos que

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\Omega} |\Omega\rangle = S |\Omega\rangle, \quad (3.16)$$

<sup>3</sup>Neste ponto, ainda não estamos considerando as aproximações para os ângulos.

onde<sup>4</sup>  $\mathbf{\Omega} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ , logo, os estados  $\{|\Omega\rangle\}$  são auto-estados da projeção do operador de spin no espaço definido pelos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$ . Outro resultado que podemos observar é o valor esperado do operador de spin nessa base,

$$\langle\Omega|\hat{\mathbf{S}}|\Omega\rangle = S\mathbf{\Omega}, \quad (3.17)$$

que nos mostra que o estado coerente se comporta como um vetor de magnitude  $S$ , na direção indicada por  $\mathbf{\Omega}$ . Essas propriedades nos permitem determinar a termodinâmica do sistema por meio de integrais de caminho no espaço dos spins.

Adotando o formalismo de tempo imaginário (ver [65]) e representando o estado coerente do sistema como o produto dos estados de cada sítio da rede,  $|\Omega\rangle = \prod_i |\Omega_i\rangle$ , reescrevemos a função de partição do sistema como

$$Z = \int \prod_{\ell=0}^N \mathcal{D}\Omega(\tau_\ell) \prod_{\ell=0}^{N-1} \langle\Omega(\tau_{\ell+1})| e^{-\hat{H}_\ell \Delta\tau/\hbar} |\Omega(\tau_\ell)\rangle, \quad (3.18)$$

no qual utilizamos o procedimento padrão em que particionamos o tempo utilizando um espaço discreto de  $N$  parcelas de tamanho  $\Delta\tau = \beta\hbar/N$ . Assim, obtemos

$$Z = \int \mathcal{D}\Omega e^{-\mathcal{A}/\hbar}, \quad (3.19)$$

com  $\mathcal{D}\Omega = \prod_i d\Omega_i$ , e definimos uma ação

$$\mathcal{A} = \int_0^{\beta\hbar} \left[ H(\tau) - i\hbar \sum_i S_i^z \dot{\varphi}_i \right] d\tau, \quad (3.20)$$

sendo  $H(\tau) = \langle\Omega|\hat{H}(\tau)|\Omega\rangle$ . e o segundo termo surge como a fase de Berry<sup>5</sup>. Como a hamiltoniana  $\hat{H}$  é linear em relação aos operadores de spin, o valor esperado  $H(\tau)$  pode ser obtido substituindo esses operadores pelos seus campos clássicos equivalentes, como será mostrado posteriormente. Em cenários onde os operadores não são lineares, como anisotropias de sítio único, a discrepância entre os valores esperados obtidos por meio dos operadores e por meio dos campos reduz conforme a magnitude do spin aumenta, possibilitando a utilização da metodologia apresentada até mesmo para esses casos. Seguindo a mesma abordagem, obtemos a função de correlação entre spins de diferentes sítios,

$$\langle\hat{S}_i^\alpha(\tau)\hat{S}_j^\alpha(\tau')\rangle = Z^{-1} \text{Tr} \left( e^{-\beta\hat{H}} \hat{S}_i^\alpha(\tau)\hat{S}_j^\alpha(\tau') \right) = e^{\beta F} \int \mathcal{D}\Omega S_i^\alpha(\tau) S_j^\alpha(\tau') e^{-\mathcal{A}/\hbar}, \quad (3.21)$$

sendo  $F = -k_B T \ln Z$  e  $\alpha = (x, y, z)$  com  $\mathbf{S}_i = S\mathbf{\Omega}_i$ .

Vamos voltar a nossa atenção agora para a hamiltoniana do sistema, escrita em termos

<sup>4</sup> $\mathbf{\Omega}$  denota um vetor unitário definido na esfera  $\mathbb{S}^2$ .

<sup>5</sup>Para mais detalhes sobre essa fase de Berry, ver [66]

dos campos de spin,

$$H = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z) . \quad (3.22)$$

Para essa nova abordagem nos oferecer um modelo quadrático consistente com o que foi obtido na seção 3.1, iremos adotar a reparametrização  $\Omega'_i \rightarrow (\tilde{S}/S)\Omega_i$  e  $\mathcal{D}\Omega' \rightarrow \mathcal{J}_{\Omega'\Omega}\mathcal{D}\Omega$ , onde  $\tilde{S}^2 = S(S+1)$  e  $\mathcal{J}_{\Omega'\Omega}$  representa o determinante jacobiano da transformação. Considerando um campo de spin, orientado na direção  $x$ , definido por  $\mathbf{S}_i = \tilde{S}\Omega'_i$ , reescrevemos a hamiltoniana 3.22 como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\zeta_{ij} \cos \Delta\varphi_{ij} \mp \lambda S_i^z S_j^z) , \quad (3.23)$$

sendo  $\zeta_{ij} = \sqrt{\tilde{S}^2 - (S_i^z)^2} \sqrt{\tilde{S}^2 - (S_j^z)^2}$ ,  $\Delta\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j$ , e utilizamos  $\tilde{S} \cos \theta = S^z$  e  $\tilde{S} \sin \theta = \sqrt{\tilde{S}^2 - (S^z)^2}$  para obter uma hamiltoniana dependente de  $\varphi$  e  $S^z$ . Também adotamos novamente uma rotação de  $\pi$  em torno do eixo  $z$  para o AFM. Como o campo está orientado em  $x$ , temos  $S^z \ll \tilde{S}$  e  $\varphi \ll 1$ , o que nos permite realizar certas expansões na equação 3.23. Assim, obtemos uma hamiltoniana  $H = H_2 + \varepsilon H'$ , onde já ignoramos o termo constante que indica a energia do estado fundamental. O termo,

$$H_2(\varphi, S^z) = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} \tilde{S}^2 \Delta\varphi_{ij}^2 + S_i^z S_j^z \pm \lambda S_i^z S_j^z \right] , \quad (3.24)$$

representa uma hamiltoniana quadrática nas variáveis  $\varphi_i$  e  $S_i^z$ , enquanto  $H'$  indica as contribuições de ordem superior que surgem das expansões, as quais  $\varepsilon \ll 1$ . Com essa hamiltoniana, obtemos

$$Z = \int \mathcal{D}\Omega' \exp [ - (\mathcal{A}_0 + \varepsilon \mathcal{A}') / \hbar ] , \quad (3.25)$$

sendo

$$\mathcal{A}_0 = \int_0^{\beta\hbar} \left( H_2 - i\hbar \sum_i S_i^z \dot{\varphi}_i \right) d\tau , \quad \mathcal{A}' = \int_0^{\beta\hbar} H' d\tau . \quad (3.26)$$

Expandindo até primeira ordem, obtemos

$$Z = Z_0 \left( 1 - \frac{\varepsilon}{\hbar} \langle \mathcal{A}' \rangle_0 \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.27)$$

com  $Z_0 = \int \mathcal{D}\Omega' \exp(-\mathcal{A}_0/\hbar)$ . Os valores esperados para o campo de spin não-interagente são dados por  $\langle \Psi \rangle_0 = Z_0^{-1} \int \mathcal{D}\Omega' \Psi e^{-\mathcal{A}_0/\hbar}$ . Assim, utilizando a equação 3.21 para tempos iguais,  $\tau = \tau'$ , obtemos a seguinte aproximação até primeira ordem para o valor esperado

da hamiltoniana original 3.1,

$$\langle \hat{H} \rangle \approx \frac{1}{Z_0} \left( 1 + \frac{\varepsilon}{\hbar} \langle \mathcal{A}' \rangle_0 \right) \int \mathcal{D}\Omega H e^{-\mathcal{A}_0/\hbar} \left( 1 - \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathcal{A}' \right) \quad (3.28)$$

onde  $H$  indica a hamiltoniana 3.22. Desse resultado, vemos que o formalismo apresentado nos permite obter o valor esperado de uma hamiltoniana quântica por meio de uma hamiltoniana semiclássica equivalente, em termos dos campos de spin,

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle H \rangle_0 + \frac{\varepsilon}{\hbar} (\langle \mathcal{A}' \rangle_0 \langle H \rangle_0 - \langle \mathcal{A}' H \rangle_0) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) . \quad (3.29)$$

Como  $\varepsilon \ll 1$ , vamos desconsiderar as contribuições dos termos dependentes desse fator, mas vamos contabilizar as correções derivadas desses termos por meio do acréscimo de um parâmetro de renormalização na expansão do ângulo  $\varphi$ , nos levando a uma hamiltoniana quadrática

$$H_0 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} \tilde{S}^2 \rho \Delta \varphi_{ij}^2 + S_i^z S_j^z \pm \lambda S_i^z S_j^z \right] , \quad (3.30)$$

que substitui a hamiltoniana  $H_2$ . Tomando as transformadas de Fourier para os campos, definidas da mesma forma apresentada nas equações 3.5, porém com campos no lugar dos operadores, a hamiltoniana 3.30 assume uma forma semelhante à apresentada na equação 3.6, mas em termos dos campo de spin,

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_q (\bar{\varphi}_q h_q^\varphi \varphi_q + \bar{S}_q^z h_q^z S_q^z) , \quad (3.31)$$

onde os coeficientes coincidem com os dados pela equação 3.7 e estamos utilizando a notação  $\bar{\Psi}_q = \Psi_{-q}$ . A dinâmica do sistema pode ser determinada por meio das equações de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial \mathcal{A}_0}{\partial \Psi} - \frac{d}{d\tau} \left( \frac{\partial \mathcal{A}_0}{\partial \dot{\Psi}} \right) = 0 , \quad (3.32)$$

sendo  $\Psi = [\varphi, S^z]$  e a ação,  $\mathcal{A}_0$ , dada pela equação 3.26. Utilizando a hamiltoniana 3.31, obtemos um conjunto de equações diferenciais  $\dot{\varphi}_q = h_q^z S_q^z$  e  $\dot{S}_q^z = -h_q^\varphi \varphi_q$ , cuja solução nos indica que a dinâmica do sistema consiste em campos oscilatórios de frequência  $\omega_q = \epsilon_q/\hbar = \hbar^{-1} \sqrt{h_q^\varphi h_q^z}$ , resultado consistente com o obtido pela abordagem quântica tradicional da AHAC. Assim, essa nova abordagem nos fornece o mesmo espectro de energia do sistema que obtemos por meio da abordagem convencional, nos fornecendo novidades apenas no parâmetro de renormalização.

### 3.2.2 Valores esperados

Como dito anteriormente, podemos obter uma equação auto-consistente para o parâmetro de renormalização  $\rho$  por meio da desigualdade de Gibbs-Bogoliubov (equação 2.3),

onde desejamos obter um  $\rho$  que minimize a expressão  $\Gamma(\rho) = F_0 - \langle \hat{H}_0 \rangle_0 + \langle \hat{H} \rangle_0$ . A primeira parte da expressão já foi determinada na equação 3.13. Assim, precisamos agora calcular o valor esperado  $\langle \hat{H} \rangle_0$ , que pode ser obtido por meio do valor esperado  $\langle H \rangle_0$ , conforme mostrado na subseção 3.2.1. Utilizando a hamiltoniana 3.23, vemos que

$$\langle H \rangle_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \langle \zeta_{ij} \cos \Delta \varphi_{ij} \rangle_0 \mp \lambda \langle S_i^z S_j^z \rangle_0 \right). \quad (3.33)$$

Podemos reescrever o primeiro valor esperado como

$$\langle \zeta_{ij} \cos \Delta \varphi_{ij} \rangle_0 = \text{Re} \left[ \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\Omega' \zeta_{ij} e^{-(\mathcal{A}_0 + i\hbar \Delta \varphi_{ij})/\hbar} \right]. \quad (3.34)$$

Nas próximas etapas, vamos levar em conta a dependência temporal dos campos, ou seja,  $S_i^z \rightarrow S_i^z(\tau)$  e  $\varphi_i \rightarrow \varphi_i(\tau)$ . O argumento da exponencial nos leva a definir uma nova ação não-local,  $\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{A}_0 + i\hbar \Delta \varphi_{ij}(\tau)$ . Tomando as transformadas de Fourier para os campos,

$$S_i^z(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{q, \omega_n} S_{qn}^z e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i - \omega_n \tau)}, \quad \varphi_i(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{q, \omega_n} \varphi_{qn} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i - \omega_n \tau)}, \quad (3.35)$$

o segundo termo da ação é reescrito como

$$i\hbar \Delta \varphi_{ij}(\tau) = \frac{i\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{q, \omega_n} \left[ (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} - e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}) \varphi_{qn} + (e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} - e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}) \bar{\varphi}_{qn} \right], \quad (3.36)$$

enquanto o primeiro nos fornece

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{q, \omega_n} \left[ \bar{\varphi}_{qn} h_q^\varphi \varphi_{qn} + \bar{S}_{qn}^z h_q^z S_{qn}^z + \frac{\hbar}{2} (\omega_n \bar{\varphi}_{qn} S_{qn}^z - \omega_n \bar{S}_{qn}^z \varphi_{qn}) \right], \quad (3.37)$$

onde utilizamos  $\int d\tau S_i^z \dot{\varphi}_i = - \int d\tau \varphi_i \dot{S}_i^z$  para obter os dois últimos termos. Assim, obtemos uma ação não-local, dada por

$$\mathcal{A}_{ij} = \frac{1}{2\beta} \sum_{q, \omega_n} \left[ (i\bar{\Delta}_q^{ij} - \omega_n \bar{S}_{qn}^z) \varphi_{qn} + (i\Delta_q^{ij} + \omega_n S_{qn}^z) \bar{\varphi}_{qn} + \frac{h_q^\varphi}{\hbar} \bar{\varphi}_{qn} \varphi_{qn} + \frac{h_q^z}{\hbar} \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z \right], \quad (3.38)$$

onde

$$\Delta_q^{ij} = \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} - e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}}{\sqrt{N}}, \quad (3.39)$$

funciona como um mecanismo para estabelecer as interações entre os sítios e seus primeiros vizinhos. Podemos simplificar essa ação por meio de uma abordagem semelhante à apresentada no apêndice A, na qual definimos um desvio angular  $\delta \varphi_{qn} = \varphi_{qn} - \phi_{qn}$ , onde  $\phi_{qn}$  denota o valor de  $\varphi_{qn}$  que minimiza a ação. Assim, por meio das condições

$\partial\mathcal{A}_{ij}/\partial\varphi_{qn}|_{\varphi=\phi} = 0$  e  $\partial\mathcal{A}_{ij}/\partial\bar{\varphi}_{qn}|_{\bar{\varphi}=\bar{\phi}} = 0$ , obtemos

$$\phi_{qn} = -\frac{\hbar}{h_q^\varphi} (i\Delta_q^{ij} + \omega_n S_{qn}^z) \quad , \quad \bar{\phi}_{qn} = -\frac{\hbar}{h_q^\varphi} (i\bar{\Delta}_q^{ij} - \omega_n \bar{S}_{qn}^z) . \quad (3.40)$$

Utilizando

$$\delta\bar{\varphi}_{qn} h_q^\varphi \delta\varphi_{qn} = \bar{\varphi}_{qn} h_q^\varphi \varphi_{qn} + \hbar (i\bar{\Delta}_q^{ij} - \omega_n \bar{S}_{qn}^z) \varphi_{qn} + \hbar (i\Delta_q^{ij} + \omega_n S_{qn}^z) \bar{\varphi}_{qn} + \bar{\phi}_{qn} h_q^\varphi \phi_{qn} , \quad (3.41)$$

reescrevemos a ação como,

$$\mathcal{A}_{ij} = \frac{1}{2\beta\hbar} \sum_{q,\omega_n} (\delta\bar{\varphi}_{qn} h_q^\varphi \delta\varphi_{qn} - \bar{\phi}_{qn} h_q^\varphi \phi_{qn} + \bar{S}_{qn}^z h_q^z S_{qn}^z) . \quad (3.42)$$

Também podemos utilizar,

$$\bar{\phi}_{qn} h_q^\varphi \phi_{qn} = \frac{\hbar^2}{h_q^\varphi} (-\bar{\Delta}_q^{ij} \Delta_q^{ij} + i\omega_n \bar{\Delta}_q^{ij} S_{qn}^z - i\omega_n \Delta_q^{ij} \bar{S}_{qn}^z - \omega_n^2 \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z) , \quad (3.43)$$

e definir um desvio em  $S_{qn}^z$  como,

$$\delta S_{qn}^z = S_{qn}^z + \frac{i\omega_n}{\omega_q^2 + \omega_n^2} \Delta_q^{ij} , \quad (3.44)$$

para separar a ação em três termos,

$$\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{A}_0^\varphi + \mathcal{A}_0^z + \hbar \Xi_{ij} , \quad (3.45)$$

nos quais identificamos as ações independentes como

$$\mathcal{A}_0^\varphi = \frac{1}{2\beta\hbar} \sum_{q,\omega_n} h_q^\varphi \delta\bar{\varphi}_{qn} \delta\varphi_{qn} , \quad (3.46a)$$

$$\mathcal{A}_0^z = \frac{\hbar}{2\beta} \sum_{q,\omega_n} \frac{(\omega_q^2 + \omega_n^2)}{h_q^\varphi} \delta\bar{S}_{qn}^z \delta S_{qn}^z , \quad (3.46b)$$

e também definimos o ângulo

$$\Xi_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{q,\omega_n} \frac{h_q^z \bar{\Delta}_q^{ij} \Delta_q^{ij}}{\beta\hbar^2 (\omega_q^2 + \omega_n^2)} . \quad (3.47)$$

Utilizando a equação 3.39, vemos que  $\bar{\Delta}_q^{ij} \Delta_q^{ij} = 2(1 - \cos \mathbf{q} \cdot \Delta \mathbf{r}_{ij})/N$ , sendo  $\Delta \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \boldsymbol{\eta}$ , o vetor que indica as posições dos primeiros vizinhos. Podemos tomar a média entre esses sítios para reescrever  $\bar{\Delta}_q^{ij} \Delta_q^{ij} = 2(1 - \gamma_q)/N$ , com  $\gamma_q = z^{-1} \sum_a e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta}}$ , sendo  $z$  o número de primeiros vizinhos. Além disso, as funções de partição obtidas utilizando as

ações apresentadas, coincidem com as do modelo não-interagente, mostradas no apêndice A. Assim, vemos que a função de correlação dos campos  $\varphi$ , para tempos iguais, será dada por

$$\langle \bar{\varphi}_q \varphi_q \rangle_0 = \frac{1}{\beta \hbar^2} \sum_{\omega_n} \frac{h_q^z}{\omega_q^2 + \omega_n^2} = \frac{h_q^z}{2\epsilon_q} \coth \left( \frac{\beta \epsilon_q}{2} \right). \quad (3.48)$$

Com esses resultados, podemos reescrever o ângulo  $\Xi$  como

$$\Xi = \frac{1}{N} \sum_q (1 - \gamma_q) \langle \bar{\varphi}_q \varphi_q \rangle_0 = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{\langle \Delta \varphi_{ij}^2 \rangle_0}{2Nz}. \quad (3.49)$$

O ângulo  $\Xi$  indica a média sobre primeiros vizinhos de  $\Xi_{ij}$ , e iremos utilizá-lo em seu lugar.

Retornando para a o valor esperado apresentado na equação 3.34, utilizando os resultados obtidos, temos

$$\text{Re} \left[ \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\Omega' \zeta_{ij} e^{-(\mathcal{A}_0^\varphi + \mathcal{A}_0^z + \hbar \Xi)/\hbar} \right] = \left[ \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\Omega' \zeta_{ij} e^{-(\mathcal{A}_0^\varphi + \mathcal{A}_0^z)/\hbar} \right] e^{-\Xi}, \quad (3.50)$$

Assim como foi feito no apêndice A para o caso não interagente, podemos reescrever a função de partição do sistema como

$$Z_0 = Z_0^\varphi Z_0^z = \int \mathcal{D}\Omega' e^{-(\mathcal{A}_0^\varphi + \mathcal{A}_0^z)/\hbar}. \quad (3.51)$$

Assim, utilizando a equação 3.49, o valor esperado pode ser reescrito como

$$\langle \zeta_{ij} \cos \Delta \varphi_{ij} \rangle_0 = \langle \zeta_{ij} \rangle_0 \exp \left[ -\frac{1}{2} \langle \Delta \varphi_{ij}^2 \rangle \right], \quad (3.52)$$

onde temos um valor esperado que só depende de  $S^z$  e outro que só depende de  $\varphi$ . Prosseguindo, precisamos agora calcular  $\langle \zeta_{ij} \rangle_0$ , o que não seria possível sem antes realizarmos algumas aproximações. Como o campo está orientado em  $x$ , apresentando pequenos desvios, e assumindo que o sistema em questão é isotrópico, podemos expandir  $\zeta_{ij}$  para  $S^z \ll \tilde{S}$ , obtendo  $\langle \zeta_{ij} \rangle_0 \approx \tilde{S}^2 - \langle (S^z)^2 \rangle_0$ , com

$$\langle (S^z)^2 \rangle_0 = \frac{1}{N(\beta \hbar)^2} \sum_{q\omega_n} \langle \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z \rangle_0. \quad (3.53)$$

Utilizando a equação 3.44, obtemos

$$\langle (S^z)^2 \rangle_0 = \frac{1}{(\beta \hbar)^2} \sum_{q\omega_n} \left[ \frac{\langle \delta \bar{S}_{qn}^z \delta S_{qn}^z \rangle_0}{N} + \frac{2(1 - \gamma_q)}{N^2} \frac{\omega_n^2}{(\omega_n^2 + \omega_q^2)^2} \right] = \frac{1}{N} \sum_q \frac{h_q^\varphi}{2\epsilon_q} \coth \left( \frac{\beta \epsilon_q}{2} \right), \quad (3.54)$$

onde desconsideramos o termo proporcional a  $N^{-2}$ , pois se torna irrelevante no limite termodinâmico. De forma análoga, podemos obter o valor esperado para primeiros vizinhos

( $i \neq j$ ),

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\gamma_q h_q^\varphi}{2\epsilon_q} \coth\left(\frac{\beta\epsilon_q}{2}\right). \quad (3.55)$$

Juntando todos os resultados obtidos, determinamos o valor esperado da hamiltoniana  $\hat{H}$ ,

$$\langle \hat{H} \rangle_0 \approx zJ \sum_q \frac{h_q^\varphi (e^{-\Xi} \pm \lambda\gamma_q)}{2\epsilon_q} \coth\left(\frac{\beta\epsilon_q}{2}\right) - zNJ\tilde{S}^2. \quad (3.56)$$

### 3.2.3 Equação auto-consistente

Com os valores esperados obtidos, podemos determinar uma equação para o parâmetro de renormalização a partir da condição  $d\Gamma(\rho)/d\rho = 0$ . Antes de prosseguir com a função em questão, vamos apresentar algumas derivadas que aparecem no processo,

$$\frac{d\epsilon_q}{d\rho} = \frac{d}{d\rho} \left[ 2zJ\tilde{S} \sqrt{\rho(1-\gamma_q)(1 \pm \lambda\gamma_q)} \right] = \frac{2zJ\tilde{S} \sqrt{(1-\gamma_q)(1 \pm \lambda\gamma_q)}}{2\sqrt{\rho}} = \frac{\epsilon_q}{2\rho}, \quad (3.57a)$$

$$\frac{dn_q}{d\rho} = \frac{d}{d\rho} \left[ \frac{1}{e^{\beta\epsilon_q} - 1} \right] = - \left( \frac{1}{e^{\beta\epsilon_q} - 1} \right)^2 e^{\beta\epsilon_q} \left( \beta \frac{d\epsilon_q}{d\rho} \right) = -e^{\beta\epsilon_q} \left( \frac{\beta\epsilon_q}{2\rho} \right) n_q^2, \quad (3.57b)$$

$$\frac{d}{d\rho} \ln(1 - e^{-\beta\epsilon_q}) = \left( \frac{-e^{-\beta\epsilon_q}}{1 - e^{-\beta\epsilon_q}} \right) \left( -\beta \frac{d\epsilon_q}{d\rho} \right) = \left( \frac{\beta\epsilon_q}{2\rho} \right) n_q. \quad (3.57c)$$

Utilizando as derivadas apresentadas e a a equação 3.13, obtemos

$$\frac{d}{d\rho} \left( F_0 - \langle \hat{H}_0 \rangle_0 \right) = \frac{1}{2\rho} \sum_q \frac{\beta\epsilon_q^2}{4 \sinh^2(\beta\epsilon_q/2)}. \quad (3.58)$$

Precisamos agora derivar o valor esperado da hamiltoniana  $\hat{H}$ , dado pela equação 3.56, que também pode ser reescrito como

$$\frac{d}{d\rho} \langle \hat{H} \rangle_0 = \frac{d}{d\rho} (-zJN) \left[ \left( \tilde{S}^2 - \langle (S^z)^2 \rangle_0 \right) e^{-\Xi} \mp \lambda \langle S_i^z S_j^z \rangle_0 \right]. \quad (3.59)$$

Como

$$\langle (S^z)^2 \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_q \langle \bar{S}_q^z S_q^z \rangle_0, \quad \langle S_i^z S_j^z \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_q \langle \bar{S}_q^z S_q^z \rangle_0, \quad (3.60)$$

para prosseguir com o cálculo, precisamos determinar as derivadas<sup>6</sup> de  $\langle \bar{S}_q^z S_q^z \rangle_0$  e  $\Xi$ ,

$$\frac{d\Xi}{d\rho} = \frac{d}{d\rho} \left[ \frac{1}{N} \sum_q (1-\gamma_q) \frac{h_q^z}{\epsilon_q} \left( n_q + \frac{1}{2} \right) \right] = \frac{-1}{2zJ\tilde{S}^2\rho^2 N} \sum_q \epsilon_q \frac{(\sinh\beta\epsilon_q + \beta\epsilon_q)}{4 \sinh^2(\beta\epsilon_q/2)}, \quad (3.61a)$$

<sup>6</sup>Utilizamos  $(1/2) \coth(\beta\epsilon_q/2) = n_q + (1/2)$  para o cálculo das derivadas

$$\frac{d\langle \tilde{S}_q^z S_q^z \rangle_0}{d\rho} = \frac{d}{d\rho} \left[ \frac{h_q^\varphi}{\epsilon_q} \left( n_q + \frac{1}{2} \right) \right] = \frac{\epsilon_q}{2\rho h_q^z} \frac{(\sinh\beta\epsilon_q - \beta\epsilon_q)}{4 \sinh^2(\beta\epsilon_q/2)}. \quad (3.61b)$$

Por conveniência, definimos as funções,

$$u_q = \epsilon_q \frac{(\sinh\beta\epsilon_q - \beta\epsilon_q)}{4 \sinh^2(\beta\epsilon_q/2)}, \quad v_q = \epsilon_q \frac{(\sinh\beta\epsilon_q + \beta\epsilon_q)}{4 \sinh^2(\beta\epsilon_q/2)}, \quad (3.62)$$

que permitem reescrevermos as derivadas mostradas anteriormente como

$$\frac{d}{d\rho} \left( F_0 - \langle \hat{H}_0 \rangle_0 \right) = \frac{1}{4\rho} \sum_q (v_q - u_q), \quad (3.63a)$$

$$\frac{d\Xi}{d\rho} = \frac{-1}{2zJ\tilde{S}^2\rho^2N} \sum_q v_q, \quad \frac{d\langle \tilde{S}_q^z S_q^z \rangle_0}{d\rho} = \frac{u_q}{2\rho h_q^z}. \quad (3.63b)$$

Com as derivadas definidas, obtemos

$$\frac{d}{d\rho} \langle \hat{H} \rangle_0 = \frac{1}{4\rho^2} \left[ - \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{\tilde{S}^2} \right) e^{-\Xi} \sum_q v_q + \rho \sum_q \frac{e^{-\Xi} \pm \lambda\gamma_q}{1 \pm \lambda\gamma_q} u_q \right]. \quad (3.64)$$

Substituindo as equações 3.63a e 3.64 em  $d\Gamma(\rho)/d\rho = 0$ , obtemos a equação auto-consistente,

$$\rho(T) = \Lambda(T) \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_0}{\tilde{S}^2} \right) e^{-\Xi}, \quad (3.65)$$

sendo

$$\Lambda(T) = \left[ \sum_q \left( v_q + \frac{e^{-\Xi} - 1}{1 \pm \lambda\gamma_q} u_q \right) \right]^{-1} \sum_q v_q. \quad (3.66)$$

Tomando  $\Lambda(T) = 1$ , a equação 3.65 é idêntica à obtida pela abordagem tradicional da AHAC, dada pela equação 2.5. A função  $\Lambda(T)$  serve como um fator de correção quântico, obtido pela AHACQ. No limite semiclássico,  $\beta\epsilon_q \ll 1$ , vemos que  $v_q \rightarrow 1$  e  $u_q \rightarrow 0$ , logo,  $\Lambda(T) \rightarrow 1$ , mostrando que as duas equações coincidem nesse limite. Essa correção no parâmetro de renormalização é o que torna a AHACQ uma boa abordagem para o estudo de sistemas quânticos, aumentando a precisão dos resultados obtidos por meio da AHAC para esses sistemas, conforme será apresentado na próxima seção.

### 3.3 Resultados

Na seção 3.1, vimos que podemos obter uma hamiltoniana quadrática, que descreve os estados excitados do sistema, partindo de sua hamiltoniana original. Com esse modelo quadrático, podemos estudar a termodinâmica do sistema utilizando o ferramental da mecânica estatística quântica. Conforme dito no capítulo II, isso é algo que pode ser feito

por meio de outras representações bosônicas. Porém, a utilização da AHACQ nos permite incorporar flutuações térmicas e quânticas em nossos resultados, devido ao parâmetro de renormalização, dado pela equação 3.65, que precisa ser resolvida numericamente através de um método iterativo auto-consistente. Assim, podemos obter a dependência da temperatura de  $\rho$  de forma simples, visto que esses cálculos numéricos convergem rapidamente, determinando assim a dependência da temperatura de qualquer outra grandeza obtida por meio da hamiltoniana quadrática, sem a necessidade de cálculos mais complexos.

O parâmetro de renormalização obtido por meio da AHACQ apresenta o mesmo comportamento com o aumento da temperatura que o obtido pela AHAC tradicional, cujo valor cai abruptamente para zero em uma temperatura  $T_c$ , que associamos à temperatura de transição de fase do sistema (temperatura de Curie para FM e de Néel para AFM). Esse comportamento é ilustrado na figura 3.1, na qual vemos a dependência da temperatura do parâmetro  $\rho$  para o material AFM  $\text{RbMnF}_3$ , que será apresentado com mais detalhes posteriormente. Nesse mesmo gráfico, comparamos a curva da componente transversal da magnetização,  $\mathbf{m}_\perp = m_\perp(\cos\phi, \sin\phi, 0)$ <sup>7</sup>, obtida pela AHACQ,

$$m_\perp = \langle S^x \rangle_0 \approx \tilde{S} \left[ 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle}{2\tilde{S}^2} \right] e^{-\frac{1}{2}\langle \varphi^2 \rangle_0}, \quad (3.67)$$

com os dados experimentais obtidos de [67]. Em ambas as curvas, observamos uma queda abrupta em  $T_c$ , que pode ser atribuída aos termos exponenciais existentes nas expressões de ambas as grandezas. Apesar dessa característica indicar uma transição de fase de primeira ordem na magnetização, ainda conseguimos associar essa temperatura  $T_c$  à temperatura crítica do sistema, e analisar o sistema para  $T < T_c$ , assim como mencionamos na seção 2.1 para a AHAC.

Sabemos que a AHAC nos possibilita determinar com precisão a temperatura de transição de fase de sistemas clássicos, ao associarmos essa temperatura à  $T_c$ . A AHACQ amplia essa aplicação para sistemas quânticos, apresentando ótimos resultados quando comparada com os valores experimentais conhecidos e com os resultados obtidos por outros modelos teóricos. Exemplificamos os resultados na tabela 3.1, onde comparamos os valores de temperatura crítica obtidos por meio da AHACQ para sistemas magnéticos amplamente conhecidos, com dados obtidos por meio de simulações de Monte Carlo (MC). Também comparamos esses valores com os obtidos por meio da abordagem tradicional da AHAC e por meio da aproximação linear de ondas de spin do formalismo de HP. Os sistemas utilizados foram os modelos XY e Heisenberg tridimensionais, ambos com spin  $S = 1/2$ . Para o modelo XY, utilizamos os dados apresentados em [68], no qual são feitas análises, por meio de simulações de MC, da versão FM desse modelo para estruturas cúbicas simples (CS), de corpo centrado (CCC) e de face centrada (CFC). No caso do

<sup>7</sup>Na fase ordenada, a magnetização exibe ordem de longo alcance em uma direção no plano  $xy$ , definida pelo ângulo polar  $\phi$ .

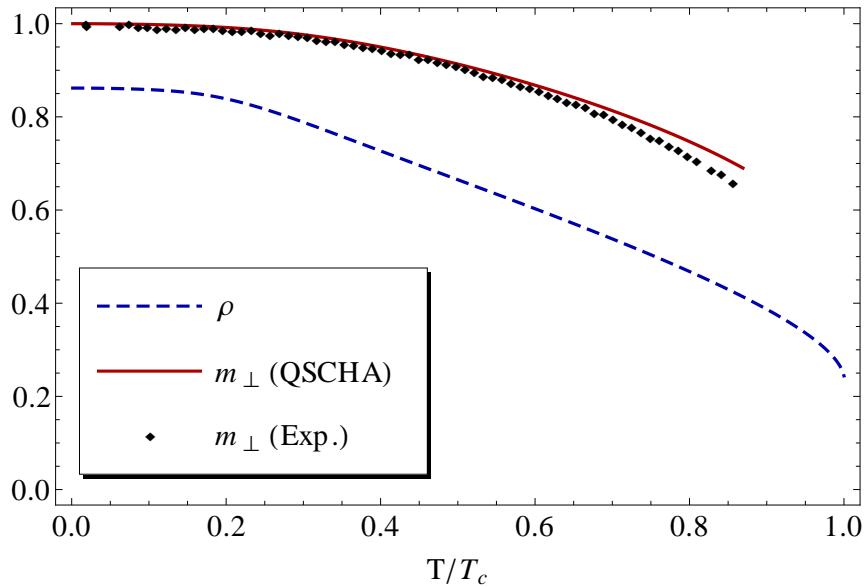


Figura 3.1: Gráfico do parâmetro de renormalização  $\rho$  (linha azul) e da componente transversal da magnetização  $m_{\perp}$  (linha vermelha) em função da temperatura reduzida  $T/T_c$  para o RbMnF<sub>3</sub>. Os pontos indicam valores experimentais retirados de [67].

modelo de Heisenberg, utilizamos os dados de simulação de MC apresentados em [69] e em [70], nos quais o primeiro consiste em um estudo da versão FM desse modelo para diferentes estruturas e o segundo em um estudo de uma estrutura SC AFM. Os resultados do modelo de HP foram determinados por meio da magnetização  $\langle S^x \rangle = S - N^{-1} \sum n_q$ , obtida nesse formalismo, onde associamos a temperatura de transição de fase à temperatura em que essa expressão se torna nula. Assim como no caso da AHACQ, os resultados apresentados para a AHAC tradicional foram determinados analisando a temperatura em que o parâmetro  $\rho$  cai abruptamente para zero. Os resultados obtidos mostram que, dentre os formalismos adotados, a AHACQ mostra maior precisão na determinação de  $T_c$ . No caso do formalismo de HP, podemos obter melhores resultados ao considerarmos interações entre mágnons, incluídas por meio de termos de ordem superior na hamiltoniana, o que torna o desenvolvimento dessa abordagem mais complexa, se comparada com a AHACQ.

Como a AHACQ se diferencia da AHAC tradicional principalmente pelo acréscimo da correção quântica  $\Lambda(T)$  no parâmetro de renormalização, realizamos uma investigação do comportamento térmico desse fator para diferentes valores de spin, apresentada na figura 3.2. Podemos ver que  $\Lambda(T)$  mostra uma dependência pronunciada no valor do spin, apresentando uma maior correção para  $S = 1/2$ , enquanto converge para um, conforme os valores de spin aumentam (se aproximam do regime clássico). Esse resultado também justifica a eficácia da abordagem convencional da AHAC para sistemas clássicos, já observada na literatura [37, 38, 54]. As curvas apresentadas foram determinadas para o modelo XY ( $\lambda = 0$ ), mas esse comportamento também se repete para outros modelos com  $\lambda > 0$ . Para o modelo adotado, conseguimos obter uma expressão para essa correção

Modelo	Estrutura	MC	HP	AHAC	AHACQ
FM XY	SC	2,02	4,22	1,29	2,03
	BCC	2,90	5,96	1,72	2,71
	FCC	4,52	9,14	2,57	4,08
FM Heisenbeg	SC	1,68	3,41	0,99	1,71
	BCC	2,52	5,01	1,40	2,38
	FCC	4,01	7,83	2,17	3,65
AFM Heisenberg	SC	0,95	3,39	0,63	0,95

Tabela 3.1: Temperatura crítica (em unidades de  $J/k_B$ ) de alguns modelos magnéticos tridimensionais com spin  $S = 1/2$ . A coluna MC indica os valores obtidos para esses modelos por meio de simulações de Monte-Carlo, enquanto as colunas HP, AHAC e AHACQ indicam os valores obtidos por meio da aproximação linear de ondas de spin do formalismo de HP, da abordagem tradicional da AHAC e da AHACQ, respectivamente. Os dados de MC foram retirados de [68–70].

quântica em  $T = 0$ . Nesse caso, temos  $u_q(T = 0) = v_q(T = 0) = \epsilon_q/2$ , o que nos leva a  $\Lambda(T = 0) = e^{\Xi}$ . Consequentemente, a equação auto-consistente do parâmetro de renormalização se reduz a  $\rho(T = 0) = (1 - \langle (S^z)^2 \rangle_0 / \tilde{S}^2)$ . Utilizando a equação 3.54, obtemos

$$\langle (S^z)^2 \rangle_0 = \frac{\tilde{S}\sqrt{\rho(0)}}{2} \frac{1}{N} \sum_q (1 - \gamma_q) \approx \frac{\tilde{S}\sqrt{\rho(0)}}{2}. \quad (3.68)$$

Utilizando esse resultado na equação de  $\rho$ , obtemos como solução

$$\rho(0) = \left[ \sqrt{1 + \frac{1}{4\tilde{S}}} - \frac{1}{4\tilde{S}} \right]^2. \quad (3.69)$$

De forma similar, utilizando a equação 3.49, obtemos  $\Xi(T = 0) = (2\tilde{S}\sqrt{\rho(0)})^{-1}$ , resultando em uma expressão para  $\Lambda(T = 0)$  dependente do valor de spin  $S$ ,

$$\Lambda(T = 0) = \exp \left[ \frac{2}{\sqrt{16S(S+1) + 1} - 1} \right]. \quad (3.70)$$

Para  $S = 1/2$ , a correção quântica atinge valor máximo  $\Lambda(0) \approx 2,15$ , enquanto atinge valor unitário no limite  $S \gg 1$ , concordando com o comportamento esperado para esse fator.

Os resultados apresentados evidenciam a eficiência da AHACQ como formalismo para tratar de sistemas quânticos, mas como essa abordagem é equivalente à AHAC tradicional no regime semiclassico, também podemos utilizar esse formalismo em sistemas cuja AHAC se mostra eficaz. Na tabela 3.2 apresentamos uma comparação semelhante à apresentada na tabela 3.1, na qual utilizamos o formalismo de HP, com a aproximação linear para ondas de spin, o formalismo tradicional da AHAC e a AHACQ para determinar a temperatura crítica

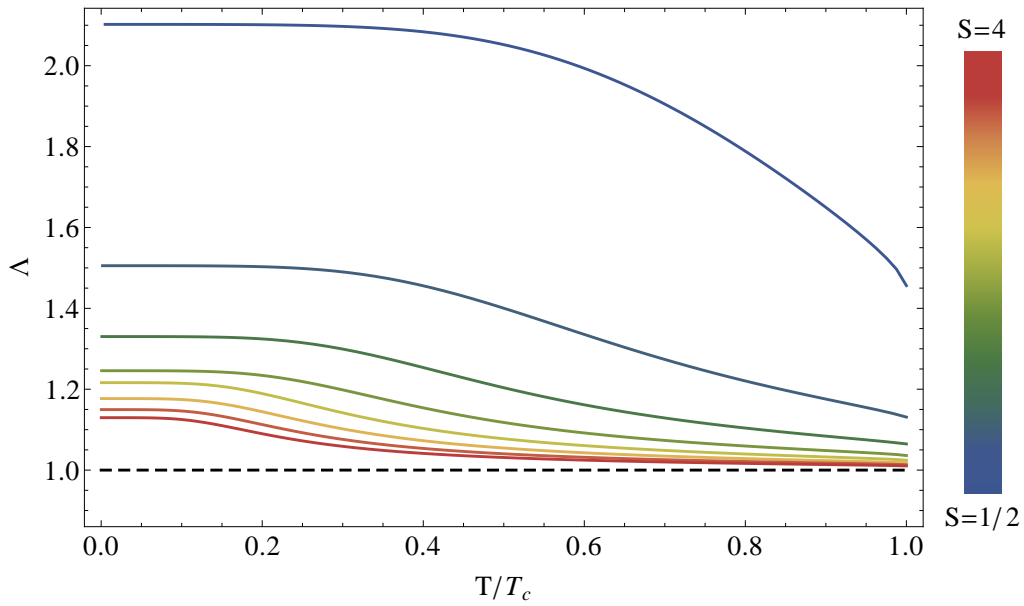


Figura 3.2: Gráfico do fator de correção quântica  $\Lambda$  em função da temperatura reduzida  $T/T_c$  para valores de spin de  $S = 1/2$  até  $S = 4$ , como diferença de  $\Delta S = 1/2$  entre valores subjacentes. A linha tracejada serve de guia visual para observar a convergência  $\Lambda \rightarrow 1$  para  $S \gg 1$  (limite clássico). As curvas foram determinadas para o modelo XY, mas esse comportamento se repete em outros modelos.

de dois materiais AFM tridimensionais de spin  $S = 5/2$  e estrutura SC, aproximadamente isotrópica ( $\lambda \approx 1$ ), o  $\text{KMnF}_3$  [71] e o  $\text{RbMnF}_3$  [72]. A fim de otimizar a precisão dos resultados, determinamos a constante de troca ( $J$ ) para cada modelo a partir da análise da curva do espectro de energia de cada material, obtidas nas referências indicadas para cada um deles. Como em todos os formalismos adotados a energia possui uma dependência linear em  $J$ , podemos determinar essa constante por meio do método dos mínimos quadrados. Para o formalismo de HP, a constante de troca é determinada por meio da equação

$$J = \frac{1}{2zS} \frac{\sum_q \epsilon_q \sqrt{(1 - \gamma_q)(1 \pm \gamma_q)}}{\sum_q (1 - \gamma_q)(1 \pm \gamma_q)}, \quad (3.71)$$

onde a soma é feita sobre os valores experimentais apresentados. Para a AHAC e AHACQ, introduzimos um parâmetro renormalizado  $J_r(T) = J\sqrt{\rho(T)}$  e aplicamos o método dos mínimos quadrados à esse parâmetro. A expressão obtida será igual à equação 3.71, porém com a substituição  $S \rightarrow \tilde{S}$ . Após determinarmos  $J_r$ , utilizamos as equações auto-consistentes para determinar o parâmetro  $\rho$  na temperatura em que o experimento foi conduzido, a fim de determinar a constante de troca do sistema por meio da relação  $J = J_r/\sqrt{\rho}$  [54].

Por último, focamos no composto  $\text{RbMnF}_3$ , já mencionado anteriormente, de forma mais detalhada, visando uma comparação com dados empíricos. Este material exhibe

Material	Spin	Exp.	HP	AHAC	AHACQ
KMnF <sub>3</sub>	5/2	88 K	199,1 K	92,4 K	85,1 K
RbMnF <sub>3</sub>	5/2	83 K	221,9 K	83,9 K	76,8 K

Tabela 3.2: Temperatura crítica de alguns materiais AFM tridimensionais. A coluna Exp. indica valores obtidos experimentalmente, enquanto as colunas HP, AHAC e AHACQ indicam os valores obtidos por meio da aproximação linear de ondas de spin do formalismo de HP, da abordagem tradicional da AHAC e da AHACQ, respectivamente. Os dados experimentais foram retirados de [71, 72].

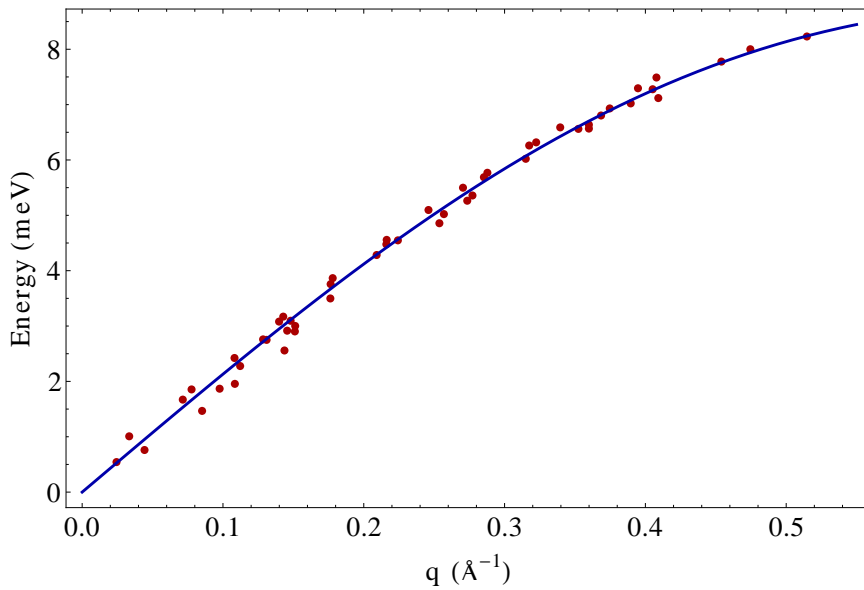


Figura 3.3: Espectro de energia ao longo do plano cristalográfico (110) do RbMnF<sub>3</sub>, à uma temperatura  $T = 4,2$  K. A curva foi determinada por meio da AHACQ, utilizando o valor  $J = 3,10$  K, determinado por meio do processo dos mínimos quadrados. Os pontos indicam valores experimentais retirados de [72].

estrutura cristalina de perovskita cúbica ideal, com parâmetro de rede  $a = 4,24$  Å. A principal interação entre seus sítios é uma interação AFM entre os íons  $\text{Mn}^{2+}$ , que ocupam o centro de um octaedro formado por seis íons  $\text{Fe}^-$ , e seus seis primeiros íons  $\text{Mn}^{2+}$  vizinhos. Na figura 3.3 apresentamos uma comparação gráfica entre o espectro de energia obtido por meio da AHACQ e os dados experimentais retirados de [72], o que nos permite observar a concordância da curva teórica fornecida pela AHACQ com o comportamento observado experimentalmente. Pelo método dos mínimos quadrados obtemos  $J = 3,10$  K, que foi o valor utilizado para todos os resultados obtidos pela AHACQ apresentados para esse material.

Retornando para a tabela 3.2, podemos observar que a AHACQ se mostrou menos precisa, se comparada com a abordagem tradicional da AHAC, na obtenção da temperatura de transição do RbMnF<sub>3</sub>. Ainda assim, conseguimos obter resultados confiáveis para temperaturas na vizinhança do ponto de transição. Analisando o comportamento térmico

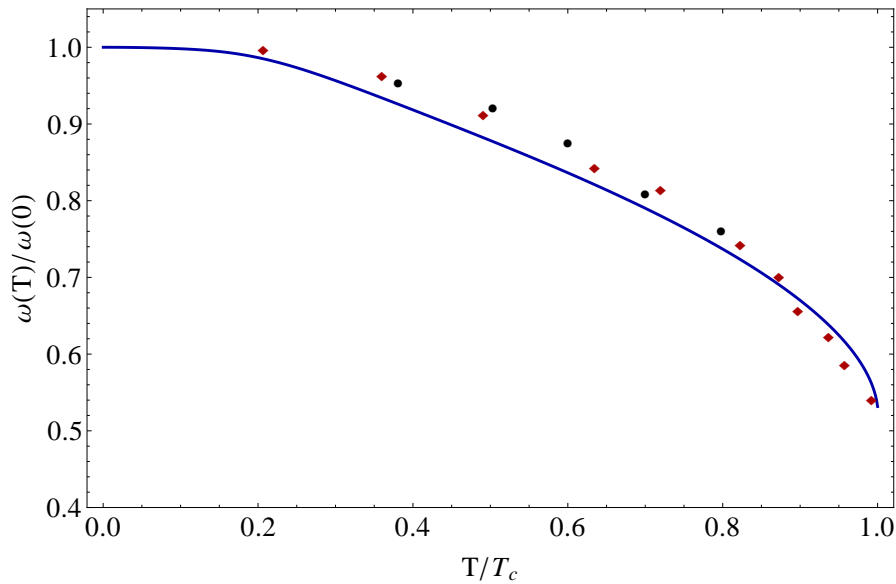


Figura 3.4: Energia renormalizada dos mágnons no limite da primeira zona de Brillouin no RbMnF<sub>3</sub>. A linha sólida representa o resultado obtido por meio da AHACQ. Os pontos pretos indicam dados de medidas de difração de nêutrons, retirados de [73], e os losangos vermelhos indicam dados de medidas de espalhamento Raman, retirados de [74].

da magnetização por meio da AHACQ, observamos uma diminuição proporcional a  $T^{2,03}$ , em regiões próximas a  $T = 0$  K, concordando com a dependência de  $T^2$  observada em outras teorias convencionais. Porém, estendendo nossa análise para regiões entre  $T = 0$  K e  $T = 0,85 T_c$ , obtemos  $m_{\perp} \approx 1 - 0,43(T/T_c)^{2,32}$ , resultado consistente com a lei de potência  $T^{2,38}$ , extraída de dados experimentais para a magnetização [67]. Adicionalmente, apresentamos na figura 3.4 uma análise da dependência de temperatura da energia dos mágnons no RbMnF<sub>3</sub>, no limite da primeira zona de Brillouin. Nessa análise, comparamos a curva obtida por meio da AHACQ com dados experimentais de espalhamento de mágnons, onde observamos boa concordância quantitativa.

Os resultados obtidos para o RbMnF<sub>3</sub> são comparáveis com os observados para outros materiais, e servem para ilustrar a eficácia da AHACQ como abordagem teórica para análise de sistemas magnéticos. Em comparação com os outros modelos apresentados, a AHACQ se mostrou superior à aproximação linear para ondas de spin do formalismo de HP, mas equiparável à abordagem tradicional da AHAC. Para valores de spin altos, a AHACQ ainda nos fornece bons resultados, mas suas correções quântica desempenham papel fundamental na análise de sistemas quânticos.

### 3.4 Conclusões

A AHAC já se mostrou uma ferramenta muito útil para o estudo de sistemas magnéticos, incorporando correções devido à flutuações térmicas por meio de um parâmetro

de renormalização dependente da temperatura. O estudo desenvolvido apresenta uma reformulação da AHAC que amplia a acurácia desse método devido à sua construção puramente quântica, que acrescenta uma nova correção ao parâmetro de renormalização capaz de levar em conta as flutuações quânticas dos sistemas analisados. Como esperado, essa correção quântica se mostrou mais relevante para sistemas de spin pequeno (sistemas quânticos). Essa nova roupagem para a AHAC, que chamamos de AHACQ, mostra uma maior eficácia para esse tipo de sistema e mantém uma eficiência semelhante à da abordagem tradicional quando utilizada em sistemas de spins no regime semiclássico. Assim, a AHACQ surge como um formalismo promissor para o estudo de fenômenos de magnetismo quântico, relevantes para o desenvolvimento de novas tecnologias quânticas.

O conteúdo apresentado nessa seção foi submetido em forma de artigo científico ao periódico *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* e encontra-se em fase de revisão por pares, podendo ser acessado em [75]. A primeira página do artigo pode ser conferida no apêndice C.2.

## Capítulo IV

# Ressonância antiferromagnética

A AHAC recentemente foi explorada para o estudo de spintrônica em sistemas FM no trabalho de A. R. Moura [54]. Visando expandir essa aplicação, escolhemos estudar correntes de spin em sistemas AFM, conforme foi dito no capítulo I. O ponto de partida escolhido para essa exploração da AHAC na spintrônica de antiferromagnetos foi o fenômeno de ressonância, fundamental para a produção de mágnons coerentes em sistemas magnéticos. Além disso, a partir desse estudo somos capazes de apresentar como utilizamos a AHAC e determinamos os EC para esses sistemas. Cronologicamente, o trabalho apresentado nesse capítulo foi realizado antes da formulação da AHACQ, por isso foi utilizada a abordagem tradicional da AHAC. Como os materiais explorados apresentam valores de spin grandes, a correção quântica seria pequena, logo, não achamos relevante acrescentar essa abordagem em nosso desenvolvimento.

Em nosso estudo do fenômeno de ressonância, direcionamos a nossa atenção para o antiferromagneto de Heisenberg com anisotropia de sítio único na presença de um campo magnético externo, um tipo de sistema bem conhecido na spintrônica. Esse AFM é representado pela hamiltoniana semiclássica,

$$H = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}'_i \cdot \mathbf{S}'_j - D \sum_i (S_i^{x'})^2 - g\mu_B \sum_i \mathbf{B}'_i(t) \cdot \mathbf{S}'_i, \quad (4.1)$$

sendo  $J > 0$  a constante de troca,  $D > 0$  a constante de anisotropia e  $\mathbf{B}'(t) = B'_x \hat{i}' + B'_y(t) \hat{j}' + B'_z(t) \hat{k}'$  o campo magnético externo. O termo  $\langle i, j \rangle$  presente no somatório denota uma soma nos primeiros vizinhos. Estamos utilizando a notação com apóstrofo,  $K'$ , para indicar o referencial do laboratório, e vamos utilizar a notação sem o apóstrofo,  $K$ , quando estivermos nos referindo ao referencial local para os sítios da rede.

O campo magnético estático é definido ao longo do eixo de anisotropia, que estabelecemos como a direção  $x'$ . Como os materiais antiferromagnéticos possuem magnetização total de módulo praticamente nulo, não precisamos nos preocupar com termos de amortecimento provenientes do campo desmagnetizante, ou seja,  $\mathbf{B}' \approx \mu_0 \mathbf{H}'_{ext}$ , sendo  $\mathbf{H}'_{ext}$  o campo

externo, que pode ser regulado no laboratório. Geralmente, a condição de ressonância é atingida manipulando a intensidade deste campo externo. Os campos transversais,  $B'_y(t)$  e  $B'_z(t)$ , possuem intensidade baixa, de forma que  $B'_y \approx B'_z \ll B'_x$ , o que nos permite tratar os campos oscilantes como perturbações.

Podemos olhar para um material AFM como um sistema que possui duas sub-redes,  $A$  e  $B$ . Usualmente, os spins destas sub-redes apresentam um alinhamento antiparalelo, no qual eles se encontram alinhados ao longo do mesmo eixo, mas em sentidos opostos. Isto ocorre pois esta configuração minimiza a energia de troca. Mas na presença de um campo estático intenso esta configuração pode mudar, devido à disputa entre a energia de troca e a energia proveniente deste campo, chamada energia de Zeeman. Quando a intensidade do campo está abaixo de um valor crítico,  $B_{sf}$ , o material continua exibindo o alinhamento antiparalelo usual, mas quando excede esse valor crítico, a energia de Zeeman passa a exercer maior influência no sistema. Neste caso, a energia passa a ser minimizada pela configuração exibida na figura 4.1, com  $\theta_A = -\theta_B$ . Assim, podemos observar duas fases no material antiferromagnético. Para  $B'_x < B_{sf}$ , o material se encontra na fase usual, chamada de fase antiferromagnética (AF). Quando  $B'_x > B_{sf}$ , o sistema passa a se encontrar na fase denominada *Spin-Flop* (SF). Neste trabalho, estamos interessados em tratar de ambas as fases.

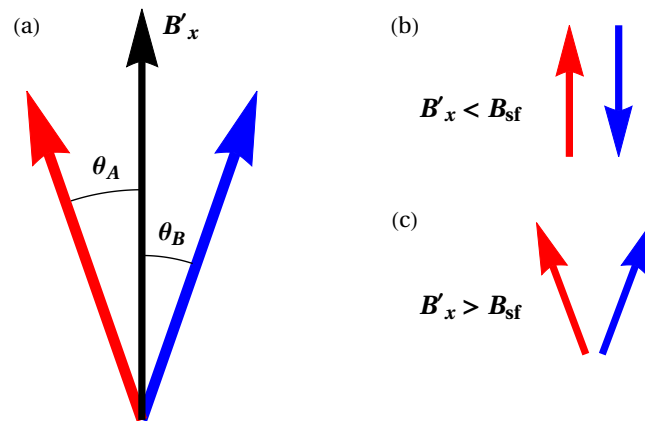


Figura 4.1: (a) Representação geral para as configurações das sub-redes. O vetor vermelho representa a sub-rede  $A$  e o azul a sub-rede  $B$ . (b) Representação da fase AF. (c) Representação da fase SF

Para trabalhar com a hamiltoniana 4.1 vamos assumir uma rotação no eixo  $z$  para reescrevermos os spins das sub-redes no referencial local, a fim de estabelecermos um campo de spin colinear,

$$\begin{aligned} S_{r,l}^{x'} &= S_{r,l}^x \cos \theta_l - S_{r,l}^y \sin \theta_l, \\ S_{r,l}^{y'} &= S_{r,l}^x \sin \theta_l + S_{r,l}^y \cos \theta_l, \\ S_{r,l}^{z'} &= S_{r,l}^z, \end{aligned} \tag{4.2}$$

onde  $r$  representa a posição da célula unitária e  $l = A, B$  indica a sub-rede tratada. Nesta rotação, assumimos um caso genérico, no qual cada sub-rede exibe um ângulo de rotação diferente, nos possibilitando tratar das duas fases existentes no material.

## 4.1 Aproximação harmônica auto-consistente

Vamos agora utilizar a AHAC tradicional para obter uma hamiltoniana quadrática. Para isso, vamos partir de uma abordagem semiclássica e reescrever a hamiltoniana 4.1 em termos dos campos  $\varphi$  e  $S^z$ , tomando as aproximações cabíveis para chegarmos na hamiltoniana desejada. Posteriormente, iremos adotar uma abordagem quântica usual, na qual quantizaremos o nosso sistema promovendo os campos à operadores.

### 4.1.1 Abordagem semiclássica

Na abordagem semiclássica, utilizamos a parametrização 2.2 para reescrever os spins da sub-redes (no referencial local) em termos dos campos  $\varphi$  e  $S^z$ , o que nos leva à hamiltoniana,

$$\begin{aligned} H = & 2J \sum_{\langle i,j \rangle} [f_i f_j (\cos \Delta\theta \cos \Delta\varphi_{ij} + \text{sen} \Delta\theta \text{sen} \Delta\varphi_{ij}) + S_i^z S_j^z] - \\ & - \sum_i \left\{ \frac{f_i^2}{2} D (\cos 2\theta_i \cos 2\varphi_i - \text{sen} 2\theta_i \text{sen} 2\varphi_i + 1) + \right. \\ & \left. + g\mu_B [f_i (B_i^x \cos \varphi_i + B_i^y \text{sen} \varphi_i) + B_i^z S_i^z] \right\}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

com  $f_i = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2}$ ,  $\Delta\theta = \theta_A - \theta_B$ ,  $\Delta\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j$  e  $\theta_i = \theta_A, \theta_B$  dependendo da sub-rede do sítio. Vamos também considerar um campo magnético estático e uniforme  $B^x \gg B_i^y, B_i^z$ . Visando obter as correções adicionais que a AHAC nos proporciona, substituiremos  $\varphi$  por  $\sqrt{\rho}\varphi$  na hamiltoniana. Para obter a hamiltoniana quadrática, adotaremos as aproximações  $\sqrt{\rho}\varphi \ll 1$  e  $S^z \ll S$ , que nos levam a

$$f_i \approx S \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{(S_i^z)^2}{S^2} \right], \quad \text{sen} \sqrt{\rho}\varphi \approx \sqrt{\rho}\varphi, \quad \cos \sqrt{\rho}\varphi \approx 1 - \frac{\rho\varphi^2}{2}, \quad (4.4)$$

onde expandimos os campos até segunda ordem. Substituindo estas expansões na equação 4.3 e tomando as transformadas de Fourier dos campos, apresentada na equação 3.5, obtemos uma hamiltoniana dividida em três partes,  $H = E_0 + H_1 + H_2$ , sendo

$$E_0 = \gamma_e \hbar N S \left[ B_E \cos \Delta\theta - \frac{B_D}{2} (\cos^2 \theta_A + \cos^2 \theta_B) - (B_A^x + B_B^x) \right], \quad (4.5)$$

a energia do estado fundamental,

$$\begin{aligned}
 H_1 = \gamma_e \hbar \sum_q \left\{ S \sqrt{\rho} \left[ \sqrt{N} \left( B_E \sin \Delta \theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_A \right) \delta_{q,0} - B_{A,q}^y \right] \varphi_{A,q} + \right. \\
 \left. + S \sqrt{\rho} \left[ \sqrt{N} \left( -B_E \sin \Delta \theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_B \right) \delta_{q,0} - B_{B,q}^y \right] \varphi_{B,q} - B_q^z (S_{A,q}^z + S_{B,q}^z) \right\} \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

um termo linear que será utilizado na construção dos estados coerentes, e

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_q \sum_{l'} [S^2 \rho \bar{\varphi}_l h_{ll'}^\varphi \varphi_{l'} + \bar{S}_l^z h_{ll'}^z S_{l'}^z], \quad (4.7)$$

a hamiltoniana quadrática, que representa as excitações do sistema, dadas por ondas de spin não interagentes, sendo  $N$  o número de sítios de cada rede,  $l, l' = A, B$ ,  $\gamma_e = g\mu_B/\hbar$  a razão giromagnética,  $B_E = 2zJS/\gamma_e\hbar$  o campo de troca,  $B_D = 2DS/\gamma_e\hbar$  o campo anisotrópico. A soma dos momentos é feita sobre a primeira zona de Brillouin. Na hamiltoniana 4.7, ocultamos o sub-índice  $q$  nos campos  $\varphi$  e  $S^z$  e nos coeficientes  $h$ . Estes coeficientes são dados por

$$h_{ll'}^\varphi = \frac{\gamma_e \hbar}{S} (-B_E \cos \Delta \theta + B_D \cos 2\theta_l + B_l^x), \quad (4.8a)$$

$$h_{ll'}^\varphi = \frac{\gamma_e \hbar}{S} B_E \cos \Delta \theta \gamma_q, \quad (4.8b)$$

$$h_{ll'}^z = \frac{\gamma_e \hbar}{S} (-B_E \cos \Delta \theta + B_D \cos^2 \theta_l + B_l^x), \quad (4.8c)$$

$$h_{ll'}^z = \frac{\gamma_e \hbar}{S} B_E \gamma_q, \quad (4.8d)$$

com  $l, l' = A, B$ ,  $l \neq l'$ . O termo  $\gamma_q = z^{-1} \sum_a e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}}$  denota o fator de estrutura da rede, definido pelos  $z$  spins primeiros vizinhos, localizados nas posições dadas pelos vetores  $\mathbf{a}$ . Usualmente, fazemos a substituição  $\varphi \rightarrow \sqrt{\rho}\varphi$  adicionando um parâmetro de renormalização para cada termo da hamiltoniana original ( $\rho_E$ ,  $\rho_D$  e  $\rho_Z$ ). Podemos optar por trabalhar como um único  $\rho$  para todos os termos, mas neste caso haverá uma perda de precisão nos resultados. Neste desenvolvimento, adotamos uma abordagem que nos permite trabalhar com um único  $\rho$ , sem ocorrer esta perda de precisão, no qual  $\rho$  é dado pela média ponderada dos parâmetros de cada termo,

$$\rho = \frac{\gamma_e \hbar}{S} \left[ \frac{-2 \cos \Delta \theta B_E \rho_E + (\cos 2\theta_A + \cos 2\theta_B) B_D \rho_D + (B_A^x + B_B^x) \rho_Z}{h_{AA}^\varphi + h_{BB}^\varphi} \right], \quad (4.9)$$

sendo  $\rho_E$  o parâmetro de renormalização de troca (*exchange*),  $\rho_D$  o anisotrópico, e  $\rho_Z$  o de Zeeman. Estes parâmetros são dados por equações auto-consistentes, que podem ser obtidas comparando a média  $\langle \dot{S}_q^z \dot{S}_{-q}^z \rangle$  calculada utilizando a hamiltoniana exata 4.3 e a hamiltoniana quadrática 4.7, ou pela desigualdade de Gibbs-Bogoliubov, como já foi

mostrado. Nesse capítulo optaremos pelo primeiro método. Estas equações serão obtidas e exploradas na seção 4.1.3.

Por meio de uma minimização da energia do estado fundamental (equação 4.5), conseguimos obter o ângulo da fase SF e o campo crítico,  $B_{sf}$ . Utilizando  $B_l^x = B'_x \cos \theta_l$ , onde estamos desconsiderando o campo oscilante ( $B'_x \gg B'_y$ ), obtemos como soluções  $\theta_A = 0$  e  $\theta_B = \pi$ , que caracteriza a fase AF, e  $\theta_A = -\theta_B = \arccos [B'_x / (2B_E - B_D)]$ , que é o ângulo entre os spins e o eixo de magnetização na fase SF. A análise da energia também nos provê o campo crítico  $B_{sf} = \sqrt{2B_E B_D - B_D^2}$ . Também podemos observar uma dependência do campo estático no ângulo da fase SF, na qual o ângulo diminui conforme aumentamos a intensidade do campo. Quando o campo estático atinge o valor  $B'_x = 2B_E - B_D$ , os spins passam a estar alinhados paralelamente com o eixo de magnetização, semelhante à um material FM. Para este valor de campo, o material passa a se encontrar na fase paramagnética (PM). Assim, um antiferromagneto possui duas transições de fase que ocorrem devido à aplicação de um campo estático: uma de primeira ordem, da fase AMF para a SF; e uma de segunda ordem, da fase SF para a PM. Um estudo dessas transições de fase não é o escopo deste trabalho e mais detalhes podem ser encontrados nas referências [76–78].

A abordagem semiclássica da AHAC nos permite obter a energia das ondas de spin a partir da hamiltoniana 4.7, sem a necessidade da quantização. Isso se dá pela utilização dos campos  $\varphi$  e  $S^z$ , que são campos canonicamente conjugados, o que nos permite fazer esta análise por meio das equações de Hamilton,  $\hbar \dot{\varphi}_l = \partial H_2 / \partial \bar{S}_l^z$  e  $\hbar \dot{S}_l^z = -\partial H_2 / \partial \bar{\varphi}_l$ . Vamos tomar a fase AF como exemplo ( $\theta_A = 0$  e  $\theta_B = \pi$ ). Neste caso,  $h_{AA}^\varphi = h_{AA}^z = h_{AA}$ ,  $h_{BB}^\varphi = h_{BB}^z = h_{BB}$  e  $-h_{AB}^\varphi = h_{AB}^z = h_{AB}$ , e obtemos pelas equações de Hamilton<sup>1</sup>,

$$\hbar \dot{\varphi}_l = \frac{\partial H_2}{\partial \bar{S}_l^z} = h_{ll} S_l^z + h_{ll'} S_{l'}^z, \quad (4.10a)$$

$$\hbar \dot{S}_l^z = -\frac{\partial H_2}{\partial \bar{\varphi}_l} = (-h_{ll} \varphi_l + h_{ll'} \varphi_{l'}) S^2 \rho, \quad (4.10b)$$

com  $l, l' = A, B$  e  $l \neq l'$ . A dinâmica do campo de spin consiste em uma precessão em torno do eixo  $x'$  (referencial do laboratório), logo, as flutuações não-localizadas estão no plano  $y'z'$ . Assim, a dinâmica do campo de spin é dado por  $S_q^{+l}(t) = S_q^{y'l}(t) + iS_q^{z'l}(t) = S_q^{+l}(0)e^{-i\omega_q^\alpha t}$  ou  $S_q^{+l}(t) = S_q^{+l}(0)e^{i\omega_q^\beta t}$ , considerando uma precessão no sentido anti-horário ou horário, respectivamente. Da equação 2.2, temos que  $S_l^y \approx S\sqrt{\rho}\varphi_l$ , e a solução não-trivial das equações de Hamilton resulta em

$$\omega_q^{\alpha,\beta} = \sqrt{\rho}\gamma_e \left[ B'_x \pm \sqrt{2B_E B_D + B_D^2 + B_E^2 (1 - \gamma_q^2)} \right], \quad (4.11)$$

para a frequência dos mágnons. Este resultado coincide com o obtido utilizando a representação de HP [79], quando adotamos  $\rho = 1$ . Iremos explorar mais essa comparação entre

<sup>1</sup>O fator  $\hbar$  surge pois os campos são adimensionais.

as duas abordagens posteriormente, mas utilizando os resultados obtidos da abordagem quântica, que será apresentada a seguir.

### 4.1.2 Abordagem quântica

Partindo para uma abordagem quântica, vamos promover os campos  $\varphi$  e  $S^z$  a operadores que satisfazem a relação de comutação  $[\varphi_i, S_j^z] = \delta_{ij}$ . Torna-se então conveniente adotar um processo semelhante ao utilizado para o oscilador harmônico, no qual reescrevemos a hamiltoniana em termos de operadores bosônicos de criação e aniquilação, definidos pela relações

$$\bar{\varphi}_{A,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{S^2 \rho} \right)^{1/4} (a_q^\dagger + a_{-q}) \quad , \quad \bar{\varphi}_{B,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{S^2 \rho} \right)^{1/4} (b_q^\dagger + b_{-q}) \quad , \quad (4.12a)$$

$$\bar{S}_{A,q}^z = \frac{i}{\sqrt{2}} (S^2 \rho)^{1/4} (a_q^\dagger - a_{-q}) \quad , \quad \bar{S}_{B,q}^z = \frac{i}{\sqrt{2}} (S^2 \rho)^{1/4} (b_q^\dagger - b_{-q}) \quad . \quad (4.12b)$$

Estes operadores respeitam as relações de comutação bosônicas  $[a_q, a_q^\dagger] = 1$ ,  $[b_q, b_q^\dagger] = 1$  e  $[a_q, b_q] = 0$ . Utilizando estes novos operadores, reescrevemos a hamiltoniana quadrática na forma matricial,

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_q X_q^\dagger \mathcal{H} X_q \quad , \quad (4.13)$$

sendo,

$$X_q^\dagger = \begin{pmatrix} a_q^\dagger & b_q^\dagger & a_{-q} & b_{-q} \end{pmatrix} \quad , \quad (4.14)$$

$$\mathcal{H}_q = \begin{pmatrix} A_a & B_q & C_a & D_q \\ B_q & A_b & D_q & C_b \\ C_a & D_q & A_a & B_q \\ D_q & C_b & B_q & A_b \end{pmatrix} \quad , \quad (4.15)$$

com os coeficientes sendo dados por,

$$A_l = \frac{\sqrt{\rho} \tilde{S}}{2} (h_{ll}^\varphi + h_{ll}^z) \quad , \quad C_l = \frac{\sqrt{\rho} \tilde{S}}{2} (h_{ll}^\varphi - h_{ll}^z) \quad ,$$

$$B_q = \frac{\sqrt{\rho} \tilde{S}}{2} (h_{AB}^\varphi + h_{AB}^z) \quad , \quad D_q = \frac{\sqrt{\rho} \tilde{S}}{2} (h_{AB}^\varphi - h_{AB}^z) \quad ,$$

onde substituímos  $S$  por  $\tilde{S} = \sqrt{S(S+1)}$ , otimização adotada quando estamos lidando com pequenos valores de spin no regime quântico, que surge naturalmente da representação de Villain, conforme visto na seção 3.1. O espectro de energia dos mágnons é dado pelos autovalores da hamiltoniana 4.15. Para obtermos estes autovalores, vamos diagonalizar a hamiltoniana por meio de uma transformação de Bogoliubov, que consiste em uma transformação linear nos operadores de criação e aniquilação que preserva as suas relações

de comutação [80,81]. Assim, definimos novos operadores  $\alpha_q$  e  $\beta_q$  por meio da transformação linear  $X_q = T_q \Psi_q$ , sendo

$$\Psi_q^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha_q^\dagger & \beta_q^\dagger & \alpha_{-q} & \beta_{-q} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

As relações de comutação dos operadores  $a_q$  e  $b_q$  podem ser escritas como  $[X_q, X_q^\dagger] = G$ , sendo  $G = \sigma_z \otimes I$ , onde utilizados  $\sigma_z$  para indicar a matriz  $z$  de Pauli. Assim, para manter a validade da relação, a matriz de transformação,  $T_q$ , deve obedecer a relação  $T_q G T_q^\dagger = G$ . Desta forma, a matriz de transformação pode ser escrita como

$$T_q = \begin{pmatrix} U_q & V_q \\ \bar{V}_q & \bar{U}_q \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

sendo  $U_q = [u_{mn}]$  e  $V_q = [v_{mn}]$  matrizes quadradas bidimensionais. Utilizando esta transformação, reescrevemos a hamiltoniana 4.13 na forma,

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_q X_q^\dagger \mathcal{H} X_q = \frac{1}{2} \sum_q \Psi_q^\dagger (T_q^\dagger \mathcal{H} X_q T_q) \Psi_q = \frac{1}{2} \sum_q \Psi_q^\dagger \Omega_q \Psi_q, \quad (4.18)$$

com

$$\Omega_q = \begin{pmatrix} \epsilon_q^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_q^\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_q^\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_q^\beta \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

sendo  $\epsilon_q^\alpha$  e  $\epsilon_q^\beta$  os dois possíveis espectros de energia dos mágnons. Encontrar uma transformação geral que diagonaliza a hamiltoniana 4.15 não se mostrou viável, mas este processo é facilitado quando especificamos a fase analisada devido à simplificações que surgem nos termos da matriz. Outro ponto a se destacar é que a formulação matricial que foi apresentada é geral e pode ser utilizada para qualquer hamiltoniana que possa ser escrita na forma 4.13.

**Fase AF:** Na fase AF, temos  $\theta_A = 0$  e  $\theta_B = \pi$ , o que resulta em  $B_q = C_a = C_b = 0$ . Assim, obtemos uma hamiltoniana quadrática por meio da transformação

$$U_q = \cosh \Theta_q I \quad , \quad V_q = \sinh \Theta_q \sigma_x, \quad (4.20)$$

com

$$\tanh 2\Theta_q = -\frac{2D_q}{A_a + A_b} = \frac{B_E \gamma_q}{B_E + B_D}. \quad (4.21)$$

Utilizando esta transformação em 4.18, obtemos

$$H_{AF} = E_0^{AF} + \sum_q (\epsilon_q^\alpha \alpha_q^\dagger \alpha_q + \epsilon_q^\beta \beta_q^\dagger \beta_q), \quad (4.22)$$

sendo  $E_0^{AF} = E_0 + \sum_q (\hbar\omega_q/2)$  uma constante associada à energia do estado fundamental,

$$\epsilon_q^\alpha = \sqrt{\rho}\gamma_e\hbar B'_x + \hbar\omega_q, \quad (4.23a)$$

$$\epsilon_q^\beta = -\sqrt{\rho}\gamma_e\hbar B'_x + \hbar\omega_q, \quad (4.23b)$$

e

$$\omega_q = \sqrt{\rho}\gamma_e\sqrt{2B_E B_D + B_D^2 + B_E^2(1 - \gamma_q^2)}. \quad (4.24)$$

Os resultados coincidem com o caso semiclássico. A diferença entre os dois casos está no parâmetro de renormalização, como veremos posteriormente.

**Fase SF:** Adotando  $\theta_A = -\theta_B = \theta$  e  $B'_y, B'_z \ll B'_x$  (consideração que condiz com experimentos de spintrônica), obtemos

$$A_a = A_b = A = \sqrt{\rho}\gamma_e\hbar [-B_E \cos 2\theta + B_D (\cos^2 \theta + \cos 2\theta) / 2 + B'_x \cos \theta],$$

$$B_q = \sqrt{\rho}\gamma_e\hbar B_E \gamma_q \cos^2 \theta,$$

$$C_a = C_b = C = -\sqrt{\rho}\gamma_e\hbar (B_D \sin^2 \theta) / 2,$$

$$D_q = -\sqrt{\rho}\gamma_e\hbar B_E \gamma_q \sin^2 \theta.$$

A hamiltoniana é diagonalizada pela transformação

$$U_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cosh \Xi_q & \cosh \Phi_q \\ -\cosh \Xi_q & \cosh \Phi_q \end{pmatrix}, \quad V_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sinh \Xi_q & \sinh \Phi_q \\ \sinh \Xi_q & \sinh \Phi_q \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Os ângulos  $\Xi_q$  e  $\Phi_q$  são determinados com o propósito de eliminar os termos não diagonais. Assim, obtemos

$$\tanh \Xi_q = \sqrt{\frac{A - B_q - \epsilon_q^\alpha}{A - B_q + \epsilon_q^\alpha}}, \quad \tanh \Phi_q = \sqrt{\frac{A + B_q - \epsilon_q^\beta}{A + B_q + \epsilon_q^\beta}}, \quad (4.26)$$

com as energias dos mágnons sendo dadas por

$$\epsilon_q^\alpha = \sqrt{(A - B_q)^2 - (C - D_q)^2}, \quad (4.27a)$$

$$\epsilon_q^\beta = \sqrt{(A + B_q)^2 - (C + D_q)^2}. \quad (4.27b)$$

Obtemos então a seguinte hamiltoniana quadrática para a fase SF,

$$H_{SF} = E_0^{SF} + \sum_q (\epsilon_q^\alpha \alpha_q^\dagger \alpha_q + \epsilon_q^\beta \beta_q^\dagger \beta_q), \quad (4.28)$$

sendo  $E_0^{SF} = E_0 + \sum_q (\epsilon_q^\alpha + \epsilon_q^\beta) / 4$ . Os resultados também coincidem com os obtidos por meio da representação de HP [82], com a vantagem das correções adicionadas por meio do parâmetro de renormalização.

### 4.1.3 Parâmetro de renormalização

Todos os resultados obtidos, tanto na abordagem semiclássica quanto na quântica, contêm o parâmetro de renormalização  $\rho$ , dado pela equação 4.9. Para determinarmos este parâmetro, vamos primeiro buscar equações que nos permitam obter os parâmetro  $\rho_E$ ,  $\rho_D$  e  $\rho_Z$ , comparando a média  $\left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_q^z \right\rangle$  calculada por meio da hamiltoniana exata 4.3 e por meio da hamiltoniana quadrática 4.7, sendo  $(\mathbf{S}_q^z)^\dagger = (S_{A,q}^z \ S_{B,q}^z)$ . Partindo da hamiltoniana quadrática, temos

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_q^z \right\rangle_G = \left\langle \frac{\partial H_2}{\partial \varphi_{A,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\varphi}_{A,q}} + \frac{\partial H_2}{\partial \varphi_{B,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\varphi}_{B,q}} \right\rangle_G = \frac{1}{\beta} (h_{AA,q}^\varphi + h_{BB,q}^\varphi) S^2 \rho, \quad (4.29)$$

onde estamos utilizando a notação  $\langle \dots \rangle_G$  para indicar a média Gaussiana calculada utilizando a hamiltoniana quadrática, com  $\beta = 1/k_B T$ .

Utilizando a hamiltoniana exata, podemos realizar uma integração por partes para reescrever essa média na forma

$$\begin{aligned} \hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_r^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_{r'}^z \right\rangle_G &= \frac{1}{\beta} \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi_{A,r} \partial \varphi_{A,r'}} + \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi_{B,r} \partial \varphi_{B,r'}} \right\rangle_G \\ &= \frac{\gamma_e \hbar}{\beta S} [-2B_E \cos \Delta\theta \langle f_A f_B \rangle_G \langle \cos \Delta\varphi \rangle_G + B_D (\cos 2\theta_A \langle f_A^2 \rangle_G \langle \cos 2\varphi_A \rangle_G + \\ &\quad + \cos 2\theta_B \langle f_B^2 \rangle_G \langle \cos 2\varphi_B \rangle_G) + B_A^x S \langle f_A \rangle_G \langle \cos \varphi_A \rangle_G + B_B^x S \langle f_B \rangle_G \langle \cos \varphi_B \rangle_G], \quad (4.30) \end{aligned}$$

onde  $f_l = \sqrt{S^2 - (S_l^z)^2}$  e separamos as médias pois  $\varphi$  e  $S^z$  são distribuições gaussianas independentes. As médias observadas na equação 4.30 são calculadas utilizando a hamiltoniana quadrática. Comparando os resultados das equações 4.29 e 4.30, e utilizando  $\langle \cos \varphi \rangle_G = \exp(-\langle \varphi^2 \rangle_G / 2)$ , obtemos as equações dos parâmetros  $\rho_E$ ,  $\rho_D$  e  $\rho_Z$ ,

$$\rho_E = \left( 1 - \frac{\langle (S_A^z)^2 \rangle_G}{2S^2} - \frac{\langle (S_B^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \Delta\varphi^2 \rangle_G \right), \quad (4.31a)$$

$$\rho_D = \left( \sum_l \cos 2\theta_l \right)^{-1} \sum_l \cos 2\theta_l \left( 1 - \frac{\langle (S_l^z)^2 \rangle_G}{S^2} \right) \exp(-2 \langle \varphi_l^2 \rangle_G), \quad (4.31b)$$

$$\rho_Z = \left( \sum_l \cos \theta_l \right)^{-1} \sum_l \cos \theta_l \left( 1 - \frac{\langle (S_l^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \varphi_l^2 \rangle_G \right), \quad (4.31c)$$

onde expandimos os termos  $f_l$ , pois  $S^z \ll S$ . Podemos ver na equação 4.9 que  $\rho_Z$  não contribui para o  $\rho$  efetivo na fase AF, sendo assim, iremos desconsiderar a equação desse termo nessa fase. Na fase SF, as equações de  $\rho_D$  e  $\rho_Z$  se tornam a média aritmética da equação de cada sub-rede. Como os valores esperados dependem dos parâmetros de renormalização, estas equações são resolvidas de forma auto-consistente.

Obtivemos estas equações por meio de uma análise semiclássica, mas também podemos chegar no mesmo resultado por meio da abordagem quântica tradicional. De forma prática, a diferença entre as duas está na forma em que calculamos as médias e na hamiltoniana quadrática utilizada. A dependência de temperatura do parâmetro  $\rho$  em ambos os casos é mostrada na figura 4.2. Neste gráfico, podemos observar uma diferença nos valores do parâmetro de renormalização em cada caso. Isto ocorre pois, quando utilizamos a abordagem quântica, a estatística quântica adotada possibilita um melhor refinamento do comportamento quântico do sistema, mesmo não possuindo a correção quântica obtida na AHACQ, levando à uma redução significativa do valor de  $\rho$ , mesmo em  $T = 0$ . Também podemos observar no gráfico que ambos os  $\rho$  apresentam o comportamento térmico descrito na seção 2.1, onde estão limitados entre  $T = 0$  e  $T = T_c$ , sendo esta última a temperatura crítica em que o parâmetro cai abruptamente para zero, que associamos à temperatura de Néel do sistema, na qual o material AFM sofre uma transição para a fase PM.

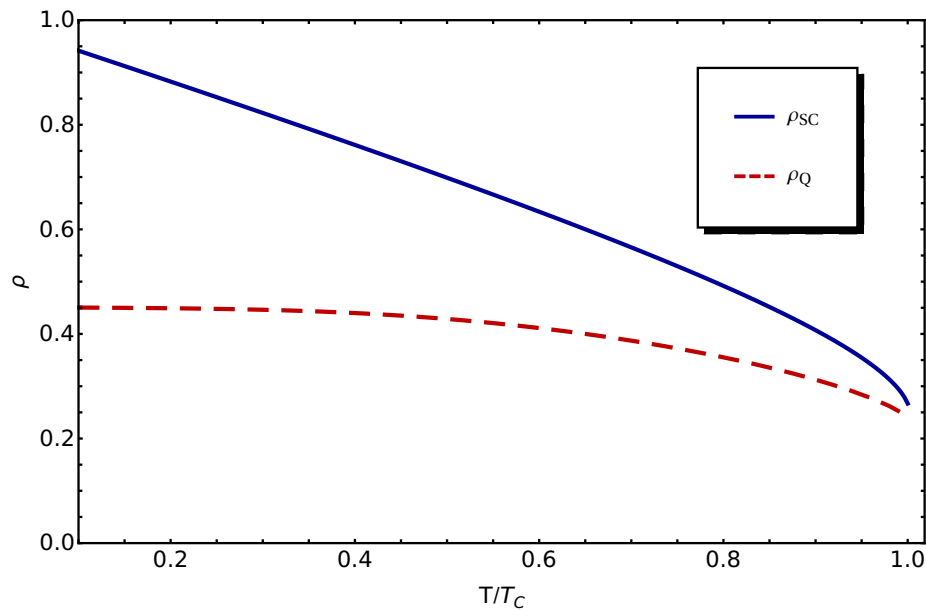


Figura 4.2: Gráfico do parâmetro de renormalização em função da temperatura reduzida  $T/T_c$  na fase AF, na ausência de campo magnético. A linha azul indica o parâmetro  $\rho_{SC}$  obtido por meio da abordagem semiclássica, enquanto a linha tracejada vermelha indica o  $\rho_Q$  obtido por meio da abordagem quântica. Neste gráfico utilizamos  $J/k_B = 1$  K,  $D = 0,1J$ ,  $S = 1$  e  $z = 6$

Apesar do comportamento observado para temperaturas próximas de  $T_c$ , a AHAC apresenta ótimos resultados para  $T < T_c$ , além de incluir esta dependência da temperatura de forma bem mais simples que outros modelos usuais. Para examinar a efetividade

da AHAC em um estudo termodinâmico dos sistemas que estamos interessados, vamos utilizar os resultados obtidos para analisarmos alguns comportamentos de três materiais antiferromagnéticos:  $\text{MnF}_2$ ,  $\text{FeF}_2$  e  $\text{RbMnF}_3$ . As interações relevantes nestes materiais são a interação de troca entre primeiros vizinhos e a anisotropia de sítio único, com exceção do  $\text{RbMnF}_3$  que possui anisotropia muito fraca e pode ser ignorada. Para o  $\text{MnF}_2$ , que já foi explorado na seção 3.3, iremos ignorar a interação que existe entre spins no eixo de magnetização, devido à sua intensidade fraca. Este material e o  $\text{FeF}_2$  possuem spin  $S = 5/2$  e  $S = 2$ , respectivamente, e exibem estrutura tetragonal de corpo centrado. O  $\text{RbMnF}_3$  possui spin  $S = 5/2$  e uma estrutura que pode ser considerada cúbica simples, devido à fraca anisotropia. Estes materiais exibem temperatura de Néel 67,2 K ( $\text{MnF}_2$ ), 78,4 K ( $\text{FeF}_2$ ) e 83 K ( $\text{RbMnF}_3$ ) [83–85]. Associando a temperatura crítica  $T_c$  com a temperatura de Néel, podemos utilizar a AHAC para estimar estes valores. Adicionalmente, para otimizar os resultados, optamos por obter os valores de  $J$  e  $D$  que melhor ajustam os dados experimentais aos resultados da AHAC [54]. A tabela 4.1 apresenta os valores obtidos, e podemos ver que a abordagem quântica da AHAC nos oferece valores que concordam muito bem com os experimentais.

Material	AHAC-SC	AHAC-Q	Exp.
$\text{MnF}_2$	49,3 K	65,9 K	67,2 K
$\text{FeF}_2$	54,5 K	78,6 K	78,4 K
$\text{RbMnF}_3$	63,6 K	83,9 K	83,0 K

Tabela 4.1: Temperatura de Néel obtida por meio das abordagens semiclássica (SC) e quântica (Q) da AHAC para o  $\text{MnF}_2$ , o  $\text{FeF}_2$  e o  $\text{RbMnF}_3$ . A última coluna exhibe os valores experimentais, retirados das referências [83–85].

Como já foi dito anteriormente, a representação de HP também pode ser utilizada para analisar a termodinâmica de sistemas magnéticos por meio de uma renormalização da energia das ondas de spin, feita por meio dos termos de interação entre mágnons (termos de quarta ordem na hamiltoniana) [86]. Nas figura 4.3 e 4.4 vemos uma comparação entre o espectro de energia renormalizado para diferentes temperatura por meio da AHAC e da representação de HP. Nesses resultados, vemos que a AHAC mostra uma ótima concordância com os dados experimentais, utilizando um processo bem mais simples de ser implementado que o formalismo de HP interagente.

## 4.2 Estados coerentes

O fenômeno de ressonância pode ser induzido por meio das componentes transversais do campo magnético, que em nossa construção consistem em campos oscilantes. Como vimos nas equações 4.23 e 4.27, a frequência dos mágnons depende da intensidade do campo estático (componente do campo perpendicular à oscilantes), assim, para atingirmos

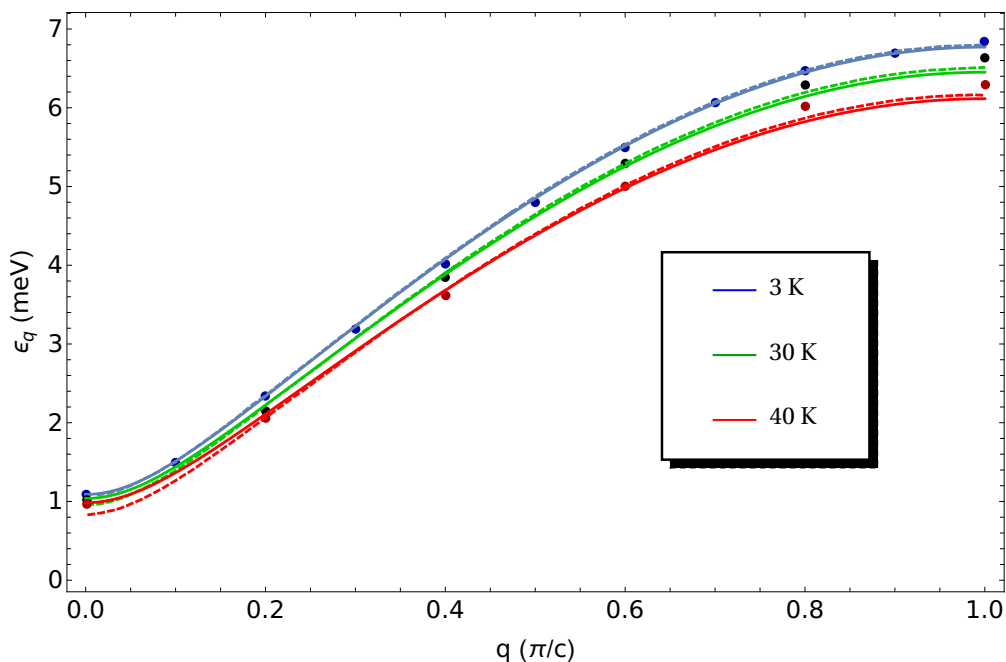


Figura 4.3: O espectro de energia renormalizado obtido via AHAC (linhas) e HP interagente (tracejados) para o  $\text{MnF}_2$ . Os pontos indicam valores experimentais retirados de [87]. O número de onda é medido na direção  $x$  e as curvas indicam temperatura de 3 K (azul), 30 K (verde) e 40 K (vermelha).

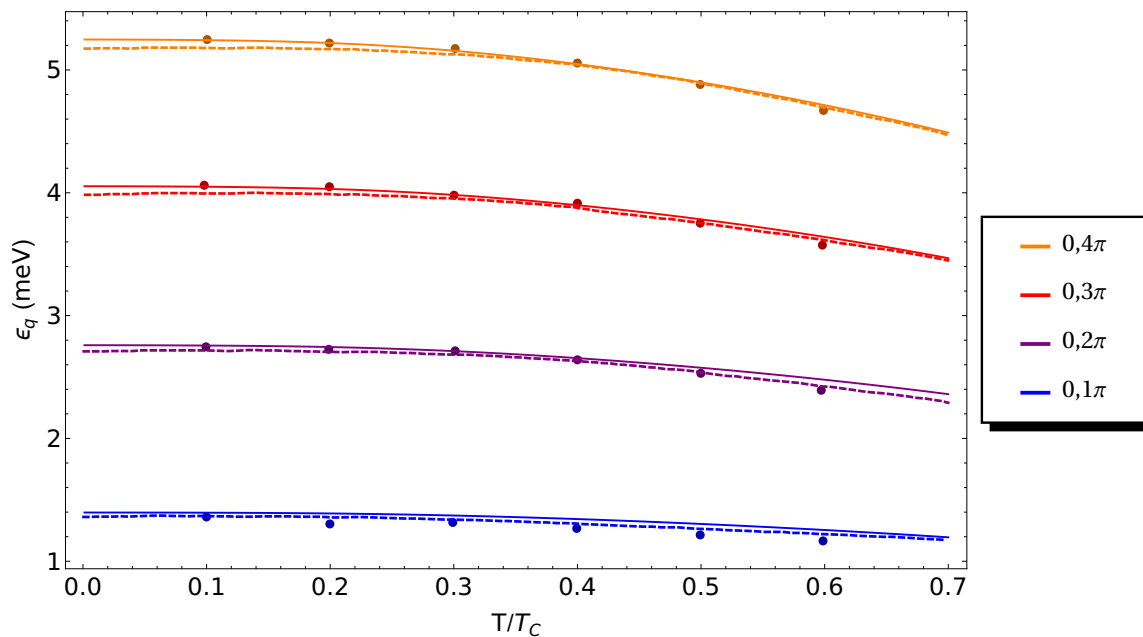


Figura 4.4: O espectro de energia renormalizado obtido via AHAC (linhas) e HP interagente (tracejados) para o  $\text{RbMnF}_3$ . Os pontos indicam valores experimentais retirados de [85]. As curvas indicam  $aq$  igual a  $0,1\pi$  (azul),  $0,2\pi$  (roxa),  $0,3\pi$  (vermelha) e  $0,4\pi$  (laranja).

a condição de ressonância, mantemos a frequência do campo oscilante constante,  $\Omega$ , e ajustamos o campo estático até a energia dos mágnons no centro da zona de Brillouin ( $q = 0$ ) seja  $\hbar\Omega$ . Quando esta condição é satisfeita, todo o sistema passa a exibir uma dinâmica síncrona. Uma descrição dessa dinâmica de precessão não é possível se utilizarmos os auto-estados de energia, pois  $\langle S^y \rangle_G = \langle S^z \rangle_G = 0$ . Assim, para podermos analisar a dinâmica do sistema, precisamos utilizar o formalismo dos estados coerentes.

Vamos definir dois EC por meio da definição 2.6,  $\alpha |\eta^\alpha\rangle = \eta^\alpha |\eta^\alpha\rangle$  e  $\beta |\eta^\beta\rangle = \eta^\beta |\eta^\beta\rangle$ , onde estamos considerando um estado para cada modo do AFM. Da definição 2.8, temos  $|\eta^\alpha\rangle = D(\eta_\alpha) |0\rangle$  e  $|\eta^\beta\rangle = D(\eta_\beta) |0\rangle$ , sendo os operadores deslocamento dados por  $D(\eta_\alpha) = \exp(\eta^\alpha \alpha^\dagger - \bar{\eta}^\alpha \alpha)$  e  $D(\eta_\beta) = \exp(\eta^\beta \beta^\dagger - \bar{\eta}^\beta \beta)$ . Com essa construção, para definirmos os estados coerente, basta obtermos os operadores deslocamento. Para isto, utilizaremos o termo linear da hamiltoniana como uma perturbação, que contém as componentes oscilantes do campo magnético.

Tomando a equação 4.6, promovendo os campos a operadores e utilizando as relações 4.12, conseguimos reescrever o termo linear da hamiltoniana em termos dos operadores bosônicos de criação e aniquilação,

$$H_1(t) = \sum_q [f_q^A(t) a_q^\dagger + \bar{f}_q^A(t) a_q + f_q^B(t) b_q^\dagger + \bar{f}_q^B(t) b_q] , \quad (4.32)$$

sendo

$$f_q^A(t) = \sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \left[ \sqrt{N} \left( B_E \sin\Delta\theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_A \right) \delta_{q,0} - B_{A,q}^y(t) - i B_{A,q}^z(t) \right] \gamma_e \hbar \rho^{1/4} , \quad (4.33a)$$

$$f_q^B(t) = \sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \left[ \sqrt{N} \left( -B_E \sin\Delta\theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_B \right) \delta_{q,0} - B_{B,q}^y(t) - i B_{B,q}^z(t) \right] \gamma_e \hbar \rho^{1/4} . \quad (4.33b)$$

Podemos tratar  $H_1(t)$  como um potencial dependente do tempo e então utilizar o formalismo de interação para construir os EC, seguindo o procedimento apresentado na seção 2.2. Para proceder com os cálculos precisamos especificar a fase analisada, a fim de adotarmos as transformações corretas para reescrevermos a hamiltoniana 4.32 em termos dos operadores  $\alpha$  e  $\beta$ .

**Fase AF:** Utilizando  $\theta_A = 0$  e  $\theta_B = \pi$ , os coeficientes dados pela equação 4.33 são reescritos como  $f_q^A(t) = f_q(t)$  e  $f_q^B(t) = -\bar{f}_q(t)$ , onde

$$f_q(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \hbar \rho^{1/4} B_q^{'+}(t) , \quad (4.34)$$

com  $B_q^{'+}(t) = B_q^{y'}(t) + iB_q^{z'}(t)$ . Utilizando a equação 4.20, obtemos  $S(t) = D(\eta_q^\alpha) D(\eta_q^\beta)$ , onde

$$D(\eta_q^\alpha) = \prod_q \exp(\eta_q^\alpha \alpha_q^\dagger - \bar{\eta}_q^\alpha \alpha_q), \quad (4.35a)$$

$$D(\eta_q^\beta) = \prod_q \exp(\eta_q^\beta \beta_q^\dagger - \bar{\eta}_q^\beta \beta_q). \quad (4.35b)$$

Assim, obtemos os seguintes autovalores para os EC,

$$\eta_q^\alpha(t) = \sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \rho^{1/4} e^{-\Theta_q} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^{'+}(\nu) e^{i(\omega_q^\alpha - \nu)t}}{\omega_q^\alpha - \nu - i\varepsilon_q}, \quad (4.36a)$$

$$\eta_q^\beta(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \rho^{1/4} e^{-\Theta_q} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^{-}(\nu) e^{i(\omega_q^\beta - \nu)t}}{\omega_q^\beta - \nu - i\varepsilon_q}, \quad (4.36b)$$

sendo  $\tilde{B}_q^{'+}(\nu)$  a transformada de Fourier do campo magnético e  $\varepsilon_q \ll \omega_q$  é um parâmetro infinitesimal adicionado para garantir a convergência no limite  $t \rightarrow \infty$ . Este parâmetro desempenha o mesmo papel de um termo de amortecimento, que não foi considerado inicialmente mas pode ser acrescentado por meio de uma análise fenomenológica. Note que  $\varepsilon_q$  mede a dissipação de mágnons no limite de longos comprimentos de onda, em baixas temperaturas. Os estados coerentes da fase AF são dados por  $|\eta_q^\alpha \eta_q^\beta\rangle = D(\eta_q^\alpha) D(\eta_q^\beta) |0\rangle$ .

**Fase SF:** Para a fase SF,  $\theta_A = -\theta_B = \theta$ , e os coeficientes 4.33 são reescritos como

$$f_q^A(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \hbar \rho^{1/4} [\cos \theta B_q^{y'}(t) + iB_q^{z'}(t) - B_0], \quad (4.37a)$$

$$f_q^B(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \hbar \rho^{1/4} [\cos \theta B_q^{y'}(t) + iB_q^{z'}(t) + B_0], \quad (4.37b)$$

com  $B_0 = \sqrt{N} [-(B_E - B_D/2) \text{sen}2\theta + B'_x \text{sen}\theta] \delta_{q,0}$ . Seguindo o mesmo procedimento da fase AF, mas utilizando a transformação 4.25, obtemos  $S(t) = D(\eta_q^\alpha) D(\eta_q^\beta)$ , onde os operadores deslocamento são dados pela equação 4.35, e os autovalores dos EC são dados por

$$\eta_q^\alpha(t) = -\sqrt{\tilde{S}} \gamma_e \rho^{1/4} \frac{e^{-\Xi_q} B_0 e^{i\omega_q^\alpha t}}{\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q}, \quad (4.38a)$$

$$\eta_q^\beta(t) = \sqrt{\tilde{S}} \gamma_e \rho^{1/4} \int \frac{d\nu}{2\pi} \left( \frac{e^{\Phi_q} \cos \theta \tilde{B}_q^{y'}(\nu) + i e^{-\Phi_q} \tilde{B}_q^{z'}(\nu)}{\omega_q^\beta - \nu - i\varepsilon_q} \right) e^{i\omega_q^\beta t}. \quad (4.38b)$$

Podemos ver pelas equações 4.38 que o autovalor do modo  $\alpha$  depende apenas do campo estático. Ao considerarmos que este campo é uniforme, o modo  $\alpha$  irá englobar apenas os

mágnons do centro da zona de Brillouin ( $q = 0$ ), que possuem  $\epsilon_0^\alpha = 0$ . Neste caso,  $\Xi_0 \rightarrow \infty$  e  $\eta_0^\alpha \rightarrow 0$ , resultando em uma ausência de coerência no modo  $\alpha$ . Para um modelo com anisotropia de plano fácil, uma construção semelhante a esta nos permite observar um valor finito para  $\eta_0^\alpha$ , porém desprezível. Assim, mesmo neste cenário, a dinâmica coerente oscilante continua sendo exclusiva do modo  $\beta$ .

Uma referência que utilizamos para comparar os nossos resultados foi o trabalho de S. M. Rezende [79], no qual ele estuda a coerência da fase SF utilizando o formalismo de HP. Apesar de ser um trabalho bem difundido, a análise de S. M. Rezende não leva em consideração as peculiaridades de cada modo. Assim, obtivemos resultados mais completos e detalhados da coerência da fase SF. Nossos resultados coincidem com um versão renormalizada dos resultados obtidos por A. R. Moura, utilizando a representação de HP e considerando a diferença na coerência de cada modo [82].

### 4.2.1 Nível de coerência, dinâmica de precessão e susceptibilidades

Como discutido na seção 2.2, no fenômeno de ressonância, uma parte dos mágnons do sistema,  $n_{EC} = |\eta|^2$ , passam a ocupar um único estado quântico, dado por  $|\eta\rangle$ . Na fase AF, adotando um campo oscilante monocromático, uniforme e polarizado circularmente, definido por  $\mathbf{B}_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}} \left[ \cos(\Omega t) \hat{j}' + \sin(\Omega t) \hat{k}' \right]$ , que é escrito no espaço de frequências como  $\tilde{B}_q^\pm(\nu) = 2\pi\sqrt{N}B_{\text{rf}}\delta_{q,0}\delta(\nu \mp \Omega)$ , conseguimos estimar o número de mágnons em cada modo,  $\alpha$  e  $\beta$ ,

$$N_\alpha = \frac{\sqrt{\rho}}{2} e^{-2\Theta_0} \left| \frac{\gamma_e B_{\text{rf}}}{\Omega - \omega_0^\alpha + i\varepsilon_0} \right|^2 N\tilde{S}, \quad (4.39a)$$

$$N_\beta = \frac{\sqrt{\rho}}{2} e^{-2\Theta_0} \left| \frac{\gamma_e B_{\text{rf}}}{\Omega + \omega_0^\beta + i\varepsilon_0} \right|^2 N\tilde{S}. \quad (4.39b)$$

Podemos adotar um campo orientado no sentido horário ou anti-horário, resultando em duas possíveis condições de ressonância:  $\Omega = \omega_0^\alpha$  ou  $\Omega = -\omega_0^\beta$ . No primeiro caso,  $N_\alpha \gg N_\beta$ , já no segundo,  $N_\alpha \ll N_\beta$ . Assim, cada condição de ressonância excita exclusivamente um dos modos. Em ambos os casos, a população de mágnons no estado coerente (**nível de coerência**) é dada por

$$N_m^{AF} = \frac{\sqrt{\rho}}{2} e^{-2\Theta_0} \left( \frac{\gamma_e B_{\text{rf}}^r}{\varepsilon_0^r} \right)^2 N\tilde{S}, \quad (4.40)$$

onde estamos utilizando a notação  $B^r = \sqrt{\rho}B$  para representar uma grandeza renormalizada. Devido a inclusão do parâmetro  $\rho$ , essa renormalização indica a dependência de temperatura do nosso resultado.

No caso da fase SF, sabemos que o modo  $\alpha$  é irrelevante, então estamos interessados em investigar apenas o modo  $\beta$ . Adotando o mesmo campo que utilizamos na fase AF, obtemos  $\tilde{B}_q^{y'}(\nu) = B_q^{\text{rf}} [\delta(\nu + \Omega) + \delta(\nu - \Omega)]$  e  $\tilde{B}_q^{z'}(\nu) = iB_q^{\text{rf}} [\delta(\nu + \Omega) - \delta(\nu - \Omega)]$ , com

$B_q^{\text{rf}} = \pi\sqrt{N}B_{\text{rf}}\delta_{q,0}$ . Novamente, podemos adotar o campo em duas possíveis orientações, que vão nos levar às seguintes populações de mágnons,

$$N_m^{SF(L)} = \sqrt{\rho} (e^{\Phi_0} \cos \theta + e^{-\Phi_0})^2 \left( \frac{\gamma_e B_{\text{rf}}^r}{2\varepsilon_0^r} \right)^2 N\tilde{S}, \quad (4.41a)$$

$$N_m^{SF(R)} = \sqrt{\rho} (e^{\Phi_0} \cos \theta - e^{-\Phi_0})^2 \left( \frac{\gamma_e B_{\text{rf}}^r}{2\varepsilon_0^r} \right)^2 N\tilde{S}, \quad (4.41b)$$

onde estamos utilizando o índice  $L$  para indicar o sentido horário e  $R$  para o sentido anti-horário. Na figura 4.5, vemos como os níveis de coerência de ambas as fases mudam com a temperatura para o  $\text{MnF}_2$ . Neste gráfico, utilizamos os valores obtidos para as constantes de interação  $J$  e  $D$  por meio do processo de otimização mencionado anteriormente. Também utilizamos  $\varepsilon_0^r \approx 0,1$  GHz [88], e  $B_{\text{rf}}^r$  na ordem de mili-Tesla, para satisfazer  $\gamma_e B_{\text{rf}}^r = \varepsilon_0^r$ . Devido ao campo magnético intenso, a fase SF exibe uma temperatura de Néel menor que a da fase AF [76].

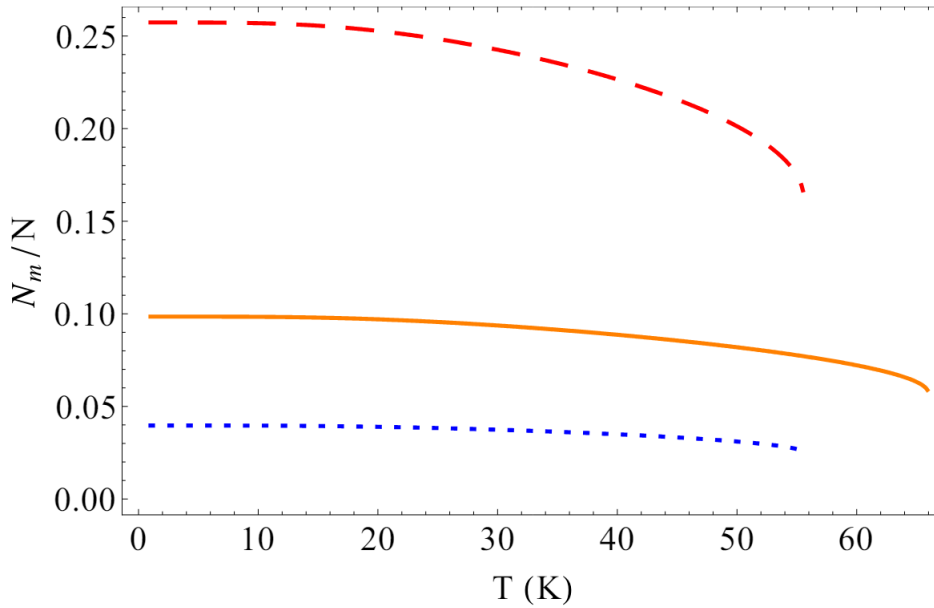


Figura 4.5: Nível de coerência  $N_m$  para o  $\text{MnF}_2$ . A curva laranja representa a fase AF, enquanto a tracejada vermelha e a azul indicam  $N^{SF(R)}$  e  $N^{SF(L)}$ , respectivamente.

Os mágnons que ocupam os níveis de coerência descritos acima, podem ser representados por um campo de spins precessionando de forma síncrona em torno do eixo de magnetização. Com os estados coerentes, podemos analisar a **dinâmica de precessão** das componentes transversais deste campo, por meio do valor esperado

$$\langle S_q^{(y,z)'}(t) \rangle = \langle \eta_q^\alpha \eta_q^\beta | \hat{S}_q^{(y,z)'}(t) | \eta_q^\alpha \eta_q^\beta \rangle. \quad (4.42)$$

Para a fase AF, obtemos

$$\langle S_{A,q}^+(t) \rangle = \sqrt{2\tilde{S}\rho^{1/4}} \left( \eta_q^\alpha \cosh \Theta_q e^{-i\omega_q^\alpha t} + \bar{\eta}_q^\beta \sinh \Theta_q e^{i\omega_q^\beta t} \right), \quad (4.43a)$$

$$\langle S_{B,q}^+(t) \rangle = -\sqrt{2\tilde{S}\rho^{1/4}} \left( \eta_q^\alpha \sinh \Theta_q e^{-i\omega_q^\alpha t} + \bar{\eta}_q^\beta \cosh \Theta_q e^{i\omega_q^\beta t} \right), \quad (4.43b)$$

onde utilizamos  $\theta_A = 0$ ,  $\theta_B = \pi$  e as equações 2.2, 4.12 e 4.20. Na fase SF, obtemos

$$\langle S_q^y(t) \rangle = \sqrt{\tilde{S}\rho^{1/4}} e^{\Phi_q} |\eta_q^\beta| \cos(\omega_q^\beta t - \phi_q^\beta), \quad (4.44a)$$

$$\langle S_q^z(t) \rangle = -\sqrt{\tilde{S}\rho^{1/4}} e^{-\Phi_q} |\eta_q^\beta| \sin(\omega_q^\beta t - \phi_q^\beta), \quad (4.44b)$$

onde desconsideramos o modo  $\alpha$ , o que nos levou a  $\langle \mathbf{S}_{A,q}(t) \rangle = \langle \mathbf{S}_{B,q}(t) \rangle$ , e utilizamos as equações 2.2, 4.12 e 4.25, além de  $S^y \approx \tilde{S}\sqrt{\rho}\varphi_q$ . O parâmetro  $\phi_q^\beta$  surge da transformação 4.25. Ambos os resultados mostram o comportamento oscilatório das componentes transversais do campo de spin, e coincidem com os resultados conhecidos, com a vantagem de conter o parâmetro de renormalização  $\rho$ .

Utilizando os EC também podemos obter a **susceptibilidade magnética** do sistema, uma grandeza importante em experimentos de ressonância. Para isto, vamos analisar os valores esperados dos campos de spin no referencial do laboratório. A susceptibilidade será obtida a partir das relações  $\mathbf{B}' = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}')$  e  $\mathbf{M} = \chi_q \mathbf{H}'$ , nas quais definimos a magnetização do sistema como  $M_q(t) = (g\mu_B/V_a) \langle S_q'(t) \rangle$ , sendo  $V_a$  o volume da célula unitária. Na fase AF, definimos  $\langle S_q'^+(t) \rangle = \langle S_{A,q}^+(t) \rangle + \langle S_{B,q}^+(t) \rangle = \sqrt{2\tilde{S}\rho^{1/4}} e^{-\Theta_q} \left[ \eta_q^\alpha(t) e^{-i\omega_q^\alpha t} - \bar{\eta}_q^\beta(t) e^{i\omega_q^\beta t} \right]$ , assim a magnetização será dada por (no espaço dos momentos),

$$\tilde{M}_q^+ = \frac{M_s \gamma_e e^{-2\Theta_q} (\omega_q^\alpha + \omega_q^\beta)}{(\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q - \Omega) (\omega_q^\beta + i\varepsilon_q + \Omega)} \tilde{B}_q'^{r+}, \quad (4.45)$$

sendo  $M_s = g\mu_B \tilde{S}/V_a$  denominada magnetização de saturação. Como  $\chi \ll 1$ , podemos escrever  $\mathbf{B}' \approx \mu_0 \mathbf{H}'$ , o que resulta em  $\tilde{M}_q^+ = \chi_q^+ \tilde{H}_q'^{r+}$ , sendo

$$\chi_q^+(\Omega) = \frac{2\mu_0 M_s \gamma_e^2 [B_D^r + B_E^r (1 - \gamma_q)]}{(\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q - \Omega) (\omega_q^\beta + i\varepsilon_q + \Omega)}, \quad (4.46)$$

onde utilizamos  $e^{-2\Theta_q} = \cosh 2\Theta_q - \sinh 2\Theta_q$  e as equações 4.21 e 4.23. Escrevendo  $\tilde{M}_q^m = \sum_n \chi_q^{mn} \tilde{H}_q^n$ , sendo  $\chi_q^{mn}$  o tensor susceptibilidade, obtemos

$$\chi_q^{yy}(\Omega) = \frac{-2\mu_0 M_s \gamma_e^2 [B_D^r + B_E^r (1 - \gamma_q)]}{\left[ (\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q)^2 - \Omega^2 \right] \left[ (\omega_q^\beta + i\varepsilon_q)^2 - \Omega^2 \right]} \left[ \Omega^2 - (\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q) (\omega_q^\beta + i\varepsilon_q) \right], \quad (4.47a)$$

$$\chi_q^{yz}(\Omega) = \frac{-4i\mu_0 M_s \gamma_e^2 [B_D^r + B_E^r (1 - \gamma_q)]}{\left[ (\omega_q^\alpha - i\varepsilon_q)^2 - \Omega^2 \right] \left[ (\omega_q^\beta + i\varepsilon_q)^2 - \Omega^2 \right]} (\gamma_e B^{r'} - i\varepsilon_q) \Omega, \quad (4.47b)$$

com  $\chi_q^{yy} = \chi_q^{zz}$  e  $\chi_q^{zy} = -\chi_q^{yz}$ , onde utilizamos  $\chi_q^+ = \chi_q^{yy} + i\chi_q^{zy}$  e  $\chi_q^-(\Omega) = \chi_q^+(-\Omega)$ , visto que  $\chi_q(t)$  é real. Considerando um campo oscilante uniforme e adotando  $\varepsilon_q = 0$ , vemos que estes resultados coincidem com as equações obtidas por F. Keffer e C. Kittel [89], com a adição da renormalização térmica dos campos.

Para a fase SF, obtemos

$$\tilde{M}_q^z = 2\gamma_e M_s \frac{i\Omega \cos \theta \tilde{B}_q^{y'r} - \omega_q^\beta e^{-2\Phi_q} \tilde{B}_q^{z'r}}{(\Omega + i\varepsilon_q)^2 - (\omega_q^\beta)^2}, \quad (4.48a)$$

$$\tilde{M}_q^y = -2\gamma_e M_s \cos \theta \frac{i\Omega \tilde{B}_q^{z'r} + \cos \theta \omega_q^\beta e^{2\Phi_q} \tilde{B}_q^{y'r}}{(\Omega + i\varepsilon_q)^2 - (\omega_q^\beta)^2} \quad (4.48b)$$

onde utilizamos  $\langle S_q^{z'} \rangle = \langle S_q^z \rangle$  e  $\langle S_q^{y'} \rangle = \cos \theta \langle S_q^y \rangle$ . Neste caso, a susceptibilidade não é necessariamente baixa, então utilizamos  $\mathbf{B}' = \mu_0 (\mathbf{M} + \mathbf{H}')$  para obter a equação matricial  $\Gamma_q^M \tilde{M}_q = \Gamma_q^H \tilde{H}_q$ . Nesta construção, a susceptibilidade é definida como  $\chi_q = (\Gamma_q^M)^{-1} \Gamma_q^H$  e exibe valores apreciáveis apenas próxima da ressonância, o que nos permite adotar a aproximação  $\Omega^2 - (\omega_q^\beta)^2 \approx 2\Omega (\Omega - \omega_q^\beta)$ . Definindo a frequência angular  $\omega_s = \mu_0 \gamma_e M_s$  e ignorando os termos com  $\omega_s^2$  ( $\omega_s \ll \omega_q^\beta$ ), obtemos as seguintes componentes para o tensor susceptibilidade,

$$\chi_q^{zz}(\Omega) = -\frac{\omega_s e^{-2\Phi_q}}{\Omega - \omega_q^\beta + \omega_s (e^{-2\Phi_q} + \cos^2 \theta e^{2\Phi_q}) + i\varepsilon_q}, \quad (4.49a)$$

$$\chi_q^{yz}(\Omega) = -\frac{i\omega_s \cos \theta}{\Omega - \omega_q^\beta + \omega_s (e^{-2\Phi_q} + \cos^2 \theta e^{2\Phi_q}) + i\varepsilon_q}, \quad (4.49b)$$

com  $\chi_q^{yy} = \cos^2 \theta e^{4\Phi_q} \chi_q^{zz}$  e  $\chi_q^{zy} = -\chi_q^{yz}$ . A. R. Moura obteve estes mesmos resultados, sem a renormalização, utilizando o formalismo de HP [82]. Assim, vemos que a utilização do formalismo dos EC em um sistema diagonalizado por meio da AHAC nos fornece os resultados esperados, adicionando a dependência da temperatura por meio do parâmetro de renormalização.

### 4.3 Conclusões

O trabalho contido nesse capítulo serviu como passo inicial para o nosso estudo da spintrônica de sistemas AFM por meio da AHAC. Em nosso desenvolvimento, adotamos uma forma matricial geral para a diagonalização da hamiltoniana do nosso sistema, nos permitindo apresentar um ferramental útil para a utilização da AHAC em sistemas

que necessitem de transformações de Bogoliubov. Os resultados obtidos por meio do comportamento térmico do parâmetro de renormalização nos permitiram observar a efetividade da AHAC para analisar sistemas antiferromagnéticos. A construção dos estados coerentes por meio da AHAC nos forneceu resultados que coincidem com os observados na literatura, porém com a vantagem de agregarem uma renormalização térmica. Assim, a exploração da AHAC no fenômeno de ressonância antiferromagnética mostrou o quão promissora essa abordagem teórica pode ser para a exploração de fenômenos spintrônicos nesses sistemas. Como continuação desse estudo, buscamos explorar a injeção de correntes de spin em bicamadas contendo materiais AFM, como será apresentado no capítulo VI.

Todo o desenvolvimento apresentado nesta seção culminou em um artigo científico, publicado no periódico *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* [90]. Apresentamos a primeira página do artigo no apêndice C.1.

## Capítulo V

### Mágnons nucleares

Sabemos que o núcleo atômico é uma estrutura composta de prótons e nêutrons, que são partículas fermiônicas de spin  $S = 1/2$ , devido a sua estrutura bariônica, formada por três *quarks*. Assim, a distribuição dessas partículas no núcleo, para alguns isótopos estáveis, resulta em um valor de spin não nulo, que representamos pela letra  $I$ . Esses spins nucleares e o seu momento magnético associado, dado por

$$\boldsymbol{\mu}_N = \gamma_N \hbar \mathbf{I}, \quad (5.1)$$

sendo  $\mathbf{I}$  o operador de spin nuclear e  $\gamma_N$  o fator giromagnético nuclear, foram amplamente estudados no século XX. Dentre esses estudos, um dos que mais se destacou foi a descoberta da ressonância magnética nuclear (RMN) por I. I. Rabi [24], no qual vemos que podemos induzir esse momento magnético a um movimento de precessão devido à aplicação de um campo magnético externo. O processo é semelhante ao que discutimos anteriormente para os spins eletrônicos, porém com menor magnitude, pois  $\mu_N \ll \mu_e$ <sup>1</sup>, com o subíndice  $e$  denotando grandezas referentes aos elétrons [33, 91].

Além da interação com o campo, esses spins nucleares também podem interagir com os spins eletrônicos do átomo, devido à interação hiperfina

$$H_{\text{hf}} = \hbar A \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}, \quad (5.2)$$

sendo  $A$  chamada de constante hiperfina. Em materiais magnéticos cujos spins eletrônicos são fortemente correlacionados, como é o caso dos FM e AFM, a interação de troca entre os spins da rede provoca uma interação indireta entre os spins nucleares, como proposto por H. Suhl [25] e T. Nakamura [26]. Essa interação indireta dá origem a excitações coletivas, semelhantes a ondas de spin, conforme mostrado por P. G. De Gennes [27]. Chamamos então os quanta dessas excitações de mágnons nucleares.

---

<sup>1</sup>Podemos realizar essa comparação observando os fatores giromagnéticos. O fator  $\gamma_e$  costuma ser observado na ordem de algumas dezenas de GHz/T, enquanto valores típicos de  $\gamma_N$  são encontrados na ordem de algumas dezenas de MHz/T.

Essas ondas de spin nucleares veem sendo amplamente exploradas no contexto da RMN ao longo dos anos [92–94]. Porém, pesquisas recentes observaram fenômenos de SP [28, 29] e *Spin Seebeck* [30] para essas excitações, abrindo margem para uma spintrônica baseada em mágns nucleares. Inspirados nessas novas descobertas, decidimos utilizar a AHAC tradicional e o formalismo de EC para estudar essas excitações e o processo de RMN. Com o intuito de montar uma base teórica sólida para o estudo dessas excitações, decidimos explorar ambos os modelos FM e AFM.

## 5.1 Modelo teórico

O estudo das excitações nucleares de um MM é feito em cima da hamiltoniana do sistema em questão, com a inclusão da interação hiperfina entre os spins nucleares e os eletrônicos.

$$H = H_{MM} + H_N^Z + H_{\text{hf}}, \quad (5.3)$$

sendo  $H_{MM}$  a hamiltoniana do sistema. Como estamos interessados em estudar o processo de RMN, vamos considerar a aplicação de um campo magnético externo  $\mathbf{B}'(t) = B'_x \hat{i}' + B'_y(t) \hat{j}' + B'_z(t) \hat{k}'$ . O termo  $H_N^Z$  na hamiltoniana indica a interação entre esse campo e os spins nucleares,

$$H_N^Z = \gamma_e \hbar \sum_i \mathbf{B}'_i(t) \cdot \mathbf{I}'_i. \quad (5.4)$$

Vale ressaltar que estamos utilizando a notação apresentada no capítulo IV, onde  $K'$  indica o referencial do laboratório e  $K$  indica o referencial local para os sítios da rede. Pela equação 5.1 e sabendo que a magnetização dos spins eletrônicos é dada por  $\boldsymbol{\mu}_e = -\gamma_e \hbar \mathbf{S}$ , vemos que  $\mathbf{I}$  e  $\mathbf{S}$  vão se alinhar antiparalelamente em relação à direção do campo estático. Na figura 5.1 ilustramos como seria esse ordenamento no caso AFM.

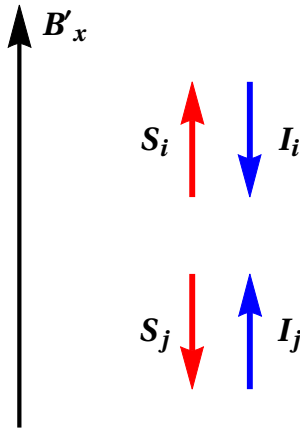


Figura 5.1: Representação da configuração dos spins da rede em relação á direção do campo estático. As setas vermelhas indicam os spins eletrônicos e as azuis representam os spins nucleares. Os subíndices  $i$  e  $j$  indicam sítios vizinhos de um sistema com duas sub-redes (AFM).

Em nosso estudo, vamos considerar o mesmo sistema anisotrópico abordado no capítulo IV, com a adição do caso FM. Assim, a hamiltoniana do sistema será dada por

$$H_{MM} = \pm 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}'_i \cdot \mathbf{S}'_j - D \sum_i (S_i^{x'})^2 - \hbar\gamma_e \sum_i \mathbf{B}'_i(t) \cdot \mathbf{S}'_i, \quad (5.5)$$

onde estamos convencionando que o sinal superior em  $\pm$  (ou  $\mp$ ) se refere ao caso AFM e o inferior se refere ao caso FM. Estamos considerando uma anisotropia de sítio único, porém outros casos podem ser tratados de forma semelhante, adotando pequenos ajustes. De forma geral, vamos considerar uma rotação no eixo  $z$  para reescrevermos os spins no referencial local, assim como foi feito no capítulo IV,

$$\begin{aligned} S_{r,l}^{x'} &= S_{r,l}^x \cos \theta_l - S_{r,l}^y \sin \theta_l, & I_{r,l}^{x'} &= -I_{r,l}^x \cos \theta_l + I_{r,l}^y \sin \theta_l, \\ S_{r,l}^{y'} &= S_{r,l}^x \sin \theta_l + S_{r,l}^y \cos \theta_l, & I_{r,l}^{y'} &= -I_{r,l}^x \sin \theta_l - I_{r,l}^y \cos \theta_l, \\ S_{r,l}^{z'} &= S_{r,l}^z, & I_{r,l}^{z'} &= I_{r,l}^z, \end{aligned} \quad (5.6)$$

com  $r$  representando a posição da célula unitária e  $l = A, B$  indicando a sub-rede tratada (no caso FM tratamos como uma única sub-rede, que engloba a rede inteira). Consideramos também uma rotação  $\theta_l \rightarrow \theta_l + \pi$  para os spins nucleares, devido ao ordenamento antiparalelo discutido anteriormente. Devido ao desenvolvimento apresentado no capítulo IV, já sabemos que essa rotação nos permite estudar as duas fases do material AFM, definindo os ângulos para cada caso. Para um sistema FM, adotamos  $\theta_l = 0$ .

## 5.2 Aproximação harmônica auto-consistente

Para explorarmos as excitações que ocorrem no sistema, vamos obter uma hamiltoniana quadrática por meio da AHAC tradicional. O desenvolvimento será semelhante ao que foi feito na seção 4.1, porém com a inclusão da parte nuclear. Nesse caso, tratamos o sistema como uma rede de  $2N$  sítios, sendo composta de sub-redes eletrônicas e sub-redes nucleares de mesmo tamanho. Assim, vamos utilizar as parametrizações

$$S_i^x = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2} \cos \varphi_i, \quad S_i^y = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2} \sin \varphi_i, \quad (5.7a)$$

$$I_i^x = \sqrt{I^2 - (I_i^z)^2} \cos \psi_i, \quad I_i^y = \sqrt{I^2 - (I_i^z)^2} \sin \psi_i, \quad (5.7b)$$

para escrever cada sub-rede em termos dos campos canonicamente conjugados  $S_i^z$  e  $\varphi_i$ , no caso eletrônico,  $I_i^z$  e  $\psi_i$ , no caso nuclear. Vamos prosseguir com a abordagem semiclássica e posteriormente com a abordagem quântica, a fim de obter uma hamiltoniana quadrática.

### 5.2.1 Abordagem semiclassica

Utilizando a rotação apresentada em 5.6 e as parametrizações indicadas em 5.7 para os spins no referencial local, obtemos a hamiltoniana

$$\begin{aligned}
H = & \pm 2J \sum_{\langle i,j \rangle} [f_i f_j (\cos \Delta\theta \cos \Delta\varphi_{ij} + \text{sen}\Delta\theta \text{sen}\Delta\varphi_{ij}) + S_i^z S_j^z] - \\
& - \frac{D}{2} \sum_i [f_i^2 (\cos 2\theta_i \cos 2\varphi_i - \text{sen}2\theta_i \text{sen}2\varphi_i + 1)] + \\
& - \hbar\gamma_e \sum_i [f_i (B_i^x \cos \varphi_i + B_i^y \text{sen}\varphi_i) + B_i^z S_i^z] - \\
& - \hbar\gamma_N \sum_i [g_i (B_i^x \cos \psi_i + B_i^y \text{sen}\psi_i) - B_i^z I_i^z] + \\
& + \hbar A \sum_i [-f_i g_i \cos(\varphi_i - \psi_i) + S_i^z I_i^z], \tag{5.8}
\end{aligned}$$

com  $f_i = \sqrt{S^2 - (S_i^z)^2}$ ,  $g_i = \sqrt{I^2 - (I_i^z)^2}$ ,  $\Delta\theta = \theta_A - \theta_B$  e  $\Delta\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j$ . Estamos denotando como  $A$  e  $B$  as sub-redes de um sistema AFM. Para um sistema FM, adotaremos  $\theta_A = \theta_B = 0$ . Vamos considerar  $B^x \gg B_i^y, B_i^z$ , sendo este um campo magnético estático e uniforme. Para prosseguir com o desenvolvimento por meio da AHAC, vamos agregar o parâmetro de renormalização em nossos resultados por meio das substituições  $\varphi \rightarrow \sqrt{\rho_e}\varphi$  e  $\psi \rightarrow \sqrt{\rho_N}\psi$ . Adotando as aproximações apresentadas em 4.4 para as sub-redes eletrônicas e nucleares, e reescrevendo os campos no espaço de momentos por meio da transformada de Fourier 3.5, que também pode ser utilizada para os campos nucleares, obtemos uma hamiltoniana dividida em três partes,  $H = E_0 + H_1 + H_2$ , sendo

$$E_0 = \gamma_e \hbar N S [\pm B_E \cos \Delta\theta - B_N] - \hbar N \sum_l \left[ (\gamma_e S + \gamma_N I) B_l^x + \gamma_e S \frac{B_D}{2} \cos^2 \theta_l \right], \tag{5.9}$$

a energia do estado fundamental,

$$\begin{aligned}
H_1 = & \gamma_e \hbar \sum_q \sum_{l \neq l'} \left\{ S \sqrt{\rho_e} \left[ \sqrt{N} \left( \pm B_E \text{sen}\Delta\theta_{ll'} + \frac{B_D}{2} \text{sen}2\theta_l \right) - B_{l,q}^y \right] \varphi_{l,q} - B_{l,q}^z S_{l,q}^z \right\} - \\
& - \gamma_N \hbar \sum_q \sum_l (I \sqrt{\rho_N} B_{l,q}^y \psi_{l,q} - B_{l,q}^z I_{l,q}^z), \tag{5.10}
\end{aligned}$$

uma hamiltoniana contendo os termos lineares nos campos, e

$$\begin{aligned}
H_2 = & \frac{1}{2} \sum_q \sum_{ll'} [S^2 \rho_e \bar{\varphi}_l h_{ll'}^{\varphi} \varphi_{l'} + \bar{S}_l^z h_{ll'}^z S_{l'}^z] + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{ll'} [I^2 \rho_N \bar{\psi}_l n_{ll'}^{\psi} \psi_{l'} + \bar{I}_l^z n_{ll'}^z I_{l'}^z] - \\
& - \hbar A \sum_q \sum_l [SI \sqrt{\rho_e \rho_N} \bar{\varphi}_l \psi_l - \bar{S}_l^z I_l^z], \tag{5.11}
\end{aligned}$$

a hamiltoniana quadrática do sistema, composta por uma parte que envolve apenas os campos eletrônicos, uma parte que envolve apenas os campos nucleares e uma parte que indica uma interação entre eles. Em nosso desenvolvimento, adotamos  $l, l' = A, B$ ,  $\Delta\theta_{ll'} = \theta_l - \theta_{l'}$ ,  $B_E = 2zJS/\gamma_e\hbar$ ,  $B_D = 2DS/\gamma_e\hbar$  e  $B_N = AI/\gamma_e$ . A soma dos momentos é feita sobre a primeira zona de Brillouin. Na hamiltoniana 5.11, ocultamos os sub-índices  $q$  que acompanham todos os termos com sub-índice  $l$ ,  $l'$  e  $ll'$ . Como dito na seção 4.1, usualmente acrescentamos um parâmetro de renormalização para cada termo da hamiltoniana, mas podemos substituir esses parâmetros por um único  $\rho$ , dado pela média ponderada dos mesmos. Com a inclusão dos spins nucleares, passamos a utilizar dois  $\rho$ 's efetivos, um para a parte eletrônica e um para a nuclear. Para prosseguir com nosso desenvolvimento, vamos especificar o tipo de sistema que estamos tratando (FM ou AFM). Podemos analisar a dinâmica do sistema na abordagem semiclássica por meio das equações de Hamilton, como visto no desenvolvimento subsequente às equações 4.10, porém não iremos apresentar essa etapa nessa seção para evitar mais repetições.

**Sistema FM:** No caso FM, o sistema é descrito por uma sub-rede eletrônica e uma sub-rede nuclear, com  $\theta_l = 0$ . Assim, desconsideramos as somas em  $l$  e  $l'$  na hamiltoniana 5.11. Os coeficientes serão dados por

$$h_q^\varphi = h_q^z = h_q^{FM} = \frac{\gamma_e\hbar}{S} [B_E(1 - \gamma_q) + B_D + B^x + B_N] , \quad (5.12a)$$

$$n^\psi = n^z = n^{FM} = \frac{\gamma_N\hbar}{I} (B^x + B_n) , \quad (5.12b)$$

sendo  $B_n = AS/\gamma_N$ . Os parâmetros de renormalização efetivos serão dados pelas médias ponderadas

$$\rho_e^{FM} = \frac{B_E\rho_E + B_D\rho_D + B^x\rho_Z^e + B_N\rho_{hf}}{B_E + B_D + B^x + B_N} , \quad (5.13a)$$

$$\rho_N^{FM} = \frac{B^x\rho_Z^N + B_n\rho_{hf}}{B^x + B_n} , \quad (5.13b)$$

onde  $\rho_E$  denota o parâmetro de renormalização da interação de troca,  $\rho_D$  o da anisotropia,  $\rho_{hf}$  o da interação hiperfina,  $\rho_Z^e$  e  $\rho_Z^N$  os das interação de Zeeman entre o campo estático e os spins eletrônicos e nucleares, respectivamente. Também utilizamos  $\sum_q \gamma_q = 0$ .

**Sistema AFM:** No caso AFM, analisamos o sistema considerando quatro sub-redes, sendo duas eletrônicas e duas nucleares. As eletrônicas coincidem com as trabalhadas no capítulo IV, no qual denotamos uma por  $A$  e a outra por  $B$ . As duas sub-redes nucleares surgem devido ao alinhamento antiparalelo de seus spins com os spins eletrônicos correspondentes. Assim, também utilizaremos  $A$  e  $B$  para denotar essas sub-redes, sendo a sub-rede nuclear  $A$  antiparalela à sub-rede eletrônica  $A$ , e o mesmo para as denotadas por  $B$ . Os coeficientes eletrônicos coincidem com os mostrados nas equações 4.8, com o acréscimo de um pequeno

termo de correcao advindo da interacao hiperfina nos termos com subındice  $ll$ ,

$$h_{ll}^{\varphi} = \frac{\gamma_e \hbar}{S} (-B_E \cos \Delta\theta + B_D \cos 2\theta_l + B_l^x + B_N) , \quad (5.14a)$$

$$h_{ll'}^{\varphi} = \frac{\gamma_e \hbar}{S} B_E \cos \Delta\theta \gamma_q , \quad (5.14b)$$

$$h_{ll}^z = \frac{\gamma_e \hbar}{S} (-B_E \cos \Delta\theta + B_D \cos^2 \theta_l + B_l^x + B_N) , \quad (5.14c)$$

$$h_{ll'}^z = \frac{\gamma_e \hbar}{S} B_E \gamma_q , \quad (5.14d)$$

$$n_{ll}^{\psi} = n_{ll}^z = \frac{\gamma_N \hbar}{I} (B_l^x + B_n) , \quad (5.14e)$$

$$n_{ll'}^{\psi} = n_{ll'}^z = 0 , \quad (5.14f)$$

com  $B_n = AS/\gamma_N$ ,  $l, l' = A, B$  e  $l \neq l'$ . Os parametros serao dados pelas medias

$$\rho_e^{AFM} = \frac{\gamma_e \hbar}{S} \left[ \frac{-2 \cos \Delta\theta B_E \rho_E + 2B_N \rho_{hf} + \sum_l (\cos 2\theta_l B_D \rho_D + B_l^x \rho_Z^e)}{\sum_l h_{ll}^{\varphi}} \right] , \quad (5.15a)$$

$$\rho_N^{AFM} = \frac{\gamma_N \hbar}{I} \left[ \frac{2B_n \rho_{hf} + \sum_l B_l^x \rho_Z^N}{\sum_l n_{ll}^{\psi}} \right] . \quad (5.15b)$$

Utilizamos as mesmas notaoes apresentadas no caso FM para os parametros de cada interacao. Assim como foi discutido na secao 4.1, um material AFM pode apresentar duas fases distintas quando submetido a um campo magnetico estatico: a fase AF tradicional para campos fracos e a fase SF para campos intensos, na qual os spins do sistema tendem a se alinhar com o campo. Como  $\gamma_e \gg \gamma_N$ , analisando a energia do estado fundamental, dada pela equacao 5.9, vemos que o acrescimo dos termos nucleares nao afeta significativamente o comportamento do sistema na fase SF, onde  $\theta_A = -\theta_B = \arccos [B'_x / (2B_E - B_D)]$  quando o campo estatico atinge valor critico dado por  $B_{sf} = \sqrt{2B_E B_D - B_D^2}$ .

Os parametros de renormalizacao obtidos para ambos os casos sao determinados por meio de equacoes auto-consistentes, que podem ser obtidas pela comparacao da media  $\langle \dot{S}_q^z \dot{S}_{-q}^z \rangle$  calculada por meio da hamiltoniana original do sistema e pela hamiltoniana quadratica, ou tambem pela desigualdade de Gibbs-Bogoliubov. Como proximo passo, iremos apresentar como desenvolver a abordagem quantica tradicional da AHAC nesses sistemas. Posteriormente, iremos explorar os parametros de renormalizacao obtidos por meio de ambas as abordagens.

## 5.2.2 Abordagem quantica

Iniciamos a abordagem quantica tradicional da AHAC promovendo os campos canonicamente conjugados a operadores, e entao os reescrevemos em termos de operadores

bosônicos de criação e aniquilação. Para o caso eletrônico, adotamos as equações 4.12. No caso dos campos nucleares, adotamos um processo semelhante, no qual iremos reescrever os operadores  $\psi_i$  e  $I_i^z$ , que respeitam a relação de comutação  $[\psi_i, I_j^z] = \delta_{ij}$ , em termos de novos operadores de criação e aniquilação por meio das relações,

$$\bar{\psi}_{A,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{I^2 \rho_N} \right)^{1/4} (c_q^\dagger + c_{-q}) \quad , \quad \bar{\psi}_{B,q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{I^2 \rho_N} \right)^{1/4} (d_q^\dagger + d_{-q}) \quad , \quad (5.16a)$$

$$\bar{I}_{A,q}^z = \frac{i}{\sqrt{2}} (I^2 \rho_N)^{1/4} (c_q^\dagger - c_{-q}) \quad , \quad \bar{I}_{B,q}^z = \frac{i}{\sqrt{2}} (I^2 \rho_N)^{1/4} (d_q^\dagger - d_{-q}) \quad , \quad (5.16b)$$

onde estamos utilizando  $c$  e  $d$  para os operadores nucleares para diferenciar dos operadores eletrônicos  $a$  e  $b$ . Estes operadores respeitam as relações de comutação bosônicas  $[c_q, c_q^\dagger] = 1$ ,  $[d_q, d_q^\dagger] = 1$  e  $[c_q, d_q] = 0$ . No caso FM, como só há uma sub-rede eletrônica e uma sub-rede nuclear, iremos desconsiderar os termos referentes às sub-redes denotadas por  $B$  e utilizar apenas os operadores  $a$  e  $c$ . Esse processo de quantização nos permite reescrever a hamiltoniana 5.11 como

$$H_2 = H_e + H_N + H' \quad , \quad (5.17)$$

sendo  $H_e$  uma hamiltoniana contendo apenas operadores eletrônicos,  $H_N$  uma hamiltoniana contendo apenas operadores nucleares e  $H'$  um termo de acoplamento entre eles. Trabalhando de forma isolada com cada hamiltoniana, podemos obter os espectros de energia dos mágns eletrônicos e nucleares. Esse desenvolvimento será apresentado separadamente para cada caso, FM e AFM. Em ambos, tratamos o termo  $H'$  por meio de uma teoria de perturbação de segunda ordem, o que nos possibilita reescrevermos esse acoplamento como uma interação de Suhl-Nakamura [25–27, 33]. Apresentamos esse procedimento com maiores detalhes no apêndice B. Para aperfeiçoar os resultados obtidos no regime quântico, adotamos também as substituições  $S \rightarrow \tilde{S} = \sqrt{S(S+1)}$  e  $I \rightarrow \tilde{I} = \sqrt{I(I+1)}$ .

**Sistema FM:** Como mencionando anteriormente, no caso FM temos apenas uma sub-rede eletrônica e uma nuclear, assim, desconsideramos os novos operadores referentes às sub-redes denotadas por  $B$ . Utilizando as relações apresentadas nas equações 4.12 e 5.16 para as sub-redes denotadas por  $A$ , obtemos as hamiltonianas

$$H_e^{FM} = \sum_q h^{FM} \tilde{S} \sqrt{\rho_e^{FM}} a_q^\dagger a_q \quad , \quad (5.18a)$$

$$H_N^{FM} = \sum_q n^{FM} \tilde{I} \sqrt{\rho_N^{FM}} c_q^\dagger c_q \quad , \quad (5.18b)$$

$$H'_{FM} = -\hbar A \sum_q \left( \tilde{S}^2 \tilde{I}^2 \rho_e^{FM} \rho_N^{FM} \right)^{1/4} \left( a_q^\dagger c_{-q}^\dagger + a_{-q} c_q \right) \quad , \quad (5.18c)$$

onde estamos desconsiderando os termos constantes. O primeiro termo nos fornece o espectro de energia dos mágns eletrônicos,  $\epsilon_q^e = \hbar\omega_q^e = h^{FM}\tilde{S}\sqrt{\rho_e^{FM}}$ . Por meio de uma teoria de perturbação em segunda ordem, o termo de acoplamento pode ser reescrito como uma interação de Suhl-Nakamura entre os spins nucleares,

$$H_{SN}^{FM} = -\hbar \sum_q \frac{A^2 \tilde{S} \tilde{I} \sqrt{\rho_e^{FM} \rho_N^{FM}}}{\omega_q^e} c_q^\dagger c_q. \quad (5.19)$$

Assim, podemos juntar esse termo com a hamiltoniana  $H_N^{FM}$ , obtendo então uma hamiltoniana que descreve os mágns nucleares do sistema FM,

$$H_n^{FM} = H_N^{FM} + H_{SN}^{FM} = \sum_q \epsilon_q^n c_q^\dagger c_q, \quad (5.20)$$

sendo  $\epsilon_q^n = \hbar\omega_q^n = n^{FM}\tilde{I}\sqrt{\rho_N^{FM}} - (\hbar A^2 \tilde{S} \tilde{I} \sqrt{\rho_e^{FM} \rho_N^{FM}})/\omega_q^e$  o espectro de energia dessas excitações. Esse resultado coincide com o obtido por S. M. Rezende [33] para um sistema isotrópico ( $B_D = 0$ ), com a adição dos parâmetros de renormalização.

**Sistema AFM:** No caso AFM, vamos utilizar todas as relações apresentadas nas equações 4.12 e 5.16. Esses novos operadores nos permitem reescrever as hamiltonianas na forma matricial,

$$H_e^{AFM} = \frac{1}{2} \sum_q X_q^\dagger \mathcal{H}_e^{AFM} X_q, \quad (5.21a)$$

$$H_N^{AFM} = \frac{1}{2} \sum_q N_q^\dagger \mathcal{H}_N^{AFM} N_q, \quad (5.21b)$$

$$H'_{AFM} = -\hbar A \sum_q \left( \tilde{S}^2 \tilde{I}^2 \rho_e^{AFM} \rho_N^{AFM} \right)^{1/4} \left( a_q^\dagger c_{-q}^\dagger + a_{-q} c_q + b_q^\dagger d_{-q}^\dagger + b_{-q} d_q \right), \quad (5.21c)$$

onde o primeiro termo coincide com o obtido na equação 4.13, com coeficientes obtidos a partir das equações 5.14. No segundo termo, temos

$$N_q^\dagger = \begin{pmatrix} c_q^\dagger & d_q^\dagger & c_{-q} & d_{-q} \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

$$\mathcal{H}_N^{AFM} = \begin{pmatrix} \epsilon_N^c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_N^d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_N^c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_N^d \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

sendo  $\epsilon_N^c = \hbar\gamma_N \sqrt{\rho_N^{AFM}}(B_n + B_A^x)$  e  $\epsilon_N^d = \hbar\gamma_N \sqrt{\rho_N^{AFM}}(B_n + B_B^x)$ . A hamiltoniana eletrônica é diagonalizada pelo mesmo processo apresentado na subseção 4.1.2, utilizando as transformações de Bogoliubov pertinentes para cada fase do sistema. Essas mesmas

transformações serão utilizadas para reescrevermos o acoplamento  $H'_{AFM}$ , para posteriormente adotarmos a teoria de perturbação que resultará na interação de Suhl-Nakamura do sistema nuclear, para cada fase. Esse termo pode ser reescrito na forma matricial,

$$H'_{AFM} = -\hbar K \sum_q X_q^\dagger G' N_q = -\hbar K \sum_q \Psi_q^\dagger T_q^\dagger G' N_q, \quad (5.24)$$

sendo  $K = A \left( \tilde{S}^2 \tilde{I}^2 \rho_e^{AFM} \rho_N^{AFM} \right)^{1/4}$  e  $G' = \sigma_x \otimes I$ , sendo  $\sigma_x$  a matriz  $x$  de Pauli. De forma geral, podemos escrever essa perturbação como

$$H'_{AFM} = \sum_q X_q^\dagger \mathcal{K}_q N_q, \quad (5.25)$$

sendo

$$\mathcal{K}_q = -\hbar K \begin{pmatrix} V_q^T & U_q^T \\ U_q^T & V_q^T \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

Por meio de uma teoria de perturbação até segunda ordem, seguindo um procedimento semelhante ao apresentado no apêndice B, obtemos uma interação de Suhl-Nakamura geral para sistemas AFM,

$$H_{SN}^{AFM} = -\frac{1}{2} \sum_q N_q^\dagger \mathcal{H}_{SN}^{AFM} N_q, \quad (5.27)$$

sendo

$$\mathcal{H}_{SN}^{AFM} = (\hbar K)^2 \begin{pmatrix} k_c & B^N & C_c^N & D^N \\ B^N & k_d & D^N & C_d^N \\ C_c^N & D^N & k_c & B^N \\ D^N & C_d^N & B^N & k_d \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

com os coeficientes sendo dados por,

$$\begin{aligned} k_c &= \frac{u_{11}^2 + v_{11}^2}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{u_{12}^2 + v_{12}^2}{\epsilon_q^\beta}, & k_d &= \frac{u_{21}^2 + v_{21}^2}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{u_{22}^2 + v_{22}^2}{\epsilon_q^\beta}, \\ C_c^N &= \frac{2u_{11}v_{11}}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{2u_{12}v_{12}}{\epsilon_q^\beta}, & C_d^N &= \frac{2u_{21}v_{21}}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{2u_{22}v_{22}}{\epsilon_q^\beta}, \\ B^N &= \frac{u_{11}u_{21} + v_{11}v_{21}}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{u_{12}u_{22} + v_{12}v_{22}}{\epsilon_q^\beta}, & D^N &= \frac{u_{11}v_{21} + v_{11}u_{21}}{\epsilon_q^\alpha} + \frac{u_{12}v_{22} + v_{12}u_{22}}{\epsilon_q^\beta}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Ocultamos os sub-índices  $q$ . Assim, podemos juntar esse termo com a hamiltoniana  $H_N^{AFM}$ , obtendo então uma hamiltoniana que descreve os mágns nucleares do sistema AFM,

$$H_n^{AFM} = H_N^{AFM} + H_{SN}^{AFM} = \frac{1}{2} \sum_q N_q^\dagger \mathcal{H}_n^{AFM} N_q. \quad (5.30)$$

Essa hamiltoniana não está diagonalizada, mas podemos adotar o mesmo procedimento utilizado para o sistema eletrônico para diagonalizá-la. Nesse caso, definimos novos operadores bosônicos nucleares  $\pi_q$  e  $\kappa_q$  por meio da transformação linear  $N_q = T_q^N \Lambda_q$ , sendo

$$\Lambda_q^\dagger = \begin{pmatrix} \pi_q^\dagger & \kappa_q^\dagger & \pi_{-q} & \kappa_{-q} \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

O restante do procedimento segue os mesmos passos apresentados na subseção 4.1.2 para cada fase, incluindo as transformações. Em ambos os casos, conseguimos obter uma hamiltoniana quadrática na forma

$$H_n = \sum_q (\epsilon_q^\pi \pi_q^\dagger \pi_q + \epsilon_q^\kappa \kappa_q^\dagger \kappa_q), \quad (5.32)$$

onde ignoramos o termo constante.

Para a **fase AF**, a transformação do sistema nuclear será dada pelas equações 4.20, com

$$\tanh 2\Theta_q^N = -\frac{2D^N}{(\epsilon_N^c + \epsilon_N^d) - (k_c + k_d)}. \quad (5.33)$$

Nesse caso, as energias dos mágns nucleares serão dadas por

$$\epsilon_q^{\pi,\kappa} = \frac{1}{2} (\epsilon_N^c - \epsilon_N^d) - (k_c - k_d) \pm \frac{1}{2} \sqrt{[(\epsilon_N^c + \epsilon_N^d) - (k_c + k_d)]^2 - 4(D^N)^2}, \quad (5.34)$$

que ao substituirmos os termos, nos fornece

$$\epsilon_q^{\pi,\kappa} = \hbar\gamma_N \left( B_x^{R'} + \frac{\gamma_e^2 B_N^r B_n^R}{\omega_q^\alpha \omega_q^\beta} B_x^{r'} \right) \pm \hbar\gamma_N B_n^R \sqrt{1 - \frac{2\gamma_e^2 B_N^r (B_E^r + B_D^r)}{\omega_q^\alpha \omega_q^\beta} + \gamma_e \left( \frac{\gamma_e B_N^r}{\omega_q^\alpha \omega_q^\beta} \right)^2} \omega_q, \quad (5.35)$$

onde  $\omega_q$  coincide com o resultado apresentado na equação 4.19, e estamos utilizando as notações  $B^R = \sqrt{\rho_N^{AFM}} B$  e  $B^r = \sqrt{\rho_e^{AFM}} B$  para os campos renormalizados. Considerando o ultimo termo da raiz desprezível, esse resultado coincide com o obtido por P. G. de Gennes [27], com a inclusão dos parâmetros de renormalização.

Na **fase SF**, os operadores nucleares serão transformados seguindo as equações 4.25, com os ângulos sendo dados por

$$\tanh \Xi_q^N = \sqrt{\frac{A^N - B^N - \epsilon_q^\pi}{A^N - B^N + \epsilon_q^\pi}}, \quad \tanh \Phi_q^N = \sqrt{\frac{A^N + B^N - \epsilon_q^\kappa}{A^N + B^N + \epsilon_q^\kappa}}, \quad (5.36)$$

onde estamos utilizando  $A^N \approx \hbar\gamma_N B_n^R - (\hbar K)^2/2 [(\cosh 2\Xi_q^N/\epsilon_q^\alpha) + (\cosh 2\Phi_q^N/\epsilon_q^\beta)]$ , dado

que  $B_n \gg B'_x$  e  $k_c = k_d$ . As energias dos mágnons nucleares serão dadas por

$$\epsilon_q^\pi = \sqrt{(A^N - B^N)^2 - (C^N - D^N)^2}, \quad (5.37a)$$

$$\epsilon_q^\kappa = \sqrt{(A^N + B^N)^2 - (C^N + D^N)^2}, \quad (5.37b)$$

com  $C^N = C_c^N = C_d^N$ . Substituindo os termos e desenvolvendo as equações, obtemos

$$\epsilon_q^\pi = \hbar\gamma_N B_n^R \sqrt{1 - \frac{2\gamma_e B_N^r \cosh 2\Xi_q^N}{\omega_q^\alpha} + \left(\frac{\gamma_e B_N^r}{\omega_q^\alpha}\right)^2}, \quad (5.38a)$$

$$\epsilon_q^\kappa = \hbar\gamma_N B_n^R \sqrt{1 - \frac{2\gamma_e B_N^r \cosh 2\Phi_q^N}{\omega_q^\beta} + \left(\frac{\gamma_e B_N^r}{\omega_q^\beta}\right)^2}. \quad (5.38b)$$

Como  $\cosh 2\Xi_q^N \approx \gamma_e B_E^r / \omega_q^\alpha$  e  $\cosh 2\Phi_q^N \approx \gamma_e B_E^r / \omega_q^\beta$ , vemos que nosso resultado coincide com o obtido por S. M. Rezende [33], desconsiderando a pequena correção dada pelo último termo da raiz e os parâmetros de renormalização.

### 5.2.3 Parâmetro de renormalização

Em todos os resultados obtidos anteriormente, vimos a presença dos parâmetros de renormalização  $\rho_e$  e  $\rho_N$ , sendo o primeiro relacionado ao sistema eletrônico e o segundo ao sistema nuclear. Podemos determinar ambos os parâmetros pelo mesmo procedimento apresentado na subseção 4.1.3, mas utilizando as hamiltonianas 5.8 e 5.11. Por estarmos tratando também do sistema nuclear, também devemos comparar a média  $\left\langle \left( \dot{\mathbf{I}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{I}}_q^z \right\rangle$  calculada por meio de ambas as hamiltonianas. Utilizando a hamiltoniana quadrática 5.11, obtemos o mesmo resultado apresentado em 4.29 para o sistema eletrônico e um semelhante para o sistema nuclear,

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_q^z \right\rangle_G = \left\langle \frac{\partial H_2}{\partial \varphi_{A,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\varphi}_{A,q}} + \frac{\partial H_2}{\partial \varphi_{B,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\varphi}_{B,q}} \right\rangle_G = \frac{1}{\beta} \left( \sum_l h_{ll,q}^\varphi \right) S^2 \rho_e, \quad (5.39a)$$

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{I}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{I}}_q^z \right\rangle_G = \left\langle \frac{\partial H_2}{\partial \psi_{A,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\psi}_{A,q}} + \frac{\partial H_2}{\partial \psi_{B,q}} \frac{\partial H_2}{\partial \bar{\psi}_{B,q}} \right\rangle_G = \frac{1}{\beta} \left( \sum_l n_{ll,q}^\psi \right) I^2 \rho_N, \quad (5.39b)$$

sendo  $\langle \dots \rangle_G$  a média Gaussiana calculada utilizando a hamiltoniana quadrática.

O cálculo por meio da hamiltoniana exata se assemelha ao apresentado na equação 4.30, porém utilizando a hamiltoniana 5.8. Tratando cada caso separadamente, obtemos

**Sistemas FM:** Nesse caso, as derivadas da hamiltoniana nos fornecem os seguintes resultados no espaço dos momentos,

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_q^z \right\rangle_G = \frac{\gamma_e \hbar}{\beta S} \left[ (1 - \gamma_q) B_E \langle f^2 \rangle_G \langle \cos \Delta\varphi \rangle_G + B_D \langle f^2 \rangle_G \langle \cos 2\varphi \rangle_G + \right. \\ \left. + B^x S \langle f \rangle_G \langle \cos \varphi \rangle_G + B_N \frac{S}{I} \langle f \rangle_G \langle g \rangle_G \langle \cos (\varphi - \psi) \rangle_G \right], \quad (5.40a)$$

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{I}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{I}}_q^z \right\rangle_G = \frac{\gamma_N \hbar}{\beta} \left[ B^x \langle g \rangle_G \langle \cos \psi \rangle_G + B_n \frac{1}{S} \langle f \rangle_G \langle g \rangle_G \langle \cos (\varphi - \psi) \rangle_G \right], \quad (5.40b)$$

onde as médias são calculadas utilizando a hamiltoniana quadrática. Comparando os resultados das equações 5.39 e 5.40, obtemos as equações dos parâmetros de renormalização para sistemas FM

$$\rho_E = \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_G}{S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \Delta\varphi^2 \rangle_G \right), \quad (5.41a)$$

$$\rho_D = \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_G}{S^2} \right) \exp \left( -2 \langle \varphi^2 \rangle_G \right), \quad (5.41b)$$

$$\rho_Z^e = \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \varphi^2 \rangle_G \right), \quad (5.41c)$$

$$\rho_Z^N = \left( 1 - \frac{\langle (I^z)^2 \rangle_G}{2I^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \psi^2 \rangle_G \right), \quad (5.41d)$$

$$\rho_{hf} = \left( 1 - \frac{\langle (S^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \left( 1 - \frac{\langle (I^z)^2 \rangle_G}{2I^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle (\varphi - \psi)^2 \rangle_G \right), \quad (5.41e)$$

onde utilizamos  $\langle \cos \alpha \rangle = \exp(-\langle \alpha^2 \rangle / 2)$  e expandimos dos termos  $f$  e  $g$ , pois  $S^z \ll S^2$  e  $I^z \ll I^2$ . Como  $\langle 2\varphi\psi \rangle_G = 0$ , podemos reescrever o último parâmetro apresentado como  $\rho_{hf} = \rho_Z^e \rho_Z^N$ .

**Sistemas AFM:** As derivadas obtida nesse tipo de sistema serão semelhantes às apresentadas na equação 4.30, com a adição dos termos nucleares

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{S}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{S}}_q^z \right\rangle_G = \frac{\gamma_e \hbar}{\beta S} \left[ -2B_E \cos \Delta\theta \langle f_A f_B \rangle_G \langle \cos \Delta\varphi \rangle_G + \right. \\ \left. + \sum_l (B_D \cos 2\theta_l \langle f_l^2 \rangle_G \langle \cos 2\varphi_l \rangle_G + B_l^x S \langle f_l \rangle_G \langle \cos \varphi_l \rangle_G + \right. \\ \left. + B_N \frac{S}{I} \langle f_l \rangle_G \langle g_l \rangle_G \langle \cos (\varphi_l - \psi_l) \rangle_G \right], \quad (5.42a)$$

$$\hbar^2 \left\langle \left( \dot{\mathbf{I}}_q^z \right)^\dagger \dot{\mathbf{I}}_q^z \right\rangle_G = \frac{\gamma_N \hbar}{\beta} \sum_l \left[ B_l^x \langle g_l \rangle_G \langle \cos \psi_l \rangle_G + B_n \frac{1}{S} \langle f_l \rangle_G \langle g_l \rangle_G \langle \cos (\varphi_l - \psi_l) \rangle_G \right], \quad (5.42b)$$

sendo  $l = A, B$ . As médias são calculadas utilizando a hamiltoniana quadrática. Comparando os resultados das equações 5.39 e 5.42, obtemos as equações dos parâmetros de renormalização para sistemas AFM

$$\rho_E = \left( 1 - \frac{\langle (S_A^z)^2 \rangle_G}{2S^2} - \frac{\langle (S_B^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \Delta \varphi^2 \rangle_G \right), \quad (5.43a)$$

$$\rho_D = \left( \sum_l \cos 2\theta_l \right)^{-1} \sum_l \cos 2\theta_l \left( 1 - \frac{\langle (S_l^z)^2 \rangle_G}{S^2} \right) \exp \left( -2 \langle \varphi_l^2 \rangle_G \right), \quad (5.43b)$$

$$\rho_Z^e = \left( \sum_l \cos \theta_l \right)^{-1} \sum_l \cos \theta_l \left( 1 - \frac{\langle (S_l^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \varphi_l^2 \rangle_G \right), \quad (5.43c)$$

$$\rho_Z^N = \left( \sum_l \cos \theta_l \right)^{-1} \sum_l \cos \theta_l \left( 1 - \frac{\langle (I_l^z)^2 \rangle_G}{2I^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle \psi_l^2 \rangle_G \right), \quad (5.43d)$$

$$\rho_{hf} = \frac{1}{2} \sum_l \left( 1 - \frac{\langle (S_l^z)^2 \rangle_G}{2S^2} \right) \left( 1 - \frac{\langle (I_l^z)^2 \rangle_G}{2I^2} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \langle (\varphi_l - \psi_l)^2 \rangle_G \right), \quad (5.43e)$$

onde realizamos os mesmos procedimentos descritos para o caso FM. Podemos observar que os parâmetros  $\rho_E$ ,  $\rho_D$  e  $\rho_Z^e$  apresentam as mesmas equações obtidas na subseção 4.1.3. Assim como no sistema eletrônico, podemos observar que o parâmetro derivado da interação do sistema nuclear com um campo externo não apresenta relevância na fase AF, assim desconsideramos as equações para  $\rho_Z^e$  e  $\rho_Z^N$  nessa fase.

Assim como foi apresentado na subseção 4.1.3, essas equações foram obtidas por meio de uma análise semiclássica, mas também podem ser obtidas por meio de uma abordagem quântica tradicional, na qual as maiores mudanças consistem apenas na estatística e na hamiltoniana quadrática utilizadas no cálculo dos valores esperados. A dependência de temperatura dos parâmetros de renormalização são apresentadas na figura 5.2, para a abordagem clássica e quântica da fase AF do caso AFM, para valores extrapolados de  $A$ . No gráfico, podemos observar que os parâmetros eletrônicos e nucleares apresentam diferentes temperaturas críticas,  $T_c^e$  e  $T_c^N$ . Como dito anteriormente, a associação entre essa temperatura crítica e a temperatura de transição de fase do sistema não é algo direto, mas uma proposta que fornece bons resultados para o sistema eletrônico. No caso nuclear, essa temperatura está relacionada à temperatura em que as perturbações térmicas do sistema sobrepõem a interação hiperfina, o que não está associado necessariamente à uma transição de fase. Ainda assim, como a interação hiperfina induz um ordenamento indireto no sistema, podemos considerar que para  $T > T_c^N$  o sistema estará desordenado. Adotamos

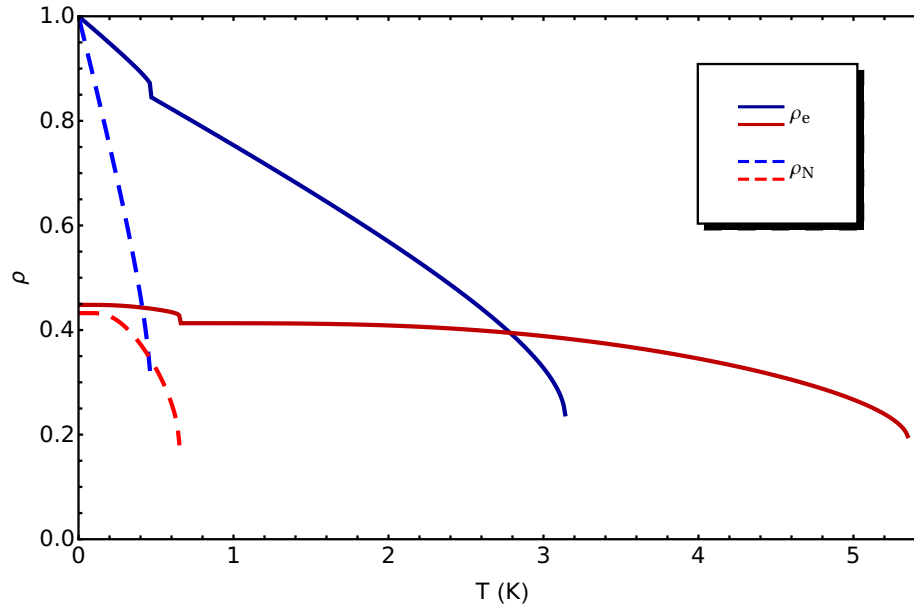


Figura 5.2: Gráfico dos parâmetros de renormalização em função da temperatura na fase AF, na ausência de campo magnético. As linhas azuis indicam os parâmetros obtidos por meio da abordagem semiclássica, enquanto as linhas vermelhas indicam os parâmetros obtidos por meio da abordagem quântica. Utilizamos as linhas sólidas para representar os parâmetros eletrônicos,  $\rho_e$ , e as linhas tracejadas para os parâmetros nucleares,  $\rho_N$ . Neste gráfico utilizamos  $J/k_B = 1$  K,  $D = 0,1J$ ,  $A = 1\gamma_e$ ,  $\gamma_N = 10^{-3}\gamma_e$ ,  $S = I = 1$  e  $z = 6$ . Utilizando esses parâmetros, observamos  $T_c^e = 3,14$ K e  $T_c^N = 0,47$ K para a abordagem semiclássica, e  $T_c^e = 5,35$ K e  $T_c^N = 0,66$ K para a abordagem quântica.

$A = 1\gamma_e$  nos gráficos visando a ilustração desse comportamento, porém, seus valores típicos são muito menores que  $J$ . Na figura 5.3, apresentamos uma comparação entre os parâmetros de renormalização obtidos para o sistema eletrônico na presença e na ausência da interação hiperfina. Estes últimos consistem com os parâmetros obtidos no capítulo IV, cujos comportamentos térmicos são apresentados na figura 4.2. Podemos observar no gráfico que ocorre uma diminuição nos valores de  $\rho_e$  devido à inclusão da interação hiperfina com valores extrapolados, porém o parâmetro ainda exibe o mesmo comportamento térmico característico. As análises apresentadas foram feitas considerando  $B^x = 0$ . Na figura 5.4, apresentamos como  $T_c^N$  aumenta com a intensidade do campo estático aplicado, para um sistema FM. Observamos o mesmo comportamento para ambas as abordagens, semiclássica e quântica. Esse resultado nos indica a importância do campo magnético estático no ordenamento do sistema nuclear, necessário para a existência de mágns nucleares. Ainda são necessárias mais análises para entendermos esses comportamentos.

### 5.3 Estados coerentes

A construção de estados coerentes nucleares segue a mesma ideia apresentada na seção 4.2 para mágns eletrônicos. Esses estados irão descrever o comportamento oscilatório do

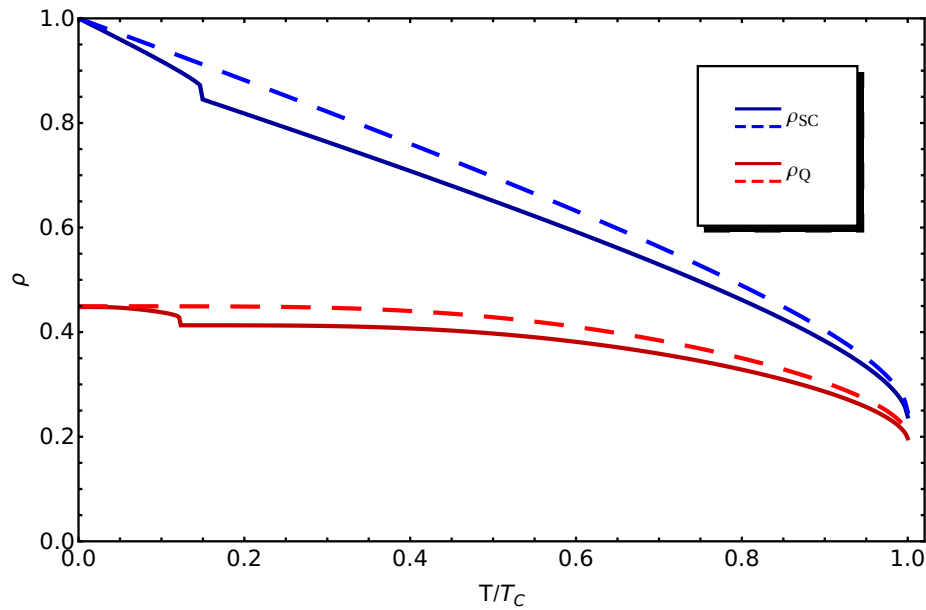


Figura 5.3: Gráfico dos parâmetros de renormalização em função da temperatura reduzida  $T/T_c$  na fase AF, na ausência de campo magnético. As linhas tracejadas indicam os parâmetros calculados sem a interação hiperfina, apresentados na figura 4.2, enquanto as linhas sólidas indicam os parâmetros com a interação hiperfina. As cores azul e vermelho diferenciam a abordagem adotada para a determinação do parâmetro, sendo a cor azul relacionada com a abordagem semiclássica,  $\rho_{SC}$ , e a cor vermelha com a abordagem quântica,  $\rho_Q$ . Neste gráfico utilizamos  $J/k_B = 1$  K,  $D = 0,1J$ ,  $A = 1\gamma_e$ ,  $\gamma_N = 10^{-3}\gamma_e$ ,  $S = I = 1$  e  $z = 6$ .

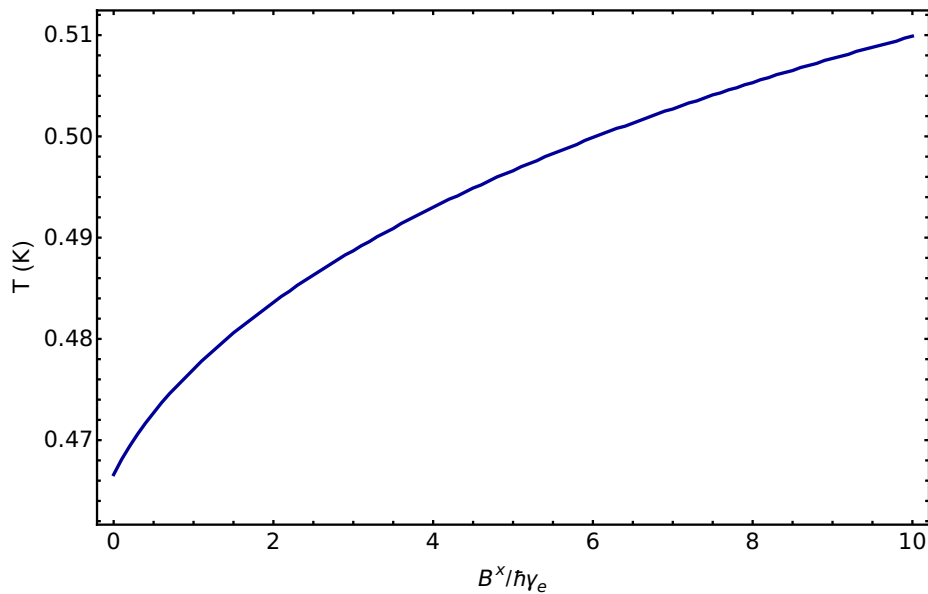


Figura 5.4: Gráfico da temperatura crítica nuclear em função do campo estático em um sistema FM. Os valores de temperatura correspondem à abordagem semiclássica, mas o mesmo comportamento é observado na abordagem quântica. Neste gráfico utilizamos  $J/k_B = 1$  K,  $D = 0,1J$ ,  $A = 1\gamma_e$ ,  $\gamma_N = 10^{-3}\gamma_e$ ,  $S = I = 1$  e  $z = 6$ .

sistema quando atingimos uma condição de ressonância, por meio do ajuste dos campos magnéticos externos. Assim como foi dito antes, atingimos essa condição fixando a frequência de oscilação dos campos oscilantes,  $\Omega$ , e ajustamos a intensidade do campo estático para que a frequência dos mágns menos energéticos ( $q = 0$ ) coincida com  $\Omega$ . Nesse caso, o sistema passa a exibir uma dinâmica síncrona, que será descrita por meio do formalismo dos estados coerentes.

A construção dos EC será apresentada de forma separada para cada tipo de sistema. Em ambos os casos, partimos das definições 2.6 e 2.8, nas quais os estados coerentes são definidos por meio de operadores deslocamento, que, por sua vez, são obtidos a partir do termo linear da hamiltoniana (equação 5.10), que tratamos como uma perturbação. De forma padrão, iremos substituir os ângulos característicos de cada sistema na hamiltoniana linear, promover os campos a operadores e utilizar as relações 4.12 e 5.16 para reescrevermos a hamiltoniana em termos dos operadores de criação e aniquilação. Assim, tratamos essa hamiltoniana como um potencial dependente do tempo, a fim de construir os EC por meio do formalismo de interação, seguindo o procedimento apresentado na seção 2.2.

### 5.3.1 Sistemas FM

Para sistemas FM  $\theta_A = \theta_B = 0$  e possuímos apenas uma sub-rede eletrônica e uma nuclear, logo, utilizaremos apenas as relações referentes às sub-redes indicadas pelo subíndice  $A$  em 4.12 e 5.16. Assim, a hamiltoniana 5.10 passa a ser reescrita como

$$H_1(t) = \sum_q [f_q(t)a^\dagger + \bar{f}_q(t)a_q + g_q(t)c_q^\dagger + \bar{g}_q(t)c_q] , \quad (5.44)$$

com

$$f_q(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \hbar \rho_e^{1/4} B_q^+(t) , \quad (5.45a)$$

$$g_q(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \hbar \rho_N^{1/4} B_q^-(t) , \quad (5.45b)$$

sendo  $B_q^+(t) = B_q^y(t) + iB_q^z(t)$  e  $B_q^-(t) = \bar{B}_q^+(t)$ . Os estados coerentes do sistema serão dados por  $|\eta_q^a \eta_q^c\rangle = S(t)|0\rangle = D(\eta_q^a) D(\eta_q^c)|0\rangle$ , onde

$$D(\eta_q^\ell) = \prod_q \exp(\eta_q^\ell \ell_q^\dagger - \bar{\eta}_q^\ell \ell_q) , \quad (5.46)$$

com  $\ell = a, c$ . Assim, obtemos os seguintes autovalores para os EC,

$$\eta_q^a(t) = \sqrt{\frac{\tilde{S}}{2}} \gamma_e \rho_e^{1/4} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^+(\nu) e^{i(\omega_q^e - \nu)t}}{\omega_q^e - \nu - i\varepsilon_q^e}, \quad (5.47a)$$

$$\eta_q^c(t) = \sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \rho_N^{1/4} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^-(\nu) e^{i(\omega_q^n - \nu)t}}{\omega_q^n - \nu - i\varepsilon_q^n}, \quad (5.47b)$$

sendo  $\tilde{B}_q^+(\nu)$  a transformada de Fourier do campo magnético e  $\varepsilon_q^\ell \ll \omega_q^\ell$  são parâmetros infinitesimais adicionado para garantir a convergência no limite  $t \rightarrow \infty$  para cada subsistema. Assim como foi dito na seção 4.2, estes parâmetros desempenham o mesmo papel de um termo de amortecimento, que não foi considerado inicialmente mas pode ser acrescentado por meio de uma análise fenomenológica.

### 5.3.2 Sistemas AFM

Esse tipo de sistema foi trabalhado na seção 4.2. Como as partes eletrônica e nuclear estão desacopladas na hamiltoniana 5.10, podemos ver que os estados coerentes eletrônicos ainda serão dados pelas equações 4.36 e 4.38. Vamos então focar nossa análise no termo nuclear da hamiltoniana. Utilizando as relações 5.16, a hamiltoniana linear nuclear passa a ser reescrita como

$$H_1(t) = \sum_q [g_q^A(t) c_q^\dagger + \bar{g}_q^A(t) c_q + g_q^B(t) d_q^\dagger + \bar{g}_q^B(t) d_q], \quad (5.48)$$

com

$$g_q^\ell(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \hbar \rho_N^{1/4} B_{\ell,q}^-(t), \quad (5.49)$$

sendo  $\ell = A, B$  e  $B_{\ell,q}^-(t) = B_{\ell,q}^y(t) - iB_{\ell,q}^z(t)$ . Trataremos cada fase do sistema AFM de forma separada, a fim de adotarmos as transformações pertinentes para cada caso.

**Fase AF:** Utilizando  $\theta_A = 0$  e  $\theta_B = \pi$ , os coeficientes são reescritos como  $g_q^A(t) = g_q(t)$  e  $g_q^B(t) = -\bar{g}_q(t)$ , onde

$$g_q(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \hbar \rho_N^{1/4} B_q^{\prime-}(t), \quad (5.50)$$

com  $B_q^{\prime-}(t) = B_q^{y'}(t) - iB_q^{z'}(t)$ . Utilizando as transformações 4.20 para os operadores nucleares, obtemos estados coerentes nucleares do sistema, dados por  $|\eta_q^\pi \eta_q^k\rangle = S(t) |0\rangle = D(\eta_q^\pi) D(\eta_q^k) |0\rangle$ . Os operadores deslocamento coincidem com o apresentado na equação

5.46, com  $\ell = \pi, \kappa$ . Seus autovalores são expressos por

$$\eta_q^\pi(t) = \sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \rho_N^{1/4} e^{-\Theta_q^N} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}'_q(\nu) e^{i(\omega_q^\pi - \nu)t}}{\omega_q^\pi - \nu - i\varepsilon_q^n}, \quad (5.51a)$$

$$\eta_q^\kappa(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \rho_N^{1/4} e^{-\Theta_q^N} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}'_q(\nu) e^{i(\omega_q^\kappa - \nu)t}}{\omega_q^\kappa - \nu - i\varepsilon_q^n}, \quad (5.51b)$$

sendo  $\varepsilon_q^n \ll \omega_q^{\pi, \kappa}$ .

**Fase SF:** Para a fase SF,  $\theta_A = -\theta_B = \theta$ , e os coeficientes passam a ser reescritos como

$$g_q^A(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \hbar \rho_N^{1/4} [\cos \theta B_q^{y'}(t) - i B_q^{z'}(t) - \text{sen} \theta B_q^{x'}], \quad (5.52a)$$

$$g_q^B(t) = -\sqrt{\frac{\tilde{I}}{2}} \gamma_N \hbar \rho_N^{1/4} [\cos \theta B_q^{y'}(t) - i B_q^{z'}(t) + \text{sen} \theta B_q^{x'}]. \quad (5.52b)$$

Utilizando agora as transformações 4.25 para os operadores nucleares, obtemos a mesma expressão para os estados coerentes nucleares apresentada para a fase AF, mas com autovalores dados por

$$\eta_q^\pi(t) = -\sqrt{\tilde{I}} \gamma_N \rho_N^{1/4} \frac{e^{-\Xi_q^N} \text{sen} \theta B_q^{x'} e^{i\omega_q^\pi t}}{\omega_q^\pi - i\varepsilon_q^n}, \quad (5.53a)$$

$$\eta_q^\kappa(t) = \sqrt{\tilde{I}} \gamma_N \rho_N^{1/4} \int \frac{d\nu}{2\pi} \left( \frac{e^{\Phi_q^N} \cos \theta \tilde{B}'_q(\nu) - i e^{-\Phi_q^N} \tilde{B}'_q(\nu)}{\omega_q^\kappa - \nu - i\varepsilon_q^n} \right) e^{i\omega_q^\kappa t}. \quad (5.53b)$$

Assim como no caso eletrônico, ao assumirmos um campo estático uniforme,  $\eta_0^\pi \rightarrow 0$ , o que indica uma ausência de coerência nesse modo.

Os resultados obtidos pela AHAC mostram que as expressões obtidas para os EC dos mágns nucleares possuem certa semelhança com as expressões dos mágns eletrônicos. Porém seus comportamentos não são necessariamente semelhantes. Ainda são necessárias mais análises para explorarmos esses estados coerentes e entendermos seu comportamento e suas possíveis aplicações no estudo da ressonância magnética nuclear. A construção apresentada também nos permite analisar correntes de spin em bicamadas magnéticas, conforme será apresentado no capítulo VI.

No capítulo anterior, mostramos que as expressões obtidas por meio da AHAC coincidem com as obtidas por meio do formalismo de HP, indicadas em referências. Para o caso dos mágns nucleares, não foram encontradas referências que apresentem expressões para seus EC obtidos utilizando HP. Como este é um formalismo amplamente difundido e aplicado em sistemas magnéticos, decidimos obter essas expressões para nossas comparações.

### 5.3.3 Formalismo de Holstein-Primakoff

Para obter os EC dos mágns nucleares por meio do formalismo de HP, partimos da hamiltoniana original 5.3, utilizando o eixo de magnetização em forma convencional, em  $z$ . Assim, e utilizamos diretamente a representação bosônica de HP pertinente para cada tipo de sistema. Assim como foi feito para a AHAC, iremos tratar os sistemas FM e AFM separadamente. Em ambos os casos, vamos nos ater apenas aos termos lineares da hamiltoniana, visto que estamos interessados apenas na obtenção das expressões dos EC. As representações de HP adotadas para cada caso não serão as convencionais, mas as que equivalem às rotações e aos eixos adotados no tratamento por meio da AHAC, quando comparamos os espectros de energia dos mágns.

**Sistema FM:** Para um sistema FM, utilizamos a representação de HP considerando duas sub-redes antiparalelas, uma eletrônica e uma nuclear,

$$S_i^+ = \sqrt{2S} a_i \quad , \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \quad , \quad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i \quad , \quad (5.54a)$$

$$I_i^+ = -\sqrt{2I} c_i^\dagger \quad , \quad I_i^- = -\sqrt{2I} c_i \quad , \quad I_i^z = -I + c_i^\dagger c_i \quad . \quad (5.54b)$$

Por meio dessa representação, obtemos a seguinte hamiltoniana linear no espaço dos momentos

$$H_1 = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left\{ \gamma_e \sqrt{S} [B_q^+(t) a_q^\dagger + B_q^-(t) a_q] + \gamma_N \sqrt{I} [B_q^-(t) c_q^\dagger + B_q^+(t) c_q] \right\} . \quad (5.55)$$

Desse ponto em diante, os procedimentos adotados para determinarmos os EC do sistema por meio da AHAC ou de HP são os mesmos. Assim, obtemos as expressões

$$\eta_q^a(t) = \sqrt{\frac{S}{2}} \gamma_e \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^+(\nu) e^{i(\omega_q^e - \nu)t}}{\omega_q^e - \nu - i\varepsilon_q^e} , \quad (5.56a)$$

$$\eta_q^c(t) = \sqrt{\frac{I}{2}} \gamma_N \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q^-(\nu) e^{i(\omega_q^n - \nu)t}}{\omega_q^n - \nu - i\varepsilon_q^n} , \quad (5.56b)$$

para os autovalores dos EC eletrônicos e nucleares do sistema.

**Sistema AFM:** No caso de um sistema AFM, vamos considerar uma rotação no eixo  $y$  para os campos de spins no referencial local,

$$\begin{aligned} S_{r,l}^{x'} &= S_{r,l}^x \cos \theta_l + S_{r,l}^z \sin \theta_l \quad , & I_{r,l}^{x'} &= I_{r,l}^x \cos \theta_l + I_{r,l}^z \sin \theta_l \quad , \\ S_{r,l}^{y'} &= S_{r,l}^y \quad , & I_{r,l}^{y'} &= I_{r,l}^y \quad , \\ S_{r,l}^{z'} &= -S_{r,l}^z \sin \theta_l + S_{r,l}^x \cos \theta_l \quad , & I_{r,l}^{z'} &= -I_{r,l}^z \sin \theta_l + I_{r,l}^x \cos \theta_l \quad , \end{aligned} \quad (5.57)$$

onde  $r$  representa a posição da célula unitária e  $l = A, B$  indica a sub-rede. Após essa rotação, adotamos a representação bosônica de HP para quatro sub-redes,

$$S_{A,i}^+ = \sqrt{2S} a_i \quad , \quad S_{A,i}^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \quad , \quad S_{A,i}^z = S - a_i^\dagger a_i \quad , \quad (5.58a)$$

$$S_{B,i}^+ = \sqrt{2S} b_i \quad , \quad S_{B,i}^- = \sqrt{2S} b_i^\dagger \quad , \quad S_{B,i}^z = S - b_i^\dagger b_i \quad , \quad (5.58b)$$

$$I_{A,i}^+ = -\sqrt{2I} c_i^\dagger \quad , \quad I_{A,i}^- = -\sqrt{2I} c_i \quad , \quad I_{A,i}^z = -I + c_i^\dagger c_i \quad . \quad (5.58c)$$

$$I_{B,i}^+ = -\sqrt{2I} d_i^\dagger \quad , \quad I_{B,i}^- = -\sqrt{2I} d_i \quad , \quad I_{B,i}^z = -I + d_i^\dagger d_i \quad . \quad (5.58d)$$

No espaço de momentos, essa representação nos fornece uma hamiltoniana linear  $H_1 = H_1^e + H_1^N$ , onde

$$H_1^e(t) = \sum_q [f_q^A(t) a_q^\dagger + \bar{f}_q^A(t) a_q + f_q^B(t) b_q^\dagger + \bar{f}_q^B(t) b_q] \quad , \quad (5.59a)$$

$$H_1^N(t) = \sum_q [g_q^A(t) c_q^\dagger + \bar{g}_q^A(t) c_q + g_q^B(t) d_q^\dagger + \bar{g}_q^B(t) d_q] \quad , \quad (5.59b)$$

sendo

$$f_q^A(t) = \sqrt{\frac{S}{2}} \gamma_e \hbar \left[ \sqrt{N} \left( B_E \sin \Delta \theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_A \right) \delta_{q,0} - B_{A,q}^+(t) \right] \quad , \quad (5.60a)$$

$$f_q^B(t) = \sqrt{\frac{S}{2}} \gamma_e \hbar \left[ \sqrt{N} \left( -B_E \sin \Delta \theta + \frac{B_D}{2} \sin 2\theta_B \right) \delta_{q,0} - B_{A,q}^+(t) \right] \quad , \quad (5.60b)$$

$$g_q^A(t) = -\sqrt{\frac{I}{2}} \gamma_N \hbar B_{A,q}^-(t) \quad , \quad (5.60c)$$

$$g_q^B(t) = -\sqrt{\frac{I}{2}} \gamma_N \hbar B_{B,q}^-(t) \quad . \quad (5.60d)$$

Considerando os valores de  $\theta$  e as transformações de Bogoliubov para cada fase do sistema AFM, que coincidem com as utilizadas no desenvolvimento por meio da AHAC, nas equações 5.60, obtemos os autovalores dos EC para cada fase. Nos atendo aos EC nucleares, obtemos para a **fase AF**,

$$\eta_q^\pi(t) = \sqrt{\frac{I}{2}} \gamma_N e^{-\Theta_q^N} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q'^-(\nu) e^{i(\omega_q^\pi - \nu)t}}{\omega_q^\pi - \nu - i\varepsilon_q^n} \quad , \quad (5.61a)$$

$$\eta_q^\kappa(t) = -\sqrt{\frac{I}{2}} \gamma_N e^{-\Theta_q^N} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\tilde{B}_q'^+(\nu) e^{i(\omega_q^\kappa - \nu)t}}{\omega_q^\kappa - \nu - i\varepsilon_q^n} \quad , \quad (5.61b)$$

e para a **fase SF**,

$$\eta_q^\pi(t) = -\sqrt{I}\gamma_N \frac{e^{-\Xi_q^N} \text{sen}\theta B_q^{x'} e^{i\omega_q^\pi t}}{\omega_q^\pi - i\varepsilon_q^n}, \quad (5.62a)$$

$$\eta_q^\kappa(t) = \sqrt{I}\gamma_N \int \frac{d\nu}{2\pi} \left( \frac{e^{\Phi_q^N} \cos\theta \tilde{B}_q^{y'}(\nu) - ie^{-\Phi_q^N} \tilde{B}_q^{z'}(\nu)}{\omega_q^\kappa - \nu - i\varepsilon_q^n} \right) e^{i\omega_q^\kappa t}. \quad (5.62b)$$

Os resultados obtidos por meio do formalismo de HP coincidem com os obtidos por meio da AHAC, com as substituições  $\tilde{S} \rightarrow S$ ,  $\tilde{I} \rightarrow I$  e  $\rho_e = \rho_N = 1$ . Assim, a AHAC nos fornece resultados mais vantajosos para possíveis análises, devido à inclusão dos parâmetros de renormalização dependentes da temperatura.

## 5.4 Conclusões

A inclusão do sistema nuclear e sua interação com o sistema eletrônico são estratégias interessantes para a concepção de dispositivos spintrônicos que consigam desempenhar mais de um papel simultaneamente, sendo um deles mediado pelas excitações eletrônicas e o outro pelas excitações nucleares. Os resultados obtidos mostram a eficiência da AHAC em tratar esse tipo de sistema, fornecendo expressões com os comportamentos esperados para os mágns nucleares, porém com a inclusão de um parâmetro de renormalização dependente da temperatura. O tratamento proposto, adotando parâmetros diferentes para ambos os sistemas, apresentou resultados interessantes sobre o comportamento térmico do sistema nuclear, que ainda necessitam de mais análises. Por fim, apresentamos uma construção dos estados coerentes dos mágns nucleares, por meio da AHAC tradicional e do formalismo de HP, cujos resultados nos permitirão explorar a injeção de correntes de spin nucleares em bicamadas magnéticas, como será apresentado no capítulo VI.

Este trabalho encontra-se em fase final de preparação, com expectativa de publicação ainda em 2026.

## Capítulo VI

### Correntes de spin em antiferromagnetos

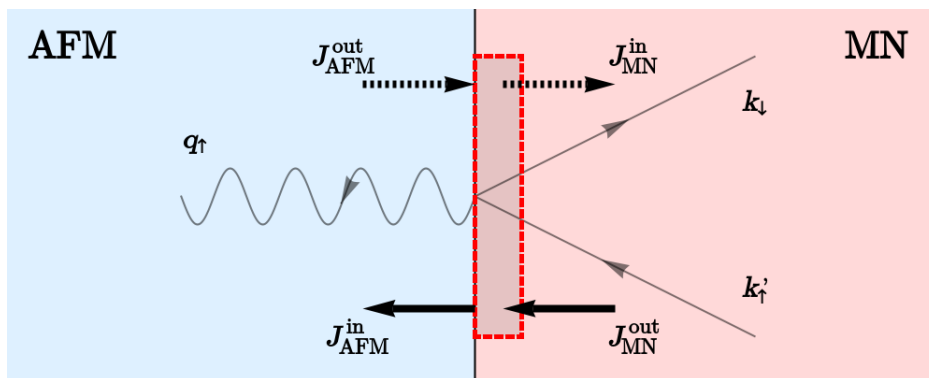


Figura 6.1: Representação gráfica da corrente de spin em uma junção AFM/MN.

No capítulo IV, apresentamos uma análise de um sistema magnético AFM. Para construir uma conexão com a spintrônica, vamos explorar como os mágnons produzidos nesses sistemas transportam momento magnético em bicamadas magnéticas. Logo, estamos interessados em explorar os fenômenos de *Spin Pumping* e *Spin-Transfer Torque*. Para isso, vamos considerar o sistema mostrado na figura 6.1, no qual temos uma interface AFM/MN. Escrevemos a hamiltoniana desse sistema como a soma de três partes,

$$H = H^M + H^{MN} + H^{sd}, \quad (6.1)$$

sendo  $H^M$  a hamiltoniana do sistema magnético,  $H^{MN}$  a hamiltoniana do material condutor e  $H^{sd}$  uma interação elétron-mágnon na interface. Como estamos lidando com sistemas de muitos corpos, utilizamos

$$H^{MN} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}, \quad (6.2)$$

sendo  $f_{k\sigma}$  o operador aniquilação dos elétrons e  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ . O subíndice  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  indica o spin do elétron [65]. A interação elétron-mágnon pode ser descrita pela interação de troca tipo *sd* entre os momentos magnéticos do MM, localizados na interface, e os elétrons

de condução do MN [20],

$$H^{sd} = J_{sd} \sum_{kk'q\ell} \left[ S_{q\ell}^{\prime+} f_{k'\downarrow}^\dagger f_{k\uparrow} + S_{q\ell}^{\prime-} f_{k'\uparrow}^\dagger f_{k\downarrow} + S_{q\ell}^{\prime x} \left( f_{k'\uparrow}^\dagger f_{k\uparrow} - f_{k'\downarrow}^\dagger f_{k\downarrow} \right) \right]. \quad (6.3)$$

onde  $S_{q\ell}^{\prime+} = S_{q\ell}^{\prime y} + iS_{q\ell}^{\prime z}$  e  $J_{sd}$  indica um parâmetro de troca efetivo para essa interação. O subíndice  $\ell = A, B$  denota a sub-rede do sistema AFM. Como mencionado anteriormente, ambos os fenômenos de SP e STT podem ser entendidos por meio de um espalhamento com inversão de spin. Este espalhamento é descrito pelo primeiro e o segundo termo da equação 6.3, enquanto o último termo envolve uma conservação no número de partículas.

Para determinar a corrente de spin, vamos analisar o fluxo de spins na região destacada na figura 6.1. Consideramos a região no material MN, mas poderíamos realizar uma construção semelhante considerando uma região no AFM. Supondo uma conservação no momento angular de spin nesta região, a equação de continuidade nos permite definir o operador corrente de spin como  $J_s = J_{STT} - J_{SP} = -(\hbar/2) \partial_t (N_\uparrow^e - N_\downarrow^e)$ , sendo  $N_\sigma^e$  o operador número e  $J_{STT} = J_{AFM}^{in} - J_{MN}^{out}$ ,  $J_{STT} = J_{AFM}^{out} - J_{MN}^{in}$ . Utilizando a equação de Heisenberg e a equação 6.3, obtemos

$$J_s = iJ_{sd} \sum_{kk'q\ell} \left( S_{q\ell}^{\prime-} f_{k'\uparrow}^\dagger f_{k\downarrow} - S_{q\ell}^{\prime+} f_{k'\downarrow}^\dagger f_{k\uparrow} \right). \quad (6.4)$$

Calculamos a corrente de spin através da interface por meio da teoria de resposta linear, que fornece o valor esperado

$$J_s = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [J_s(t), H^{sd}(t')] \rangle. \quad (6.5)$$

Os estados eletrônicos possuem evolução temporal de acordo com a hamiltoniana 6.2 e os valores esperados são calculados utilizando o ensemble grande canônico, descrito pela hamiltoniana  $K^{MN} = \sum_{k\sigma} \xi_{k\sigma} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}$ , onde  $\xi_{k\sigma} = \epsilon_k - \mu_\sigma$ , sendo  $\mu_\sigma$  o potencial químico para elétrons com spin  $\sigma$ . Substituindo  $H^{MN}$  por  $K^{MN}$  na evolução temporal, obtemos

$$J_s = -2\text{Im}U_{ret}(\delta\mu), \quad (6.6)$$

com  $\delta\mu = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ . A função  $U_{ret}(\delta\mu)$  denota a transformada de Fourier temporal da função de correlação retardada  $U_{ret}(t)$ , definida como

$$U_{ret}(\delta\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}\delta\mu t} U_{ret}(t), \quad U_{ret}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{A}^\dagger(0)] \rangle, \quad (6.7)$$

sendo  $A^\dagger = J_{sd} \sum_{kk'q\ell} S_{q\ell}^{\prime+} f_{k'\downarrow}^\dagger f_{k\uparrow}$ . Esta construção nos permite analisar ambos os fenômenos de STT e SP. No caso do STT, consideramos um desbalanceio no potencial químico,  $\delta\mu \neq 0$ , e procedemos com as contas no ensemble grande canônico [20]. Para o SP, adotamos  $\delta\mu = 0$

e reescrevemos a equação 6.7 no formalismo de estados coerentes [38]. Nas seções seguintes, apresentaremos os procedimentos adotados para a obtenção de uma expressão para a corrente de spin transportada pela interface para ambos os fenômenos. Adicionalmente, apresentaremos também uma construção semelhante a esta, proposta para a análise de correntes de spin nucleares.

## 6.1 Spin-Transfer Torque

Para obtermos uma expressão para a corrente de spin injetada no MN devido ao processo de STT, reescrevemos função de correlação retardada  $U_{ret}(t)$ , dada pela equação 6.7, no formalismo de tempo imaginário de Matsubara [65],

$$\hbar\mathcal{U}(\tau) = - \left\langle T_\tau \hat{A}(\tau) \hat{A}^\dagger(0) \right\rangle , \quad (6.8)$$

sendo  $\tau = it$  o tempo imaginário e  $T_\tau$  o operador de ordenamento temporal. Essa construção nos permite separar o valor esperado apresentado em uma combinação de funções de correlação no formalismo do tempo imaginário para cada operador que compõe  $A$ ,

$$\hbar\mathcal{U}(\tau) = - |J_{sd}|^2 \sum_{kk'q\ell} \chi_{q\ell}(\tau) \mathcal{G}_{k\uparrow}(-\tau) \mathcal{G}_{k'\downarrow}(\tau) , \quad (6.9)$$

onde

$$\chi_{q\ell}(\tau) = - \left\langle T_\tau S_{q\ell}'^-(\tau) S_{-q\ell}'^+(0) \right\rangle_0 , \quad (6.10a)$$

$$\mathcal{G}_{k\sigma}(\tau) = - \left\langle T_\tau f_{k\sigma}(\tau) f_{k\sigma}^\dagger(0) \right\rangle , \quad (6.10b)$$

sendo  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . O valor esperado do sistema magnético é calculado utilizando a hamiltoniana quadrática do mesmo. Utilizando o formalismo de Matsubara, conseguimos determinar uma expressão para a corrente de spin reescrevendo a expressão 6.8 no espaço de frequências,

$$\hbar\mathcal{U}(i\Omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{\frac{i}{\hbar}\Omega_n\tau} \hbar\mathcal{U}(\tau) , \quad (6.11)$$

onde  $\Omega_n$  representa uma frequência de Matsubara bosônica. Dessa forma, a continuação analítica  $i\Omega_n \rightarrow \delta\mu + i\delta_n$  nos permitirá obter  $\text{Im}U_{ret}(\delta\mu)$ . Para essa solução, reescrevemos a função de correlação dos elétrons no MN como

$$\mathcal{G}_{k\sigma}(\tau) = -e^{\frac{\tau}{\hbar}\xi_{k\sigma}} \{ \theta(\tau) [1 - n_F(\xi_{k\sigma})] + \theta(-\tau) n_F(\xi_{k\sigma}) \} , \quad (6.12)$$

sendo  $n_F(\xi_{k\sigma}) = (e^{\beta\xi_{k\sigma}} + 1)^{-1}$  a distribuição de Fermi-Dirac e  $\theta(\tau)$  uma função degrau unitário de Heaviside<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> $\theta(x) = 1$  para  $x > 0$  e  $\theta(x) = 0$  para  $x < 0$ .

Para a função de correlação dos spins do MM, reescrevemos os operadores de spin em termos de operadores de criação e aniquilação utilizando as relações 4.12. Assim, para prosseguir, precisamos especificar a fase do material AFM que estamos tratando, a fim de adotar as transformações corretas para seus operadores de criação e aniquilação.

### 6.1.1 Fase AF

Utilizando as transformações 4.20, obtemos

$$\chi_q(\tau) = -2\tilde{S}\sqrt{\rho_e} \cosh 2\Theta_q \left\{ e^{\tau\omega_q^\alpha} [n_B(\epsilon_q^\alpha) + \theta(-\tau)] + e^{-\tau\omega_q^\beta} [n_B(\epsilon_q^\beta) + \theta(\tau)] \right\}, \quad (6.13)$$

sendo  $n_B(\epsilon_q) = (e^{\beta\epsilon_q} - 1)^{-1}$  a distribuição de Bose-Einstein e  $\chi_q = \chi_{qA} + \chi_{qB}$ . Com esse resultado e com a equação 6.12 conseguimos determinar a função de Matsubara do sistema no espaço de frequências,

$$\begin{aligned} \hbar\mathcal{U}(i\Omega_n) = & 2\hbar\tilde{S}\sqrt{\rho_e} |J_{sd}|^2 \sum_{kk'q} n_F(\xi_{k\uparrow}) [1 - n_F(\xi_{k'\downarrow})] \cosh 2\Theta_q [\Lambda_{kk'q}^\alpha(i\Omega_n) + \\ & + \Lambda_{kk'q}^\beta(i\Omega_n)] , \end{aligned} \quad (6.14)$$

sendo

$$\Lambda_{kk'q}^\alpha(i\Omega_n) = n_B(\epsilon_q^\alpha) \left[ \frac{e^{\frac{\beta}{\hbar}(\epsilon_q^\alpha + \xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow})}}{\epsilon_q^\alpha + \xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow} + i\hbar\Omega_n} \right], \quad (6.15a)$$

$$\Lambda_{kk'q}^\beta(i\Omega_n) = - [n_B(\epsilon_q^\beta) + 1] \left[ \frac{e^{-\frac{\beta}{\hbar}(\epsilon_q^\beta - \xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow})}}{\epsilon_q^\beta - \xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow} - i\hbar\Omega_n} \right]. \quad (6.15b)$$

Tomando a continuação analítica  $i\Omega_n \rightarrow \delta\mu + i\delta_n$  e utilizando a fórmula de Sokhotski–Plemelj,  $(a + ib)^{-1} = P(a^{-1}) - i\pi\delta(a)$ , sendo  $P(a^{-1})$  o valor principal de Cauchy da função  $a^{-1}$  e  $\delta(a)$  uma delta de Dirac, obtemos

$$\Lambda_{kk'q}^\alpha(\delta\mu) = n_B(\epsilon_q^\alpha) \left[ e^{\frac{\beta}{\hbar}(\epsilon_q^\alpha + \xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow})} - 1 \right] \delta(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow} + \epsilon_q^\alpha + \delta\mu), \quad (6.16a)$$

$$\Lambda_{kk'q}^\beta(\delta\mu) = [n_B(\epsilon_q^\beta) + 1] \left[ e^{-\frac{\beta}{\hbar}(\epsilon_q^\beta - \xi_{k\uparrow} + \xi_{k'\downarrow})} - 1 \right] \delta(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow} - \epsilon_q^\beta + \delta\mu). \quad (6.16b)$$

Utilizando o seguinte resultado para a soma dos momentos dos elétrons de condução,

$$\sum_{kk'} n_F(\xi_{k\uparrow}) [1 - n_F(\xi_{k'\downarrow})] \delta(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow} \pm \epsilon_q + \delta\mu) = \frac{k_\downarrow k_\uparrow}{m_e \hbar^2} \frac{\rho_F^2}{\epsilon_F} (\mp \epsilon_q - \delta\mu) n_B(\mp \epsilon_q - \delta\mu), \quad (6.17)$$

sendo  $m_e$  a massa do elétron,  $\epsilon_F$  a energia de Fermi,  $\rho_F$  a densidade de estados no nível de Fermi e  $k_\sigma = \sqrt{2m_e\mu_\sigma/\hbar}$ , obtemos da equação 6.6 uma expressão para a corrente de spin

injetada no MN devido ao processo de STT para fase AF,

$$J_{STT}^{AF} = \frac{4\tilde{S}\sqrt{\rho_e}|J_{sd}|^2 k_{\downarrow}k_{\uparrow}\rho_F^2}{m_e\hbar^2\epsilon_F} (1 - e^{-\beta\delta\mu}) \sum_q \cosh 2\Theta_q \{ (\epsilon_q^\alpha + \delta\mu)n_B(\epsilon_q^\alpha) \times \\ \times [1 + n_B(\epsilon_q^\alpha + \delta\mu)] + (\epsilon_q^\beta - \delta\mu)n_B(\epsilon_q^\beta - \delta\mu) [1 + n_B(\epsilon_q^\beta)] \} . \quad (6.18)$$

### 6.1.2 Fase SF

O procedimento adotado para a fase SF segue os mesmos passos apresentados para a fase AF, mas partindo das transformações 4.25. Dessa forma, ocultando a repetição dos passos apresentados anteriormente, obtemos a seguinte expressão para a corrente de spin injetada no MN devido ao processo de STT para fase SF,

$$J_{STT}^{SF} = \frac{2|J_{sd}|^2 k_{\downarrow}k_{\uparrow}\rho_F^2}{m_e\hbar^2\epsilon_F} (1 - e^{-\beta\delta\mu}) \sum_q \{ K_q\delta\mu [1 + n_B(\delta\mu)] + K_q^\alpha [(\epsilon_q^\alpha - \delta\mu) \times \\ \times (n_B(\epsilon_q^\alpha) + 1) n_B(\epsilon_q^\alpha - \delta\mu) + (\epsilon_q^\alpha + \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\alpha + \delta\mu) + 1) n_B(\epsilon_q^\alpha)] + \\ + K_q^\beta [(\epsilon_q^\beta - \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\beta) + 1) n_B(\epsilon_q^\beta - \delta\mu) + (\epsilon_q^\beta + \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\beta + \delta\mu) + 1) n_B(\epsilon_q^\beta)] \} , \quad (6.19)$$

onde

$$K_q = S' \sin^2\theta \{ -2S' + \sqrt{\rho_e} [\sinh^2\Xi_q + \sinh^2\Phi_q + \cosh 2\Xi_q n_B(\epsilon_q^\alpha) + \\ + \cosh 2\Phi_q n_B(\epsilon_q^\beta)] \} , \quad (6.20a)$$

$$K_q^\alpha = \frac{\tilde{S}\sqrt{\rho_e}}{2} [\sin^2\theta \sinh 2\Xi_q + (\cos\theta + 1)^2 \cosh^2\Xi_q + (\cos\theta - 1)^2 \sinh^2\Xi_q] , \quad (6.20b)$$

$$K_q^\beta = \frac{\tilde{S}\sqrt{\rho_e}}{2} [-\sin^2\theta \sinh 2\Phi_q + (\cos\theta + 1)^2 \cosh^2\Phi_q + (\cos\theta - 1)^2 \sinh^2\Phi_q] , \quad (6.20c)$$

sendo  $\theta$  o ângulo entre os spins das sub-redes e o eixo de magnetização e  $S' = \tilde{S} - \sqrt{\rho_e}/4$ .

## 6.2 Spin Pumping

No caso do processo de SP, os mágnons são excitados no MM por meio de um processo de ressonância. Assim, os mágnons do sistema são descritos pelo formalismo de estados coerentes, e os valores esperados relacionados com o MM serão calculados utilizando a base formada por esses estados, como apresentado na seção 2.2. Resolvendo a parte relacionada com os elétrons de condução em 6.7, obtemos

$$\hbar U_{ret}(t) = i\theta(t) |J_{sd}|^2 \sum_{kk'q\ell} e^{i(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow})} [n_F(\xi_{k\uparrow}) - n_F(\xi_{k'\downarrow})] \Upsilon_\ell(t) , \quad (6.21)$$

sendo

$$\Upsilon_\ell(t) = n_B(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow}) \langle S'_{q\ell}(t) S'_{-q\ell}(0) \rangle_{EC} + n_B(\xi_{k'\downarrow} - \xi_{k\uparrow}) \langle S'_{-q\ell}(0) S'_{q\ell}(t) \rangle_{EC} , \quad (6.22)$$

onde a notação  $\langle \dots \rangle_{EC}$  indica que os valores esperados serão calculados utilizando o formalismo dos estados coerentes. Utilizando as relações 4.12, reescrevemos os operadores de spin em termos de operadores de criação e aniquilação. Calculamos então os valores esperados após especificarmos a fase tratada e adotarmos as transformações necessárias.

### 6.2.1 Fase AF

Para a fase AF, utilizando as transformações 4.20, obtemos como resultado dos valores esperados,

$$\begin{aligned} \sum_\ell \Upsilon_\ell(t) = & -2\tilde{S}\sqrt{\rho_e} \left\{ e^{i\omega_q^\alpha t} \cosh 2\Theta_q \left[ n_B(\epsilon_q^\alpha) + |\eta_q^\alpha|^2 - n_B(\xi_{k'\downarrow} - \xi_{k\uparrow}) \right] + \right. \\ & + e^{-i\omega_q^\beta t} \cosh 2\Theta_q \left[ n_B(\epsilon_q^\beta) + |\eta_q^\beta|^2 - n_B(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow}) \right] + \\ & \left. + \sinh 2\Theta_q \left[ e^{i\omega_q^\alpha t} \bar{\eta}_q^\alpha \bar{\eta}_{-q}^\beta + e^{-i\omega_q^\beta t} \eta_q^\alpha \eta_{-q}^\beta \right] \right\} , \end{aligned} \quad (6.23)$$

onde utilizamos  $\eta_q(t) = \eta_q e^{i\omega_q^\alpha t}$  e os autovalores dos estados coerentes são dados pelas equações 4.36. Realizando a integral indicada na equação 6.7 e substituindo o resultado na equação 6.6, considerando a fórmula de Sokhotski–Plemelj,  $(a + ib)^{-1} = P(a^{-1}) - i\pi\delta(a)$ , obtemos o seguinte resultado para a corrente de spin gerada em um processo de SP na fase AF,

$$\begin{aligned} J_{SP}^{AF} = & \frac{4\pi\tilde{S}\sqrt{\rho_e} |J_{sd}|^2 \rho_F^2}{\hbar} \sum_q \left[ \omega_q^\alpha \left( |\eta_q^\alpha|^2 \cosh 2\Theta_q + \bar{\eta}_q^\alpha \bar{\eta}_{-q}^\beta \sinh 2\Theta_q \right) - \right. \\ & \left. - \omega_q^\beta \left( |\eta_q^\beta|^2 \cosh 2\Theta_q + \eta_q^\alpha \eta_{-q}^\beta \sinh 2\Theta_q \right) \right] , \end{aligned} \quad (6.24)$$

onde foi utilizado o resultado da soma dos momentos eletrônicos,

$$\sum_{kk'} [n_F(\xi_{k\uparrow}) - n_F(\xi_{k'\downarrow})] \delta(\xi_{k\uparrow} - \xi_{k'\downarrow} \pm \epsilon_q + \delta\mu) = \pm \frac{2\rho_F^2 \epsilon_q}{\hbar} , \quad (6.25)$$

sendo  $\rho_F$  a densidade de estados no nível de Fermi.

### 6.2.2 Fase SF

Seguindo o mesmo procedimento apresentado para a fase AF, mas utilizando as transformações 4.25, obtemos uma expressão para a corrente de spin gerada em um

processo de SP para a fase SF,

$$J_{SP}^{SF} = \frac{2\pi |J_{sd}|^2 \rho_F^2}{\hbar} \sum_q [J_q^\alpha \omega_q^\alpha + J_q^\beta \omega_q^\beta] , \quad (6.26)$$

onde  $J_q^\alpha$  e  $J_q^\beta$  denotam dois termos extensos dependentes de  $\tilde{S}$ ,  $\rho_e$ ,  $\theta$ ,  $\Xi_q$ ,  $\Phi_q$  e dos autovalores dos estados coerentes. Para não sobrecarregar o texto, decidimos ocultá-los.

### 6.3 Correntes de spin nucleares

Também conseguimos obter expressões semelhantes à apresentadas nas seções anteriores para correntes de spin nucleares. Para realizar esse estudo, partimos de uma proposta de interação de troca tipo  $sd$  efetiva entre os momentos magnéticos nucleares localizados na interface e os elétrons de condução,

$$H_N^{sd} = J_{sd}^N \sum_{kk'q} \left[ I_q'^+ f_{k'\downarrow}^\dagger f_{k\uparrow} + I_q'^- f_{k'\uparrow}^\dagger f_{k\downarrow} \right] , \quad (6.27)$$

cujo o termo de conservação do número de partículas foi desconsiderado. Essa interação seria a resposta do sistema nuclear à interação dada pela equação 6.3 entre os sítios do material magnético localizados na interface e os elétrons de condução do MN, mediada pela interação hiperfina entre o sistema eletrônico e o nuclear. Essa proposta nos permite adotar a mesma construção apresentada para o estudo dos fenômenos de SP e STT no sistema eletrônico para o sistema nuclear. Ainda precisamos realizar mais análises para indicar como o parâmetro efetivo  $J_{sd}^N$  está relacionado com  $J_{sd}$  e com o parâmetro da interação hiperfina.

Adotando a abordagem proposta e utilizando os resultados apresentados no capítulo V, encontramos para o sistema nuclear as mesmas expressões de correntes de spin apresentadas para os fenômenos de STT e SP para o sistema de spins eletrônicos do MM, com a mudança das características eletrônicas para suas partes nucleares equivalentes. Assim, seguindo os mesmos procedimentos descritos nas seções anteriores, obtemos as seguinte expressões para as correntes de spin nucleares na fase AF,

$$J_{STT}^{(N)AF} = \frac{4\tilde{I}\sqrt{\rho_N} |J_{sd}^N|^2 k_\downarrow k_\uparrow \rho_F^2}{m_e \hbar^2 \epsilon_F} (1 - e^{-\beta\delta\mu}) \sum_q \cosh 2\Theta_q^N \{ (\epsilon_q^\pi + \delta\mu) n_B(\epsilon_q^\pi) \times \\ \times [1 + n_B(\epsilon_q^\pi + \delta\mu)] + (\epsilon_q^\kappa - \delta\mu) n_B(\epsilon_q^\kappa - \delta\mu) [1 + n_B(\epsilon_q^\kappa)] \} , \quad (6.28a)$$

$$J_{SP}^{(N)AF} = \frac{4\pi\tilde{I}\sqrt{\rho_N}|J_{sd}^N|^2\rho_F^2}{\hbar} \sum_q \left[ \omega_q^\pi \left( |\eta_q^\pi|^2 \cosh 2\Theta_q^N + \bar{\eta}_q^\pi \bar{\eta}_{-q}^\kappa \sinh 2\Theta_q^N \right) - \omega_q^\kappa \left( |\eta_q^\kappa|^2 \cosh 2\Theta_q^N + \eta_q^\pi \eta_{-q}^\kappa \sinh 2\Theta_q^N \right) \right] , \quad (6.28b)$$

e para a fase SF,

$$J_{STT}^{(N)SF} = \frac{2|J_{sd}^N|^2 k_\downarrow k_\uparrow \rho_F^2}{m_e \hbar^2 \epsilon_F} (1 - e^{-\beta\delta\mu}) \sum_q \left\{ K_q^N \delta\mu [1 + n_B(\delta\mu)] + K_q^\pi [(\epsilon_q^\pi - \delta\mu) \times \right. \\ \left. \times (n_B(\epsilon_q^\pi) + 1) n_B(\epsilon_q^\pi - \delta\mu) + (\epsilon_q^\pi + \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\pi + \delta\mu) + 1) n_B(\epsilon_q^\pi)] + \right. \\ \left. + K_q^\kappa [(\epsilon_q^\kappa - \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\kappa) + 1) n_B(\epsilon_q^\kappa - \delta\mu) + (\epsilon_q^\kappa + \delta\mu) (n_B(\epsilon_q^\kappa + \delta\mu) + 1) n_B(\epsilon_q^\kappa)] \right\} , \quad (6.29a)$$

$$J_{SP}^{(N)SF} = \frac{2\pi|J_{sd}^N|^2\rho_F^2}{\hbar} \sum_q [J_q^\pi \omega_q^\pi + J_q^\kappa \omega_q^\kappa] , \quad (6.29a)$$

sendo  $J_q^\pi$  e  $J_q^\kappa$  termos extensos dependentes de parâmetros nucleares, que serão omitidos para não sobrecarregar o texto, e

$$K_q^N = I' \sin^2\theta \left\{ -2I' + \sqrt{\rho_N} \left[ \sinh^2 \Xi_q^N + \sinh^2 \Phi_q^N + \cosh 2\Xi_q^N n_B(\epsilon_q^\pi) + \cosh 2\Phi_q^N n_B(\epsilon_q^\kappa) \right] \right\} , \quad (6.30a)$$

$$K_q^\pi = \frac{\tilde{I}\sqrt{\rho_N}}{2} \left[ \sin^2\theta \sinh 2\Xi_q^N + (\cos\theta + 1)^2 \cosh^2 \Xi_q^N + (\cos\theta - 1)^2 \sinh^2 \Xi_q^N \right] , \quad (6.30b)$$

$$K_q^\kappa = \frac{\tilde{I}\sqrt{\rho_N}}{2} \left[ -\sin^2\theta \sinh 2\Phi_q^N + (\cos\theta + 1)^2 \cosh^2 \Phi_q^N + (\cos\theta - 1)^2 \sinh^2 \Phi_q^N \right] , \quad (6.30c)$$

com  $I' = \tilde{I} - \sqrt{\rho_N}/4$ .

Apesar de ambas as correntes de spin do sistema eletrônico e nuclear do material MM serem descritas por expressões matemática similares, não necessariamente terão o mesmo comportamento, visto que dependem de parâmetros de cada sistema que se comportam de maneira distinta.

## 6.4 Próximas etapas

Os resultados obtidos ainda não foram analisados cuidadosamente. Para avaliar a consistência dos mesmos, precisamos compará-los com as observações experimentais dos processos de injeção de corrente de spin. Entre as possíveis observações, existem as que são feitas por meio da tensão gerada em um material condutor devido ao efeito Hall de spin inverso, no qual a corrente de spin injetada nesse material é convertida em corrente de carga, o que gera um acúmulo de carga em suas extremidades (ver [6, 14]). Podemos

avancar nossos resultados para realizar essa análise no caso das correntes de spin injetadas via SP. No caso do processo de STT, precisamos considerar uma camada extra de MN, além da bicamada MM/MN analisada. No momento, estamos avaliando quais materiais e quais dados experimentais vamos utilizar para a validação de nossos resultados. Essa etapa também será feita para as correntes de spin nucleares, que vem sendo exploradas por meio de processos de SP [28, 29].

Esse trabalho está em fase avançada de desenvolvimento, com expectativa de conclusão no final de 2026.

## Capítulo VII

### Considerações finais

Em suma, exploramos a aproximação harmônica auto-consistente como ferramenta teórica para o estudo de sistemas magnéticos e fenômenos relevantes para a spintrônica. Esse formalismo, inicialmente proposto para o estudo de transições de fase em sistemas magnéticos, recentemente se mostrou um bom método para análises envolvendo correntes de spin. Os resultados obtidos por meio de AHAC agregam um parâmetro de renormalização dependente da temperatura, resultando em comparações mais precisas com observações experimentais e possibilitando estudos termodinâmicos de forma mais simples que outros formalismos usuais. Visando expandir a aplicação desse método, buscamos aplicá-lo em sistemas de interesse da spintrônica, como materiais antiferromagnéticos, cujas características de suas excitações possibilitam a concepção de tecnologias de informação à base de spin mais rápidas e eficientes.

O primeiro trabalho apresentado não consiste em uma aplicação da AHAC, mas sim em uma reformulação da abordagem quântica da mesma. Na construção tradicional da AHAC, mesmo em sua abordagem quântica, adotamos aproximações semiclássicas, o que pode resultar em certa perda de informação sobre os efeitos quânticos existentes no sistema. No capítulo III, apresentamos uma formulação puramente quântica para a AHAC, por meio do formalismo de integrais de caminho. Nossa construção nos fornece equações auto-consistentes para o parâmetro de renormalização análogas às obtidas por meio da AHAC tradicional, porém com um fator de correção de origem puramente quântica,  $\Lambda(T)$ , que possui maior relevância para baixos valores de spin. Podemos também observar a partir da nossa construção o motivo de precisarmos realizar a substituição  $S \rightarrow \tilde{S} = \sqrt{S(S+1)}$ , que surge diretamente da representação de Villain para os operadores de spin. Os resultados apresentados evidenciam a eficiência de nossa construção se comparada com a AHAC tradicional e com a aproximação linear de ondas de spin do formalismo de HP, principalmente para sistemas quânticos. Cronologicamente, os demais trabalhos desenvolvidos foram iniciados antes dessa reformulação para AHAC, por isso eles foram desenvolvidos considerando a AHAC tradicional.

No capítulo IV, apresentamos uma análise do fenômeno de ressonância antiferromagné-

tica por meio da abordagem tradicional da AHAC, explorando ambas as fases existentes nesses sistemas. Esse foi o primeiro trabalho desenvolvido durante esse período de doutoramento. Esse fenômeno é responsável pela excitação de mágnons coerentes em materiais magnéticos, o tornando um mecanismo essencial para a injeção de correntes de spin em multicamadas magnéticas via *Spin Pumping*. Por esse motivo, escolhemos esse estudo como ponto de partida para a exploração da spintrônica de antiferromagnetos. Utilizando a AHAC obtivemos resultados consistentes com os obtidos por meio de outros formalismos, como a representação de HP, tanto em sua abordagem semiclássica quanto em sua abordagem quântica. Além disso, analisamos a variação dos resultados obtidos com a temperatura, obtendo boa concordância com os dados experimentais. Por meio da AHAC, conseguimos realizar esse tipo de análise com maior facilidade, se compararmos com a representação de HP, tradicional para o estudo de sistemas magnéticos. O fenômeno de ressonância foi estudado a partir da combinação da AHAC com o formalismo de estados coerentes, onde foi possível observar a dinâmica de precessão e obter as susceptibilidades magnéticas do sistema em ambas as fases. Os resultados obtidos coincidem com os esperados para sistemas AFM, com a vantagem da renormalização térmica característica da AHAC.

O núcleo atômico de certos isótopos pode apresentar momento magnético de spin não nulo. Esses spins nucleares interagem uns com os outros indiretamente por intermédio da interação hiperfina e podem ser excitados mediante um processo de ressonância, gerando ondas de spin nucleares. Exploramos essas excitações no capítulo V por meio da formulação tradicional da AHAC, obtendo resultados consistentes com os observados para esse tipo de excitação. Visando um estudo mais completo, analisamos tanto sistemas FM, quanto sistemas AFM. Em nossa construção, consideramos parâmetros de renormalização diferentes para o sistema de spins nucleares e eletrônicos, o que nos forneceu resultados interessantes, mas que carecem de mais análises. Adicionalmente, apresentamos uma construção para os estados coerentes dessas excitações nucleares, que possibilitam uma futura exploração do fenômeno de ressonância magnética nuclear.

No capítulo VI, exploramos os resultados obtidos nos capítulos IV e V para estudar a injeção de correntes de spin em bicamadas com materiais antiferromagnéticos, via os processos de *Spin Pumping* e *Spin Transfer-Torque*. Nossa construção culminou em expressões para as correntes de spin em ambas as fases do sistema AFM. Para as correntes de spin nucleares, essa construção partiu da proposta de uma interação efetiva entre esses spins e os elétrons de condução do material condutor. Os resultados obtidos ainda são preliminares e necessitam de mais análises.

Os trabalhos desenvolvidos colaboraram para evidenciar a AHAC como um formalismo eficiente para a investigação de fenômenos relevantes para a spintrônica. Os trabalhos apresentados nos capítulos III e IV podem ser acessados em [75] e [90]. O primeiro citado encontra-se em fase de revisão por pares. Os outros dois trabalhos apresentados nos capítulos V e VI estão em fase final de preparação, com perspectiva de conclusão ainda

---

para esse ano. Como perspectiva, almejamos estender nosso estudo de novas aplicações do método de aproximação harmônica auto-consistente para mais fenômenos e sistemas. Entre as ideias que pretendemos explorar nos próximos anos estão o estudo do efeito *Spin Seebeck*, a adaptação de nossos resultados para sistemas com maior apelo experimental e a adaptação da AHAC para o estudo da dinâmica de excitações topológicas.

## Referências Bibliográficas

- [1] D. D. Awschalom, M. E. Flatté, and N. Samarth, “Spintronics,” *Scientific American*, vol. 286, no. 6, pp. 66–73, 2002.
- [2] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications,” *Reviews of modern physics*, vol. 76, no. 2, p. 323, 2004.
- [3] A. Fert, “Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics,” *Reviews of modern physics*, vol. 80, no. 4, p. 1517, 2008.
- [4] P. Dey and J. N. Roy, *Spintronics*. Springer, 2021.
- [5] H. Y. Yuan, Y. Cao, A. Kamra, R. A. Duine, and P. Yan, “Quantum magnonics: When magnon spintronics meets quantum information science,” *Physics Reports*, vol. 965, pp. 1–74, 2022.
- [6] S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, *Spin current*, vol. 22. Oxford University Press, 2017.
- [7] S. Maekawa, T. Kikkawa, H. Chudo, J. Ieda, and E. Saitoh, “Spin and spin current—from fundamentals to recent progress,” *Journal of Applied Physics*, vol. 133, no. 2, 2023.
- [8] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [9] D. Hirobe, M. Sato, T. Kawamata, Y. Shiomi, K.-i. Uchida, R. Iguchi, Y. Koike, S. Maekawa, and E. Saitoh, “One-dimensional spinon spin currents,” *Nature Physics*, vol. 13, no. 1, pp. 30–34, 2017.
- [10] D. Hirobe, T. Kawamata, K. Oyanagi, Y. Koike, and E. Saitoh, “Generation of spin currents from one-dimensional quantum spin liquid,” *Journal of Applied Physics*, vol. 123, no. 12, 2018.
- [11] V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov, and D. Grundler, “Magnonics,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43, no. 26, p. 264001, 2010.

- [12] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, “Magnon spintronics,” *Nature physics*, vol. 11, no. 6, pp. 453–461, 2015.
- [13] A. Hoffmann and S. D. Bader, “Opportunities at the frontiers of spintronics,” *Physical Review Applied*, vol. 4, no. 4, p. 047001, 2015.
- [14] S. M. Rezende, *Fundamentals of magnonics*, vol. 969. Springer, 2020.
- [15] A. Barman, G. Gubbiotti, S. Ladak, A. O. Adeyeye, M. Krawczyk, J. Gräfe, C. Adelman, S. Cotofana, A. Naeemi, V. I. Vasyuchka, *et al.*, “The 2021 magnonics roadmap,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 33, no. 41, p. 413001, 2021.
- [16] E. Gomonay and V. Loktev, “Spintronics of antiferromagnetic systems,” *Low Temperature Physics*, vol. 40, no. 1, pp. 17–35, 2014.
- [17] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, “Antiferromagnetic spintronics,” *Nature nanotechnology*, vol. 11, no. 3, pp. 231–241, 2016.
- [18] A. Brataas, Y. Tserkovnyak, G. Bauer, and P. J. Kelly, “Spin pumping and spin transfer,” *Spin current*, vol. 17, pp. 87–135, 2012.
- [19] A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, and B. Hillebrands, “Review on spintronics: Principles and device applications,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 509, p. 166711, 2020.
- [20] S. Takahashi, E. Saitoh, and S. Maekawa, “Spin current through a normal-metal/insulating-ferromagnet junction,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 200, p. 062030, IOP Publishing, 2010.
- [21] K.-I. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, and E. Saitoh, “Observation of the spin seebeck effect,” *Nature*, vol. 455, no. 7214, pp. 778–781, 2008.
- [22] K.-i. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, J.-i. Ohe, S. Takahashi, J. Ieda, T. Ota, Y. Kajiwara, H. Umezawa, H. Kawai, *et al.*, “Spin seebeck insulator,” *Nature materials*, vol. 9, no. 11, pp. 894–897, 2010.
- [23] K.-i. Uchida, H. Adachi, T. Ota, H. Nakayama, S. Maekawa, and E. Saitoh, “Observation of longitudinal spin-seebeck effect in magnetic insulators,” *Applied Physics Letters*, vol. 97, no. 17, 2010.
- [24] I. I. Rabi, J. R. Zacharias, S. Millman, and P. Kusch, “A new method of measuring nuclear magnetic moment,” *Phys. Rev.*, vol. 53, pp. 318–318, 1938.

- [25] H. Suhl, “Effective nuclear spin interactions in ferromagnets,” *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 606–606, 1958.
- [26] T. Nakamura, “Indirect coupling of nuclear spins in antiferromagnet with particular reference to  $\text{MnF}_2$  at very low temperatures,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 20, no. 4, pp. 542–552, 1958.
- [27] P. G. de Gennes, P. A. Pincus, F. Hartmann-Boutron, and J. M. Winter, “Nuclear magnetic resonance modes in magnetic material. i. theory,” *Phys. Rev.*, vol. 129, pp. 1105–1115, 1963.
- [28] Y. Shiomi, J. Lustikova, S. Watanabe, D. Hirobe, S. Takahashi, and E. Saitoh, “Spin pumping from nuclear spin waves,” *Nature Physics*, vol. 15, no. 1, pp. 22–26, 2019.
- [29] J. de Lima, D. Maior, E. Souza, D. Ratkovski, F. Machado, R. Rodríguez-Suárez, and S. Rezende, “Giant nuclear-electronic spin pumping in the heisenberg antiferromagnet  $\text{RbMnF}_3$ ,” *Physical Review Letters*, vol. 134, no. 14, p. 146702, 2025.
- [30] T. Kikkawa, D. Reitz, H. Ito, T. Makiuchi, T. Sugimoto, K. Tsunekawa, S. Daimon, K. Oyanagi, R. Ramos, S. Takahashi, *et al.*, “Observation of nuclear-spin seebeck effect,” *Nature communications*, vol. 12, no. 1, p. 4356, 2021.
- [31] A. V. Andrienko, V. I. Ozhogin, V. L. Safonov, and A. Y. Yakubovskii, “Nuclear spin wave research,” *Soviet Physics Uspekhi*, vol. 34, no. 10, p. 843, 1991.
- [32] C. K. Mewes, “Spin currents go nuclear,” *Nature Physics*, vol. 15, no. 1, pp. 8–9, 2019.
- [33] S. M. Rezende, “Introduction to nuclear spin waves in ferro-and antiferromagnets,” *Journal of Applied Physics*, vol. 132, no. 9, 2022.
- [34] S. Menezes, M. Gouvêa, and A. Pires, “Calculation of the spin stiffness for 2d easy-plane magnets,” *Physics Letters A*, vol. 166, no. 5-6, pp. 330–334, 1992.
- [35] A. Moura and R. Lopes, “On coherent states and the self-consistent harmonic approximation,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 472, pp. 1–6, 2019.
- [36] A. Moura, “Application of magnon coherent states in spintronics,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 498, p. 166091, 2020.
- [37] A. Moura, “Effectiveness of the self-consistent harmonic approximation in ferromagnets with dipolar interactions,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 562, p. 169778, 2022.
- [38] A. R. Moura, “Theoretical analysis of FMR-driven spin pumping current and its properties via the self-consistent harmonic approximation,” *Phys. Rev. B*, vol. 106, p. 054313, Aug 2022.

- [39] F. Bloch, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 61, no. 3, pp. 206–219, 1930.
- [40] T. Holstein and H. Primakoff, “Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet,” *Physical Review*, vol. 58, no. 12, p. 1098, 1940.
- [41] F. J. Dyson, “General theory of spin-wave interactions,” *Physical Review*, vol. 102, no. 5, p. 1217, 1956.
- [42] A. S. T. Pires, *Theoretical tools for spin models in magnetic systems*. IOP Publishing, 2021.
- [43] S. M. Rezende and N. Zagury, “Coherent magnon states,” *Physics Letters A*, vol. 29, no. 1, pp. 47–48, 1969.
- [44] N. Zagury and S. Rezende, “On the excitation of coherent magnon states,” *Physics Letters A*, vol. 29, no. 10, pp. 616–617, 1969.
- [45] W. M. Zhang, R. Gilmore, *et al.*, “Coherent states: Theory and some applications,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 62, no. 4, p. 867, 1990.
- [46] D. Judge and J. Lewis, “On the commutator  $[z, \varphi]$ ,” *Physics Letters*, vol. 5, no. 3, p. 190, 1963.
- [47] D. Judge, “On the uncertainty relation for angle variables,” *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, vol. 31, no. 2, pp. 332–340, 1964.
- [48] A. Pires, “Kosterlitz-thouless transition in a two-dimensional isotropic antiferromagnet in a uniform field,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 13, p. 9592, 1994.
- [49] A. Pires, “Classical two-dimensional xxz model: A test of a generalized self-consistent harmonic approximation,” *Physical Review B*, vol. 54, no. 9, p. 6081, 1996.
- [50] A. Pires, “Kosterlitz–thouless transition in the heisenberg model with antisymmetric exchange interaction,” *Solid state communications*, vol. 112, no. 12, pp. 705–706, 1999.
- [51] A. Pires, “Quantum-phase transition in a xy model,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 373, pp. 387–391, 2007.
- [52] A. Pires and M. Gouvea, “Quantum phase transition in the two-dimensional xy model with single-ion anisotropy,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 388, no. 1, pp. 21–27, 2009.
- [53] A. Pires and B. Costa, “Quantum phase transitions in the anisotropic three dimensional xy model,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 388, no. 18, pp. 3779–3784, 2009.

- [54] A. Moura, “Theoretical determination of ising-type transition by using the self-consistent harmonic approximation,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 587, p. 171267, 2023.
- [55] H. Falk, “Inequalities of jw gibbs,” *American Journal of Physics*, vol. 38, no. 7, pp. 858–869, 1970.
- [56] A. Pires and M. Gouvêa, “Quantum fluctuations in low-dimensional easy-plane spin models,” *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 44, no. 2, pp. 169–174, 2005.
- [57] G. G. Low, “Application of spin wave theory to three magnetic salts,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 82, no. 6, p. 992, 1963.
- [58] A. Peremolov, *Generalized Coherent States and Their Applications*. Springer-Verlag, 1986.
- [59] D. Robert and M. Combescure, *Coherent States and Applications in Mathematical Physics*. Springer, 2021.
- [60] S. T. Ali, J. P. Antoine, J. P. Gazeau, *et al.*, *Coherent states, wavelets and their generalizations*, vol. 3. Springer, 2000.
- [61] C. F. Kam, W. M. Zhang, and D. H. Feng, *Coherent States*. Springer, 2023.
- [62] J. Oz-Vogt, A. Mann, and M. Revzen, “Thermal coherent states and thermal squeezed states,” *Journal of Modern Optics*, vol. 38, no. 12, pp. 2339–2347, 1991.
- [63] W.-M. Zhang, “Coherent states in field theory,” *arXiv preprint hep-th/9908117*, 1999.
- [64] 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,” *Journal de Physique*, vol. 35, no. 1, pp. 27–47, 1974.
- [65] G. D. Mahan, *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [66] K. K. Muminov and Y. Yousefi, “Berry phase for coherent states in spin systems.” arXiv preprint arXiv:1103.6079 [math-ph], 2011.
- [67] N. Bykovetz, A. Hoser, J. Klein, C. Lin, and M. Seehra, “Neutron scattering measurements in rbmnf3: A test of spin-wave-region theories at low temperatures and critical behavior near tn,” *Journal of Applied Physics*, vol. 111, no. 7, 2012.
- [68] R. Ditzian and D. Betts, “Dynamical properties of the three-dimensional xy model,” *Canadian Journal of Physics*, vol. 50, no. 2, pp. 129–138, 1972.

- [69] M. Gonzalez, B. Bernu, L. Pierre, and L. Messio, “Finite-temperature phase transitions in  $s=1/2$  three-dimensional heisenberg magnets from high-temperature series expansions,” *Physical Review B*, vol. 107, no. 23, p. 235151, 2023.
- [70] A. W. Sandvik, “Critical temperature and the transition from quantum to classical order parameter fluctuations in the three-dimensional heisenberg antiferromagnet,” *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 23, p. 5196, 1998.
- [71] T. Holden, R. Cowley, W. Buyers, E. Svensson, and R. Stevenson, “Magnetic excitations in ni-doped  $\text{kmnf}_3$ ,” *Le Journal de Physique Colloques*, vol. 32, no. C1, pp. C1–1184, 1971.
- [72] C. Windsor and R. Stevenson, “Spin waves in  $\text{rbmnf}_3$ ,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 87, no. 2, p. 501, 1966.
- [73] D. Saunderson, C. Windsor, G. Briggs, M. Evans, and E. Hutchison, *Spin-wave damping in  $\text{RbMnF}_3$* . IAEA., 1972.
- [74] F. Barocchi, P. Mazzinghi, V. Tognetti, and M. Zoppi, “Determination of zone-boundary magnon energy and damping in  $\text{rbmnf}_3$  by means of light scattering experiments,” *Solid State Communications*, vol. 25, no. 4, pp. 241–243, 1978.
- [75] G. C. Villela and A. R. Moura, “The quantum self-consistent harmonic approximation: A unified framework for quantum spin system.” arXiv preprint arXiv:2511.01822 [cond-mat.str-el], 2025.
- [76] F. B. Anderson and H. B. Callen, “Statistical mechanics and field-induced phase transitions of the heisenberg antiferromagnet,” *Physical Review*, vol. 136, no. 4A, p. A1068, 1964.
- [77] L. J. De Jongh and A. R. Miedema, “Experiments on simple magnetic model systems,” *Advances in Physics*, vol. 50, no. 8, pp. 947–1170, 2001.
- [78] A. Bogdanov, A. Zhuravlev, and U. Rößler, “Spin-flop transition in uniaxial antiferromagnets: Magnetic phases, reorientation effects, and multidomain states,” *Physical Review B*, vol. 75, no. 9, p. 094425, 2007.
- [79] S. M. Rezende, A. Azevedo, and R. L. Rodríguez-Suárez, “Introduction to antiferromagnetic magnons,” *Journal of Applied Physics*, vol. 126, no. 15, 2019.
- [80] R. White, M. Sparks, and I. Ortenburger, “Diagonalization of the antiferromagnetic magnon-phonon interaction,” *Physical Review*, vol. 139, no. 2A, p. A450, 1965.

- [81] P. T. Nam, M. Napiórkowski, and J. P. Solovej, “Diagonalization of bosonic quadratic hamiltonians by bogoliubov transformations,” *Journal of Functional Analysis*, vol. 270, no. 11, pp. 4340–4368, 2016.
- [82] A. R. Moura, “A thorough investigation of the antiferromagnetic resonance,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 36, no. 45, p. 455804, 2024.
- [83] K. C. Turberfield, A. Okazaki, and R. W. H. Stevenson, “The development of the magnetic excitation spectra of mnf<sub>2</sub> with increasing temperature,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 85, p. 743, apr 1965.
- [84] M. Hutchings, B. Rainford, and H. Guggenheim, “Spin waves in antiferromagnetic fef<sub>2</sub>,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 3, no. 2, p. 307, 1970.
- [85] S. Rezende and R. White, “Spin-wave lifetimes in antiferromagnetic rbmn f<sub>3</sub>,” *Physical Review B*, vol. 18, no. 5, p. 2346, 1978.
- [86] S. Rezende and R. White, “Multimagnon theory of antiferromagnetic resonance relaxation,” *Physical Review B*, vol. 14, no. 7, p. 2939, 1976.
- [87] S. Bayrakci, T. Keller, K. Habicht, and B. Keimer, “Spin-wave lifetimes throughout the brillouin zone,” *Science*, vol. 312, no. 5782, pp. 1926–1929, 2006.
- [88] S. Rezende, R. Rodríguez-Suárez, and A. Azevedo, “Theory of the spin seebeck effect in antiferromagnets,” *Physical Review B*, vol. 93, no. 1, p. 014425, 2016.
- [89] F. Keffer and C. Kittel, “Theory of antiferromagnetic resonance,” *Physical Review*, vol. 85, no. 2, p. 329, 1952.
- [90] G. Villela and A. Moura, “Unveiling antiferromagnetic resonance: A comprehensive analysis via the self-consistent harmonic approximation,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 606, p. 172393, 2024.
- [91] I. S. Oliveira, *Introdução à física do estado sólido*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [92] P. M. Richards, “Nuclear spin-wave relaxation and narrowing of nmr lines in ferro-and antiferromagnets,” *Physical Review*, vol. 173, no. 2, p. 581, 1968.
- [93] W. J. Ince, “Coupled antiferromagnetic-nuclear-magnetic resonance in rbmnf<sub>3</sub>,” *Physical Review*, vol. 184, no. 2, p. 574, 1969.
- [94] R. Word, A. Heidemann, and D. Richter, “On the detection of nuclear spin waves by inelastic neutron scattering,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 28, no. 1, pp. 23–30, 1977.

## Apêndice A

### Valores médios de campos não-interagentes

Vamos considerar um modelo quadrático, no qual o sistema em questão é descrito por uma hamiltoniana  $H_0(\varphi, S^z)$ . A função de partição do sistema será dada por

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\Omega' \exp(-\mathcal{A}_0/\hbar), \quad (\text{A.1})$$

enquanto a ação é dada por

$$\mathcal{A}_0 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[ H_0(\tau) - i\hbar \sum_i S_i^z \dot{\varphi}_i \right]. \quad (\text{A.2})$$

Performando a transformada de Fourier nos campos, definida por

$$S_i^z(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{q, \omega_n} S_{qn}^z e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i - \omega_n \tau)}, \quad \varphi_i(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{q, \omega_n} \varphi_{qn} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i - \omega_n \tau)}, \quad (\text{A.3})$$

a ação do modelo não-interagente se torna

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{2\hbar\beta} \sum_{q, \omega_n} (h_q^\varphi \bar{\varphi}_{qn} \varphi_{qn} + h_q^z \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z - \omega_n \bar{S}_{qn}^z \varphi_{qn} + \omega_n S_{qn}^z \bar{\varphi}_{qn}), \quad (\text{A.4})$$

sendo  $\omega_n = 2\pi n/\beta\hbar$ ,  $n \in \mathbb{Z}$  as frequência de Matsubara para bósons. Também utilizamos  $\int d\tau S_i^z \dot{\varphi}_i = -\int d\tau \varphi_i \dot{S}_i^z$  para obter os dois últimos termos. Conseguimos eliminar as contribuições lineares definindo um desvio angular  $\delta\varphi_{qn} = \varphi_{qn} - \phi_{qn}$ , sendo  $\phi_{qn}$  determinado pela minimização da ação,

$$\left. \frac{\partial \mathcal{A}_0}{\partial \varphi_{qn}} \right|_{\varphi_{qn} = \phi_{qn}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{\phi}_{qn} = \frac{\hbar\omega_n}{h_q^\varphi} \bar{S}_{qn}^z. \quad (\text{A.5})$$

De forma equivalente,  $\phi_{qn} = -(\hbar\omega_n/h_q^\varphi) S_{qn}^z$ . Como

$$\delta\bar{\varphi}_{qn}h_q^\varphi\delta\varphi_{qn} = \bar{\varphi}_{qn}h_q^\varphi\varphi_{qn} - \hbar\omega_n\bar{S}_{qn}^z\varphi_{qn} + \hbar\omega_n S_{qn}^z\bar{\varphi}_{qn} + \bar{\phi}_{qn}h_q^\varphi\phi_{qn}, \quad (\text{A.6})$$

e

$$\bar{S}_{qn}^z h_q^z S_{qn}^z - \bar{\phi}_{qn} h_q^\varphi \phi_{qn} = \frac{\hbar^2 (\omega_q^2 + \omega_n^2)}{h_q^\varphi} \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z, \quad (\text{A.7})$$

com  $\hbar\omega_q = \sqrt{h_q^\varphi h_q^z}$ , podemos reescrever a ação em termos de  $\delta\varphi_{qn}$ ,

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{2\beta\hbar} \sum_{q,\omega_n} \left[ \frac{\hbar^2 (\omega_q^2 + \omega_n^2)}{h_q^\varphi} \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z + h_q^\varphi \delta\bar{\varphi}_{qn} \delta\varphi_{qn} \right]. \quad (\text{A.8})$$

Com esse resultado, somos capazes de decompor a função de partição na forma  $Z_0 = Z_0^\varphi Z_0^z$ , onde

$$Z_0^\varphi = \prod_{q,\omega_n} \int d(\delta\bar{\varphi}_{qn}) d(\delta\varphi_{qn}) e^{-(h_q^\varphi/2\beta\hbar^2)\delta\bar{\varphi}_{qn}\delta\varphi_{qn}} = (\det \beta h_q^\varphi)^{-1/2}, \quad (\text{A.9})$$

e

$$Z_0^z = \prod_{q,\omega_n} \int d\bar{S}_{qn}^z dS_{qn}^z e^{-[(\omega_q^2 + \omega_n^2)/2\beta\hbar h_q^\varphi] \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z} = \left[ \det \left( \frac{\beta\hbar^2(\omega_q^2 + \omega_n^2)}{h_q^\varphi} \right) \right]^{-1/2}. \quad (\text{A.10})$$

Nos resultados apresentados desconsideramos as constantes multiplicativas, pois não afetam na dinâmica do sistema. Assim, a função de partição do sistema será dada por

$$Z_0 = [\det (\beta^2 \hbar^2 (\omega_q^2 + \omega_n^2))]^{-1/2}. \quad (\text{A.11})$$

Com essa função de partição podemos obter as médias

$$\langle \bar{S}_{qn}^z S_{qn}^z \rangle_0 = \frac{\beta h_q^\varphi}{\omega_q^2 + \omega_n^2}, \quad \langle \bar{\varphi}_{qn} \varphi_{qn} \rangle_0 = \frac{\beta h_q^z}{\omega_q^2 + \omega_n^2}. \quad (\text{A.12})$$

Por meio de uma transformada de Fourier no espaço de frequências, podemos obter as funções de correlação para os campos,

$$\langle \bar{S}_q^z(\tau) S_q^z(\tau') \rangle_0 = \frac{1}{(\beta\hbar)^2} \sum_{\omega_n} \frac{\beta h_q^\varphi}{\omega_q^2 + \omega_n^2} e^{i\omega_n \Delta\tau} = \frac{h_q^\varphi}{2\epsilon_q} \frac{\cosh(\omega_q \Delta\tau + \beta\epsilon_q/2)}{\sinh(\beta\epsilon_q/2)}, \quad (\text{A.13a})$$

$$\langle \bar{\varphi}_q(\tau) \varphi_q(\tau') \rangle_0 = \frac{1}{(\beta\hbar)^2} \sum_{\omega_n} \frac{\beta h_q^z}{\omega_q^2 + \omega_n^2} e^{i\omega_n \Delta\tau} = \frac{h_q^z}{2\epsilon_q} \frac{\cosh(\omega_q \Delta\tau + \beta\epsilon_q/2)}{\sinh(\beta\epsilon_q/2)}, \quad (\text{A.13b})$$

sendo  $\Delta\tau = \tau - \tau'$ . Mesmo com esses resultados, o valor esperado da hamiltoniana quadrática ainda será dado por  $\langle H_0 \rangle_0 = (1/2) \sum_q \epsilon_q \coth(\beta\epsilon_q/2) = \sum_q \epsilon_q (n_q + 1/2)$ .

## Apêndice B

### Interação de Suhl-Nakamura

A interação de Suhl-Nakamura consiste em um acoplamento indireto entre os spins nucleares de uma rede. Nesses sistemas, seja por meio de abordagens convencionais, como a de HP, ou pela abordagem quântica da AHAC, usualmente obtemos uma hamiltoniana contendo termos de segunda ordem que pode ser decomposta em três partes,

$$H_2 = H_e + H_N + H' , \quad (\text{B.1})$$

sendo a primeira uma hamiltoniana contendo apenas operadores eletrônicos, a segunda uma hamiltoniana contendo apenas operadores nucleares e  $H'$  um termo de acoplamento entre os dois tipos de operadores, que tratamos como uma perturbação. A interação de Suhl-Nakamura surge desse último termo, por meio de uma teoria de perturbação [25–27, 33]. Nessa abordagem, consideramos que essa perturbação nos fornecerá correções para a energia de nossos estados excitados. Considerando correções até segunda ordem, temos

$$\epsilon_m = \epsilon_m^0 + \langle m | H' | m \rangle + \sum_k \frac{\langle m | H' | k \rangle \langle k | H' | m \rangle}{\epsilon_m^0 - \epsilon_k^0} , \quad (\text{B.2})$$

onde  $\epsilon_m^0$  ( $\epsilon_k^0$ ) representa as energias do auto-estado  $|m\rangle$  ( $|k\rangle$ ) da hamiltoniana desacoplada,  $H_e + H_N$ . Esses estados  $|m\rangle$  consistem na combinação de estados eletrônicos e nucleares, assim, eles podem ser reescritos como  $|m\rangle = |m^e, m^N\rangle$ . Como  $H'$  consiste da combinação de operadores de criação e aniquilação eletrônicos e nucleares, a operação  $H' |m\rangle$  resultará em um estado ortogonal à  $|m\rangle$ , logo, a correção de primeira ordem será zero. Para obtermos uma correção de segunda ordem nas excitações de spins nucleares, vamos considerar que nosso sistema eletrônico se encontra no estado fundamental. Assim, apenas os estados  $|k\rangle = |1^e, k^N\rangle$  apresentarão resultados não nulos na soma. No caso de mais de uma sub-rede eletrônica, consideraremos a soma dos estados fundamentais de cada uma delas. Por meio dessa construção, conseguimos eliminar os operadores eletrônicos presentes em  $H'$ , nos fornecendo uma correção para os estados nucleares, que pode ser reescrita em forma de uma interação entre esses spins, representada por uma hamiltoniana de Suhl-Nakamura. Para

fins ilustrativos, vamos considerar um acoplamento típico de sistemas FM, representado por

$$H' = \sum_q K \left( a_q^\dagger c_{-q}^\dagger + a_{-q} c_q \right) . \quad (\text{B.3})$$

Adotando as considerações apresentadas, obtemos

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\langle m | H' | k \rangle \langle k | H' | m \rangle}{\epsilon_m^0 - \epsilon_k^0} &= K^2 \sum_q \sum_{k^N} \frac{\langle m^N | a_{-q} c_q | k^N \rangle \langle k^N | a_{-q}^\dagger c_q^\dagger | m^N \rangle}{(m^N - k^N) \epsilon_q^N - \epsilon_q^e} \\ &\approx -K^2 \sum_q \frac{1}{\epsilon_q^e} \langle m^N | c_q^\dagger c_q | m^N \rangle , \end{aligned}$$

onde utilizamos  $\epsilon_q^e \gg \epsilon_q^N$ . Essa correção pode ser reescrita como uma interação, dada pela hamiltoniana de Suhl-Nakamura

$$H_{SN} = -K^2 \sum_q \frac{1}{\epsilon_q^e} c_q^\dagger c_q . \quad (\text{B.4})$$

As excitações dos spins nucleares do sistemas são obtidas somando essa interação com a hamiltoniana  $H_N$ .

## Apêndice C

### Artigos Publicados

Neste apêndice são apresentadas as primeiras páginas dos artigos finalizados, apresentados no texto. A apresentação dos artigos está em ordem cronológica.

O primeiro artigo deriva do desenvolvimento apresentado no capítulo IV, para a análise do fenômeno de ressonância em sistemas antiferromagnéticos. Sua publicação foi feita em agosto de 2024 no periódico *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* [90].

No segundo artigo, apresentamos a construção da AHACQ, conforme foi mostrado no capítulo III. No momento, encontra-se em fase de revisão por pares no periódico *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Aqui apresentamos a primeira página disponível na plataforma *arXiv* [75].

# C.1 Unveiling antiferromagnetic resonance: A comprehensive analysis via the self-consistent harmonic approximation

Journal of Magnetism and Magnetic Materials 606 (2024) 172393



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/jmmm](http://www.elsevier.com/locate/jmmm)



Research article

## Unveiling antiferromagnetic resonance: A comprehensive analysis via the self-consistent harmonic approximation

G.C. Villela, A.R. Moura\*

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



### ARTICLE INFO

#### Keywords:

Phase transition  
Renormalization  
Coherent states  
Spintronics

### ABSTRACT

The Self-Consistent Harmonic Approximation (SCHA) has demonstrated efficacy in discerning phase transitions and, more recently, in elucidating coherent phenomena within ferromagnetic systems. However, a notable gap in understanding arises when extending this framework to antiferromagnetic models. In this investigation, we employ the SCHA formalism to conduct an in-depth exploration of the Antiferromagnetic Resonance (AFMR) within both Antiferromagnetic (AF) and Spin-Flop (SF) phases. Our analysis includes thermodynamic considerations from both semiclassical and quantum perspectives, with comparisons drawn against contemporary experimental and theoretical data. By incorporating a treatment utilizing coherent states, we investigate the dynamics of magnetization precession, a fundamental aspect in comprehending various spintronic experiments. Notably, the SCHA demonstrates excellent agreement with existing literature, showcasing its simplicity and efficiency in describing AFMR characteristics, even close to the transition temperature.

### 1. Introduction and motivation

The Condensed Matter Physics community faces numerous challenges, and the development of spintronic devices occupies a central place [1,2]. In order to replace electronic-based devices with those that use spin as a degree of freedom, it is essential to have the ability to manipulate spin currents. Magnetic insulators are particularly interesting for sustaining spin currents as they reduce energy losses and provide higher frequency operation than traditional electronic devices [3]. In this scenario, Spin-Transfer Torque (STT) and Spin Pumping (SP) are often used for the creation, manipulation, and detection of spin currents in the vicinity of interfaces involving magnetic insulators. In the STT process, a spin current is injected into the insulator due to the spin accumulation near the interface [4,5]. In contrast, SP involves the spin current generation by using an oscillating microwave field that provides an angular momentum leaking to the material in contact with the magnetic insulator [6]. Although these processes were initially described for Ferromagnetic (FM) samples, they work equally well in Antiferromagnetic (AFM) insulators [7]. Indeed, for many decades, a considerable fraction of spintronics was primarily based on FM with minor interest in AFM. However, more recently, AFM spintronics has gained attention and proved advantageous over FM applications [8, 9]. For instance, AFM insulators are insensitive to external magnetic perturbations and provide vanishing stray fields due to the absence of macroscopic magnetization. Additionally, due to the AFM coupling, AFM frequencies reach up to THz while FM frequencies are restricted

to the order of GHz. A comprehensive review of AFM spintronics can be found in Refs. [10–13].

The SP mechanism is widely used to generate spin currents. It involves applying magnetic fields to create a coherent precession of magnetization. A static magnetic field is used to align the spin field, while an oscillating field supports the coherent dynamics. Then, by adjusting the static magnetic field intensity to give long-wavelength magnons with the same frequency as the oscillating field, a resonating condition occurs. This leads to an increasing population of low-energy magnons, which leak as spin currents into materials in contact with the magnet. During those magnetic resonance experiments, the entire spin field exhibits synchronous dynamics, and its behavior is formally described by coherent states, which were initially used to derive a fully quantum model of the radiation fields [14], as well as coherent magnons [15–17]. Provided that coherent states are the states that show minimum uncertainty, they are considered as the more classical-quantum states [18]. Consider, for instance, a particle in a harmonic potential represented by a Coherent State (CS). In this scenario,  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ , while the wave function describes a dispersionless wave packet that moves harmonically around the minimum of the potential.

The resonating spin field exhibits similar behavior, wherein the classical fields are represented by the phase angle  $\varphi$  around the  $z$ -axis and the associated conjugate momentum,  $S^z$ . From a classical perspective, the fields  $\varphi_i$  and  $S_j^z$  at sites  $i$  and  $j$ , respectively, satisfy the

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [gabriel.villela@ufv.br](mailto:gabriel.villela@ufv.br) (G.C. Villela), [antonimoura@ufv.br](mailto:antonimoura@ufv.br) (A.R. Moura).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2024.172393>

Received 28 May 2024; Received in revised form 19 July 2024; Accepted 29 July 2024

Available online 2 August 2024

0304-8853/© 2024 Elsevier B.V. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.

## C.2 The quantum self-consistent harmonic approximation: A unified framework for quantum spin systems

### The Quantum Self-Consistent Harmonic Approximation: A Unified Framework for Quantum Spin Systems

G. C. Villela<sup>1,\*</sup> and A. R. Moura<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36570-900, Viçosa, Minas Gerais, Brazil*

(Dated: March 23, 2026)

The Self-Consistent Harmonic Approximation (SCHA) has been utilized to investigate quantum and thermal phase transitions within magnetic models and, more recently, in spintronic applications. The SCHA methodology involves utilizing simple harmonic Hamiltonians, which are augmented with renormalization parameters that incorporate high-order fluctuations typically overlooked by conventional Linear Spin-Wave (LSW) theories. Although this approach exhibits reasonable accuracy for models defined by large spin values, its reliability diminishes when applied to quantum systems with  $S = 1/2$ . The traditional development of SCHA has incorporated semiclassical assumptions that obscure quantum effects. In this study, we introduce a quantum framework for the SCHA that eliminates the need for semiclassical approximations. Our Quantum Self-Consistent Harmonic Approximation (QSCHA) utilizes the spin coherent states formalism within a fully quantum formulation. Consequently, we derive a novel renormalization parameter that accurately integrates quantum corrections. To assess the efficacy of this new approach, we apply the QSCHA to analyze the critical temperature transitions across various well-documented magnetic models. The findings, combined with the simplified operational procedure relative to other conventional interacting spin-wave methodologies, suggest that QSCHA is a promising tool for advancing research in quantum magnetism and spintronics.

#### I. INTRODUCTION AND MOTIVATION

Quantum magnetism remains one of the most active areas in condensed matter physics, providing the theoretical framework for understanding correlated phenomena such as magnetic ordering, quantum phase transitions, and collective excitations. Additionally, the investigation of quantum magnetism is a fundamental piece in the development of spintronics [1–3]. The microscopic description of these effects is commonly formulated in terms of the Heisenberg Hamiltonian, which encapsulates the exchange interactions between localized spins in insulating magnetic materials. However, despite its apparent simplicity, this model exhibits a rich variety of behaviors that challenge both analytical and numerical methods, particularly in low-dimensional or frustrated systems. Over the past few decades, significant effort has been devoted to developing approximate schemes capable of capturing quantum and thermal fluctuations beyond mean-field treatments. The continuous search for more accurate and efficient methods to describe the quantum dynamics of spin systems underscores the importance of exploring new theoretical approaches to the Heisenberg model.

Several theoretical frameworks have been developed to address the complexity of quantum spin systems. Linear and nonlinear spin-wave theories, based on bosonic representations such as the Holstein-Primakoff [4] or Dyson-Maleev [5, 6] representations, provide valuable insights into low-temperature regimes where quantum fluctua-

tions are small. Alternatively, the Schwinger-boson formalism [7, 8] extends this treatment by preserving spin rotational symmetry and enabling the study of disordered or frustrated phases. Beyond these discrete-spin approaches, field-theoretical descriptions, which include the nonlinear sigma model and path integral formulations, offer a continuum perspective suitable for long-wavelength excitations and renormalization-group analysis [9, 10]. Despite their success, these methods face limitations in describing intermediate-temperature behavior or strongly anharmonic regimes, motivating the development of self-consistent and variational schemes that incorporate quantum and thermal effects on an equal footing.

In recent history, the Self-Consistent Harmonic Approximation (SCHA) has been effectively utilized to assess the critical temperature [11–14], the topological Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition [11, 13, 15–21], and the large-D quantum phase transition [22–26] within a diverse range of magnetic models. Within the SCHA framework, the Hamiltonian is expressed in terms of a second-order expansion concerning the operators  $\hat{\phi}$  and  $\hat{S}^z$ . The influence of higher-order perturbations is incorporated through renormalization parameters that exhibit temperature dependence, which are subsequently resolved via a self-consistent integral equation. Consequently, the SCHA retains the advantages inherent to a quadratic Hamiltonian while incorporating corrections from higher-order spin-wave interactions. Furthermore, it has been established by Moura and Lopes that the SCHA is fully compatible with the coherent state approach [27]. As a result, the SCHA formalism represents a viable option for investigating magnetization precession phenomena applied in spintronic processes [28, 29].

Notwithstanding the relative achievements observed,

\* gabriel.villela@ufv.br

† antoniomoura@ufv.br