



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JAVIER DEL CRISTO LÓPEZ ORTIZ

**ESTUDO DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E
EXCITAÇÕES DE SPINS EM MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS E
ANTIFERROMAGNÉTICOS**

Recife
2015

JAVIER DEL CRISTO LÓPEZ ORTIZ

**ESTUDO DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E
EXCITAÇÕES DE SPINS EM MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS E ANTIFERROMAGNÉTICOS**

Tese apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física da Universidade
Federal de Pernambuco, como requisito
parcial para a obtenção do título de Doutor
em Física.

Orientador:
Prof. Dr. SERGIO MACHADO REZENDE
Universidade Federal de Pernambuco

Recife
2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB4-532

L864e López Ortiz, Javier del Cristo.
 Estudo de propriedades magnéticas e excitações de spins em materiais
 ferromagnéticos e antiferromagnéticos / Javier del Cristo López Ortiz. –
 Recife: O Autor, 2015.
 306 f.: fig., tab.

 Orientador: Sérgio Machado Rezende.
 Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.
 Física, 2015.
 Inclui referências e apêndices.

 1. Magnetismo. 2. Ferromagnetismo. 3. Antiferromagnetismo. I.
 Rezende, Sérgio Machado (Orientador). II. Título.

 538 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2015-18

JAVIER DEL CRISTO LÓPEZ ORTIZ

**ESTUDO DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E
EXCITAÇÕES DE SPINS EM MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS E ANTIFERROMAGNÉTICOS**

Tese apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física da Universidade
Federal de Pernambuco, como requisito
parcial para a obtenção do título de Doutor
em Física.

Aprovada em: 08/05/2015.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. SERGIO MACHADO REZENDE
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. ANTONIO AZEVEDO DA COSTA
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. FLÁVIO MENEZES DE AGUIAR
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. ADALBERTO FAZZIO
Examinador Externo
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Prof. Dr. ROBERTO LÁZARO RODRIGUEZ-SUÁREZ
Examinador Externo
UNIVERSIDADE CATÓLICA DO CHILE

DEDICATÓRIA

*Con amor y cariño a mis padres **Fredis Manuel** y **Gilma Rebeca** por haberme dado la vida, por brindarme su amor incondicional en todos los momentos de mi vida y por creer siempre en mis sueños.*

*A mi esposa **Luz Elena** por su paciencia y comprensión, por haber sacrificado su tiempo a mi lado durante esta ardua labor y especialmente por ser siempre mi princesa.*

*A mis hijos **Juan Diego** y **Camilo Andrés***

A todos ellos por el afecto y apoyo incondicional que me dan las fuerzas para seguir adelante...

AGRADECIMENTOS

Primeiro quero agradecer a Deus por me dar a oportunidade de conseguir uma vitória mais na minha vida, por me dar as forças que eu preciso nos tempos difíceis e dar graças também por todas as coisas maravilhosas que me permite ver todos os dias. Seguidamente, quero expressar de maneira muito especial minha gratitude a través destas linhas a meus amigos mais próximos: Juan Carlos Piña Velásquez, Hans García Mejía, Sandro Vagner Lima, Anderson Monteiro Amaral, Albert Stevens Reina Oca e Gabriel Fonseca Guerra, pela ajuda significativa e incondicional que eles me deram. Também não quero esquecer a meu amigo Jairo Opsino com quem estou muito agradecido, pois seus conselhos me indicaram o caminho que tinha que escolher na física alguma vez na minha vida. Assim mesmo, estendo meus agradecimentos a todos meus colegas da pós-graduação com quem compartilhe sua sabedoria nas salas de aulas. Além do anterior, dou meus agradecimentos a todos os professores do departamento de física, mas quero ressaltar minha enorme admiração principalmente por meu professor Sergio Machado Rezende, por sua sabedoria e paciência. Igualmente, também ressalto o respeito e admiração pelos professores Eduardo Padrón Hernández, Flavio Menezes de Aguiar, Antônio da Costa e Fernando de Araújo Machado.

Finalmente, dou as graças à Coordenação de aperfeiçoamento de pessoal de nível superior CAPES e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq pelo suporte financeiro que fizeram possível esta tese.

Resumo

Nesta tese tratamos teoricamente algumas propriedades magnéticas e excitações de spins em materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos com o objetivo de interpretar as medidas e observações experimentais. Usamos a formulação de ondas de spins de Holstein-Primakoff para investigar propriedades da dinâmica de propagação de ondas de spins no material ferrimagnético YIG e também no sistema antiferromagnético FeF_2 . Para cada um deles, desenvolvemos modelos teóricos que permitiram ajustar as relações de dispersão de ondas de spins medidas experimentalmente nesses. Além disso, investigamos a renormalização da energia de mágnons usando o formalismo das funções de Green de dois tempos dependentes da temperatura de Bogoliubov-Tyablikov. A aplicação para o YIG, permitiu calcular as variações da relação de dispersão para mágnons com a temperatura. Também se investigou a renormalização da energia de mágnons no sistema FeF_2 , mas esta vez considerando uma aproximação do tipo RPA¹. Na renormalização da energia foram consideradas duas contribuições: exchange isotrópica tipo Heisenberg e anisotropia uniaxial. Em nossas considerações, foi incluída a dependência com a temperatura da anisotropia uniaxial que permitiu estimar o campo crítico de transição de spin-flop para o limite de estabilidade da fase antiferromagnética. Também, foi feito um estudo teórico e experimental da anisotropia magneto cristalina do material antiferromagnético RbMnF_3 , baseado nas interações de campo cristalino e interação de spin-órbita, com o objetivo de calcular a variação com a temperatura do campo de spin-flop. As ondas de spins em YIG foram estudadas em mais detalhes calculando as taxas de relaxação por processos de espalhamento de 3-mágnons e 4-mágnons. Igualmente foram estimadas empregando campos magnéticos intensos da ordem de 10^2 kOe. Finalmente, estudamos propriedades térmicas de transporte de mágnons em YIG submetido a campos magnéticos intensos. Calculamos o calor

¹Random Phase Approximation

específico de mágnons e a condutividade térmica em baixas temperaturas e campos magnéticos externos intensos para serem comparados com as medidas experimentais encontrando um bom acordo entre teoria e experimento [145].

Palavras Chaves: Excitações de Spins. Materiais Ferromagnéticos. Materiais Antiferromagnéticos. Renormalização da Energia de Mágnons. Anisotropia Magneto Cristalina. Taxas de Relaxação de Mágnons.

Abstract

In this thesis we theoretically treat some magnetic properties and excitations of spins in ferromagnetic and antiferromagnetic materials in order to interpret measurements and experimental observations. We use the formulation of quantization of spin waves of Holstein-Primakoff to investigate properties of the spin wave propagation dynamics in the ferrimagnetic material YIG and also in the antiferromagnetic system FeF_2 . For each of them, we have developed theoretical models to adjust the dispersion relations of spin waves measured experimentally in these systems. In addition, we investigated the magnon energy renormalization using the formalism of two-time temperature dependent Green's functions of Bogoliubov-Tyablikov. The application for the YIG allowed calculate the variation of the dispersion relation for magnons with temperature. We also investigate the magnon energy renormalization in the system FeF_2 , but this time considering an approximation of the RPA type. In the energy renormalization were considered two contributions: exchange isotropic Heisenberg and uniaxial anisotropy type. In our calculations the temperature dependence of the uniaxial anisotropy field allows estimating the critical spin-flop transition for the antiferromagnetic phase stability limit. Also, we have undertaken a theoretical and experimental study of the magneto crystalline anisotropy of the antiferromagnetic material RbMnF_3 , based on the crystal field interactions and spin-orbit interaction, in order to calculate the variation with temperature of the field spin-flop. The spin waves in YIG were studied in more detail calculating the relaxation rate due to 3-magnons and 4-magnons scattering processes considering strong magnetic fields of hundreds of kOe. Finally, we have studied thermal transport properties of magnons in YIG subject to intense magnetic fields. We have, calculate of the specific heat and thermal conductivity of magnons at low temperatures and high fields to compare with the experimental measurements

finding a good agreement between theory and experiment [145].

Keywords: Excitations of Spins. Ferromagnetic Materials. Antiferromagnetic Materials. Renormalization of Magnons Energy. Anisotropy Magneto-Crystalline. Rates of Relaxation of Magnons.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Interação entre um par de momentos magnéticos associados a dois elétrons localizados nas posições $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{r}_j$	33
1.2	Distribuição no espaço dos momentos magnéticos de um cristal ferromagnético.	41
1.3	Representação geométrica da configuração dos spins de um material ferromagnético num campo magnético externo aplicado.	44
1.4	Representação pictórica entre o numero de desviação de spin n_i e a componente z do spin.	47
1.5	Representação geométrica da estrutura cristalina correspondente a uma célula unitária do YIG [16].	55
1.6	Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda.(a) Para campo magnético aplicado $H_0 = 0.00$ kOe, (b) Para campo magnético aplicado $H_0 = 0.20$ kOe.	57

1.7	Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda, ressaltando os efeitos da interação dipolar e o campo magnético aplicado H_0 . Para os gráficos (a), as relações de dispersão são desenhadas na faixa $0 \leq x \leq 0.02$ e os gráficos (b) são desenhados na faixa $0 \leq x \leq 0.03$. Nos dois conjuntos de curvas, cada uma de elas é desenhada para um valor fixo de campo magnético aplicado H_0 . Estes valores de H_0 variam desde 0.00 até 1.50 kOe em passos de 0.10 kOe. Para todas as relações de dispersão, o ângulo de espalhamento é $\theta_{\mathbf{k}} = 0$ de forma que $\mathbf{k} \parallel H_0$	58
1.8	Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda. Os gráficos em (a) compara nosso modelo sem ajuste, é dizer, equação (1.63) com os dados experimentais [43]. Os gráficos em (b) são o modelo teórico ajustado e os dados experimentais. As relações de dispersão foram obtidas sem campo magnético aplicado.	59
1.9	Estrutura cristalina do material antiferromagnético FeF_2	60
1.10	Estrutura do desdobramento dos níveis de energia do íon Fe^{2+} no material antiferromagnético FeF_2 [49].	62
1.11	Ilustração da distribuição dos íons magnéticos num material antiferromagnético de duas sub-redes.	64

- 1.12 (a) Medidas do espectro de excitação de mágnon-fônon para o FeF_2 usando espalhamento inelástico de nêutrons. As medidas foram feitas num campo externo nulo $H_0 = 0$ para uma temperatura de $T = 4.2$ K [51]. (b) Comparação dos dados experimentais do gráfico (a) (pontos vermelhos) com o resultado obtido do fitting empregando a equação (1.78) como modelo teórico de ajuste (linha sólida). O melhor ajuste, fornece para os parâmetros λ_i da equação (1.77) os valores $\lambda_0 = 1.7088 \times 10^{-5}$, $\lambda_1 = 1.0654$, $\lambda_2 = 0.3155$ respectivamente. A partir do fitting encontramos diretamente o valor $H_E = 598.6232$ kOe para o campo de exchange. Usando o valor encontrado ajustado de H_{crit} junto com equação $H_{crit} = \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$ obtemos o valor $H_A = 186.0121$ kOe para o campo de anisotropia. 72
- 1.13 (a) Curvas de frequências em função de $t = k_z/k_z^{max}$. Neste gráfico há seis curvas cada uma para um valor fixo de campo magnético aplicado, para a curva preta o valor de campo magnético aplicado é $H_0 = 100$ kOe as curvas seguintes foram feitas com incrementos de 100 kOe cada uma delas até alcançar a curva de cor magenta onde $H_0 = 600$ kOe. (b) Curvas de frequências como uma função do campo magnético aplicado para $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, a linha vermelha corresponde à solução com sinal positivo da equação 1.74 e denotamos ela por $\omega_0^{(+)}$. A linha azul corresponde ao valor absoluto da solução com sinal negativo da mesma equação e é denotada por $|\omega_0^{(-)}|$. A linha preta é o valor de campo para o qual $H_0 = H_{crit}$ 75
- 1.14 Representação pictórica dos processos de confluência y splitting na interação de três mágnons. 78

2.1	Curvas de frequências renormalizadas (pretas) e não renormalizadas (vermelhas) para as ondas de spin no YIG quando o campo magnético aplicado tem valor igual a 1.0 kOe, quando os valores atribuídos à temperatura são 0.0 K, 60.0 K, 120.0 K e 180.0 K. Para calcular a curva vermelha usamos a equação (2.35). Os valores dos parâmetros envolvidos na equação (2.35) que foram empregamos são dados na tabela 1.1. A curva preta foi calculada empregando a equação (5.78) e novamente foram usados os mesmos valores da tabela 1.1 para os parâmetros em (5.78).	92
2.2	Curvas de frequências renormalizadas (pretas) e não renormalizadas (vermelhas) para as ondas de spin no YIG quando o campo magnético aplicado tem valor igual a 1.0 kOe, quando os valores atribuídos à temperatura são 240.0 K, 300.0 K, 350.0 K e 400.0 K. Para calcular a curva vermelha usamos a equação (2.35). Os valores dos parâmetros envolvidos na equação (2.35) que foram empregamos são dados na tabela 1.1. A curva preta foi calculada empregando a equação (5.78) e novamente foram usados os mesmos valores da tabela 1.1 para os parâmetros em (5.78).	94
3.1	Representação gráfica das magnitudes das intensidades nas interações de exchange numa célula unidade do material antiferromagnético FeF_2 .	99
3.2	Configuração geométrica da interação entre o campo magnético externo aplicado e os spins médios do cristal antiferromagnético FeF_2 .	103
3.3	Comparação dos dados experimentais de J. Strempfer, <i>et al</i> [71, 72] da magnetização espontânea para o FeF_2 , com o resultado teórico fornecido pela equação (3.24), na ausência de campo magnético externo.	108
3.4	Comparação dos dados experimentais de J. Strempfer, <i>et al</i> [71, 72] da magnetização espontânea para o FeF_2 , com o resultado teórico fornecido pela equação (3.24), na ausência de campo magnético externo.	109

3.5	Comparação dos dados experimentais das referências [71, 72], com o resultado fornecido pela função de ajuste (3.25).	110
3.6	Comparação entre os dados de frequências de ressonância antiferromagnética experimental [45], com o ajuste dessas medidas usando um modelo do tipo expressado pela equação (3.25).	113
3.7	(a) Comparação das medidas experimentais da constante de anisotropia magneto cristalina $\kappa_1(T)$ [73], com o resultado teórico fornecido pela equação (3.33) para o material FeF_2 , num campo magnético externo nulo. (b) Comparação do modelo teórico de Ohlmann e Tinkham usando os mesmos dados da referência [73], tomando condições iguais de campo magnético externo nulo e temperaturas menores que T_N	116
3.8	Variação da constante de exchange efetiva reduzida $J_{eff}(T)/J_{eff}(T_0)$, como uma função da temperatura, para temperaturas $T < T_N$	118
3.9	Comparação do campo critico no limite de estabilidade da fase antiferromagnética calculado usando a equação (3.73), com o resultado experimental [48].	133
4.1	Variação com a temperatura da magnetização do RbMnF_3 medida num campo magnético estático de magnitude 1.0 kOe aplicado na direção [100]. A figura interior, mostra a derivada da susceptibilidade magnética com a temperatura e calculada numericamente [108].	139
4.2	(a) Variação com a temperatura da susceptibilidade magnética χ_{ac} no RbMnF_3 medida com $H = 0$ kOe, $h_{ac} = 4.0$ Oe e $f = 87$ Hz. Inverso da susceptibilidade na região paramagnética [108].	140
4.3	(a) Variação com o campo aplicado na direção [100] da magnetização em RbMnF_3 medida a $T = 2$ K. (b) Derivada da magnetização respeito campo magnético para diferentes valores da temperatura.	141

4.4	(a) Variação com a temperatura do campo de spin-flop em RbMnF_3 medido com o campo aplicado na direção $[100]$. (b) Variação com a temperatura da constante anisotropia magnética, os círculos vermelhos são os valores obtidos pelas medidas do campo de spin-flop e a linha tracejada são as medidas obtidas por Ince [94] por meio da frequência AFMR.	142
4.5	Definições das direções ζ' e ζ'' , como também os ângulos θ e δ . Mas as direções do eixo trigonal e da magnetização são indicadas por z e ζ respectivamente.	148
4.6	Variação da constante de anisotropia magnética relativa como uma função da temperatura no RbMnF_3 . Os pontos verdes representam os valores dos dados experimentais da figura 4.4 e a curva sólida corresponde ao melhor ajuste com o modelo desenvolvido para os valores dos parâmetros $a = 19.5$ e $\alpha\lambda = 20.4 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente. As três curvas tracejadas adicionais, vermelha, azul e roxo são para os valores de $\alpha\lambda = 22.0$, $\alpha\lambda = 18.0$ e $\alpha\lambda = 20.0 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente.	155
5.1	Ilustração geométrica dos processos de espalhamento de 3-mágnons inversos aos processo de confluência e splitting ilustrados na figura 1.14. .	161
5.2	Comparação das relações de dispersão $\omega_{\mathbf{k}}$ e $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ definidas pelas equações (5.17) e (5.19). Se assume que as duas expressões são aplicáveis ao YIG na primeira zona de Brillouin. Para realizar as estimativas numéricas das taxas de relaxação, é necessário fazer uma comparação entre estas relações. Por esta razão, são desenhadas como uma função do vetor de onda reduzido k/k_{ZB} , e assim poder observar seus comportamentos em função de k	165
5.3	Ilustração geométrica da interação de dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ no espaço 3-dimensional para formar um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_s$. O processo em consideração é sujeito ao princípio conservação do um momento linear.	167

5.4	Comparação da função $\sin\theta_2$ e os polinômios de Taylor $P_2(\cos\theta_2)$ e $P_{14}(\cos\theta_2)$ e também com o polinômio de aproximação $P_a(\cos\theta_2)$ no intervalo $[0, \pi]$	170
5.5	Representação pictórica da interação de três mágnons num processo de splitting.	177
5.6	Soma das taxas de relaxação calculadas, para os processos de espalhamentos de 3-mágnons de tipo splitting e confluência.	183
5.7	Taxas de relaxação $\eta_{\mathbf{k}}^{(3m)}$ como uma função do campo magnético externo, para valores fixos do vetor de onda na primeira zona de Brillouin como também da temperatura. Os valores atribuídos ao vetor de onda são $q = 2k/k_{ZB} = 0.1$ para o gráfico (a), $q = 0.3$ para o gráfico (b), $q = 0.4$ para o gráfico (c) e $q = 0.5$ para o gráfico (d) respectivamente.	184
5.8	Ilustração pictórica da interação de dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente, para criar um par novo com vetores de onda $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_4$, de forma que o momento e a energia são conservados.	185
5.9	Taxas de relaxação como função do vetor de onda e da temperatura. A curva tracejada representa a taxa de relaxação calculada numericamente para o YIG quando a temperatura é 300 K e é função do vetor de onda racionalizado $q = k/k_m = 2k/k_{ZB}$. A linha sólida representa um polinômio de ajuste. O gráfico interior corresponde à taxa de relaxação como uma função da temperatura para o valor específico de $2k/k_{ZB} = 0.5$	188
5.10	Comparação entre as magnitudes das frequências ω_0 e ω_M . A linha vermelha é para ω_M , a linha azul para ω_0 e o ponto de interseção marcado pela linha preta corresponde ao valor onde $\omega_0 = \omega_M$	191
5.11	Racionalização da parte integral das taxas de relaxação de 4-mágnons	198
5.12	Comparação da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG calculada com a equação (5.119) e o respectivo ajuste da mesma usando a equação (5.121), onde os coeficientes C'_{mn} s para os valores de campo magnético considerado de 0 kOe, 70 kOe, 200 kOe e 300 kOe, estão dados nas tabelas A.1, A.1, A.1 e A.1 respectivamente.	201

5.13	Taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG em função do campo magnético externo, calculada com a equação (5.119) para diferentes valores de temperatura e vetor de onda $q = 2k/k_{ZB} = 0.4$	202
6.1	(a) Variação da magnetização espontânea com a temperatura para o YIG [141]. (b) Modelo de ajuste para os dados de Anderson usando a equação 6.6.	208
6.2	Mudança no aspeto geométrico da superfície que representa à energia exchange no espaço recíproco com o aumento da magnitude do vetor de onda na primeira zona de Brillouin. Para os quatro gráficos de superfície temos que $k_x = k_y = k_z$. Assim temos em: (a) $k_x = 1.00 \times 10^{-6}k_{ZB}$, (b) $k_x = 0.40k_{ZB}$, (c) $k_x = 0.80k_{ZB}$, (d) $k_x = 1.00k_{ZB}$ respectivamente, tomando $k_{ZB} = \pi/a$	209
6.3	Comparação dos resultados fornecidos pelos modelos de ajuste para a magnetização espontânea. (a) Equação (6.7) sem correção alguma. (b) Equação modificada (6.9) considerando os efeitos de simetria esférica da superfície de energia.	210
6.4	Estimação da constante de exchange como uma função da temperatura a partir dos dados experimentais de magnetização espontânea do YIG.	211
6.5	Calor específico de mágnons a volume constante em YIG como uma função do campo magnético para valores fixos de temperatura.	214
6.6	Calor específico de mágnons a volume constante em YIG como uma função da temperatura para valores fixos de campo magnético. A curva preta é a diferença das curvas do calor específico para 0 kOe e 70 kOe respectivamente e comparada com os dados de Boona <i>et. al.</i> [145].	215
6.7	Curvas de calor específico a volume constante de mágnons em campos magnéticos muito intensos em YIG, quando os valores do campo magnético aplicado são fixos e temperaturas menores que 300 K. As estimações das curvas foram feitas usando a equação (6.17).	216

6.8	Condutividade térmica de mágnons em YIG como uma função da temperatura para campos magnéticos aplicados muito intensos. As curva vermelha e azul são calculadas usando a equação (6.29) e a curva preta e a diferença da vermelha com a azul e é comparada com as medidas realizadas por Boona <i>et. al.</i> [145].	221
6.9	Condutividade térmica de mágnons em YIG como uma função da temperatura para três valores de campo magnético aplicado muito. As curvas são calculadas usando a equação (6.29) e a estimação delas é estendida até temperaturas próxima à temperatura ambiente.	222

LISTA DE TABELAS

1.1	Valores dos parâmetros do YIG usados para calcular as frequências de oscilação dos mágnons ferromagnéticos, onde $D = 2JSa^2$ para uma estrutura cubica simples. Estes valores foram tirados da referencia [15].	54
1.2	Aproximação a primeira ordem dos operadores de spin das sub-redes A e B respectivamente.	66
5.1	Valores permitido para os índices dos operadores de criação e aniquilação do $\mathcal{H}^{(4M)}$. Aqui são mostrados quais termos de $\mathcal{H}^{(4M)}$ produzem contribuições diferentes de zero para os estados $ i\rangle$ e $ f\rangle$	185
5.2	Valores para os parâmetros de ajuste C'_{mn} s do modelo 5.121, que simplifica a representação integral (5.119) da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando é aplicado um campo magnético externo intenso. . . .	199
6.1	Valores obtidos para os parâmetros α'_j s e β'_j s do modelo de ajuste 6.6, para a magnetização espontânea usando o método de otimização de Nelder-Mead.	207
A.1	Coefficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 = 0.0$ kOe.	243

A.2	Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 =$ 70.0 kOe.	243
A.3	Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 =$ 200.0 kOe.	244
A.4	Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 =$ 300.0 kOe.	244

1	Conceitos Básicos	24
1.1	Introdução	24
1.2	Interações magnéticas: Hamiltoniano de spin	25
1.2.1	Hamiltoniano de partículas carregadas num campo eletromagnético	26
1.2.2	Inclusão do spin no Hamiltoniano magnético	29
1.3	Ondas de spin em ferromagnetos: tratamento quântico	41
1.3.1	Diagonalização da parte quadrática do Hamiltoniano ferromagnético	51
1.3.2	Gráficos das relações de dispersão para o YIG	54
1.4	Sistemas materiais antiferromagnéticos	60
1.5	Ondas de spin em antiferromagnetos	62
1.5.1	Diagonalização da parte quadrática do Hamiltoniano antiferro- magnético de duas sub-redes com spins opostos	68
1.5.2	Relações de dispersão para o material FeF_2	70
1.6	Interações entre mágnons	74
2	Renormalização da Energia de Mágnons em Ferromagnetos	79
2.1	Funções de Green de Dois tempos e dependentes da temperatura	79
2.1.1	Definições das funções de Green de dois tempos	80
2.1.2	Equações de movimento para as funções de Green	81
2.1.3	Representação espectral das funções de Green retardada e avançadas	82

2.2	Teoria das funções de Green na renormalização da energia dos mágnons num ferromagneto	84
2.3	Avaliação numérica das frequências renormalizadas dos mágnons em YIG	89
3	Renormalização da energia de mágnons no antiferromagneto FeF_2	96
3.1	Cálculo da constante de anisotropia uniaxial de primeira ordem no FeF_2	97
3.2	Aplicação da aproximação RPA para renormalizar a energia de mágnons num sistema antiferromagnético de duas sub-redes com anisotropia uniaxial	118
3.2.1	Renormalização da energia de mágnons no antiferromagneto de duas sub-redes	123
3.2.2	Procedimentos para avaliação numérica da energia renormalizada de mágnons em FeF_2	126
4	Anisotropia magnética do composto antiferromagnético RbMnF_3	135
4.1	Resultados experimentais	138
4.2	Formulação do modelo teórico para calcular a anisotropia magnética no RbMnF_3	142
5	Cálculo das taxas de relaxação em processos de espalhamento de 3-mágnons e 4-mágnons no YIG	156
5.1	Cálculo das taxas de relaxação em processos de espalhamento de 3-mágnons em YIG	157
5.1.1	Elementos matriciais do Hamiltoniano de 3-mágnons para os processos de confluência e splitting	159
5.1.2	Dinâmica da relaxação de 3-mágnons	160
5.1.3	Reaproximando as expressões das taxas de relaxação de 3-mágnons para os processos de confluência e splitting	163
5.2	Cálculo das taxas de relaxação em processos de espalhamento de 4-mágnons em YIG	182

5.3	Cálculo das taxas de relaxação de ondas de spins em campos magnéticos intensos em YIG	189
6	Propriedades térmicas de mágnons no YIG em campos magnéticos externos muito intensos	203
6.1	Propriedades térmicas de mágnons em YIG, em campos magnéticos intensos	204
6.1.1	Ajuste da magnetização espontânea do YIG em função da temperatura	204
6.2	Calor específico a volume constante de mágnons em YIG	212
6.3	Condutividade Térmica dos Mágnons	217
7	Conclusões	224
	REFERÊNCIAS	228
	APÊNDICES	241
A	Complementos adicionais ao cálculo das taxas de relaxação	242
A.1	Polinômios de ajuste para as superfícies calculadas das taxas de relaxação de 4-magnons em campos intensos	242
B	Publicações Relacionadas com a Tese	245
C	Programas utilizados para realizar as estimações numéricas da tese na linguagem WOLFRAM-MATHEMATICA	246
C.1	Descrições gerais dos programas	246

CAPÍTULO 1

CONCEITOS BÁSICOS

1.1 Introdução

Os fenômenos magnéticos são conhecidos desde a antiguidade e sempre têm chamado a atenção do homem. Então o magnetismo, se converteu numa ciência que evoluiu muito desde seu início, e as principais razões que conduziram aos progressos alcançados até hoje estão os enormes desenvolvimentos feitos nas inúmeras aplicações de materiais magnéticos, como também a grande quantidade de trabalhos científicos realizados em muitos campos da física, da química e da matemática. Esta tese tem como objetivo entender melhor algumas propriedades de certos tipos de sistemas magnéticos. Especificamente, concentraremos nossa atenção no tratamento dos seguintes problemas: a renormalização das ondas de spins no sistema ferrimagnético YIG (Yttrium Iron Garnet), a relaxação das ondas de spins também em YIG, os efeitos da anisotropia uniaxial na renormalização da energia do sistema antiferromagnético FeF_2 , o estudo da anisotropia magnética no material antiferromagnético RbMnF_3 e por último o tratamento de fenômenos de transporte em YIG.

Em relação ao anterior, vamos propor modelos teóricos que ajudem a explicar satisfatoriamente os dados obtidos das medidas experimentais no tratamento dos problemas

mencionados no paragrafo anterior. A tese está organizada da seguinte maneira: no capítulo 1 são introduzidos os conceitos básicos, onde são formuladas as interações magnéticas principais às que estão sujeitos os íons magnéticos nos sistemas ferromagnéticos e por suposto também os antiferromagnéticos. Adicionalmente, é introduzida a formulação de ondas de spins. No capítulo 2, fazemos o tratamento da renormalização da energia dos mágnons em sistemas ferromagnéticos usando a formulação das funções de Green de dois tempos de Bogoliubov-Tyablikov. Seguidamente, no capítulo 3 analisamos os efeitos que produzem a consideração de uma anisotropia uniaxial sobre a renormalização da energia de mágnons de um sistema antiferromagnético. Além disso, continuamos no capítulo 4 estudando a anisotropia magnética do composto anti-ferromagnéticos RbMnF_3 . No capítulo 5, fazemos um cálculo bem sofisticado das taxas de relaxação para processos de espalhamento de 3-mágnons e 4-mágnons no material ferrimagnético YIG. O último assunto tratado está no capítulo 6, onde estudamos as propriedades térmicas de mágnons no YIG quando são aplicados campos magnéticos externos muito intensos. Para finalizar, encontramos no capítulo 7 as conclusões finais deste trabalho e no apêndice estão incluídos os programas feitos na linguagem MATHEMATICA e ao final de todo o manuscrito estão as referências que foram utilizadas durante o desenvolvimento desta tese.

1.2 Interações magnéticas: Hamiltoniano de spin

A seguir, faremos uma descrição geral de várias interações magnéticas já conhecidas. Também, trataremos de dar maior ênfase nos assuntos relacionados com o spin eletrônico. A razão principal de porquê fazer estas considerações, recaem no fato de que a maioria das propriedades magnéticas que apresentam certo conjunto de materiais são de origem eletrônico. Não obstante, a inclusão do spin implica tomar considerações de natureza relativística.

1.2.1 Hamiltoniano de partículas carregadas num campo eletromagnético

É bem sabido da eletrodinâmica clássica, que o campo eletromagnético pode ser caracterizado pelo potencial escalar elétrico $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e pelo potencial vetorial magnético $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. O potencial escalar elétrico contribui para a energia potencial elétrica de um conjunto de cargas e o potencial vetorial magnético contribui para a energia cinética de partículas carregadas por meio do momento linear de acordo com [1, 2]:

$$\begin{aligned} V &= q\Phi(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{\Pi} &= \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \tag{1.1}$$

Por outro lado, um fato muito conhecido da eletrodinâmica clássica é que os potenciais escalar elétrico e vetorial magnético não são únicos. Então como é tradicional, faremos a escolha do calibre de Coulomb para fixar o potencial vetorial magnético, isto é, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Adicionalmente, é importante lembrar que a relação que existe entre os vetores indução magnética $\mathbf{B}$ e o potencial vetorial $\mathbf{A}$ é estabelecida pela expressão:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{1.2}$$

De acordo com o estabelecido até este ponto, deve ficar claro que existem infinitas possibilidades para a escolha de $\mathbf{A}$. Assim uma possível escolha que está em total acordo com os fatos experimentais e que satisfaz o calibre de Coulomb é aquela na qual o vetor indução magnética $\mathbf{B}$ é uniforme. Portanto, essa relação é dada por:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \tag{1.3}$$

Na expressão (1.3), $\mathbf{r}_0$ é um ponto arbitrário que marca a origem de coordenadas para o calibre. Como nosso propósito é tentar encontrar expressões exatas para a energia não teremos problemas na escolha da origem da transformação de calibração, é importante anotar que no caso de expressões aproximadas não poderemos dizer o mesmo já que tais expressões não são invariantes ante a escolha da origem.

Continuando como o estabelecido acima, denotaremos por $\mathbf{r}_0$ a posição de uma partícula que possui um momento magnético permanente $\boldsymbol{\mu} \neq 0$. Esta partícula gera um potencial vetorial magnético em sua vizinhança que de acordo com a eletrodinâmica clássica é dado pela expressão seguinte:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3} \quad (1.4)$$

Em sistemas tais como átomos ou moléculas, onde existem elétrons e núcleos e que são submetidos a campos externos o potencial vetorial magnético total num ponto $\mathbf{r}$ é uma soma de três contribuições: o potencial externo, a contribuição eletrônica e a contribuição nuclear.

O potencial vetorial magnético criado por um momento magnético $\boldsymbol{\mu}$, pode ser usado para obter o vetor de indução magnética num ponto qualquer ao redor. Para isso, usamos a relação que existe entre estes dois vetores, dada pela equação (1.2). Assim usando as equações (1.2) e (1.4) obtemos:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{\boldsymbol{\mu}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3} - 3 \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^5} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \right) \quad (1.5)$$

Em um sistema de átomos ou moléculas, denotaremos a $\mathbf{r}_{0i}^{(e)}$ como a posição do i -ésimo elétron no sistema e $\mathbf{r}_{0i}^{(N)}$ a posição do i -ésimo núcleo também no mesmo sistema. Com isso o potencial vetorial magnético total fica na forma:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_{ext}(\mathbf{r}) + \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0i}^{(e)}) + \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0i}^{(N)}) \quad (1.6)$$

Considerando que o sistema de partículas carregadas está num campo eletromagnético externo, de acordo com as regras da mecânica quântica, o operador Hamiltoniano que

descreve a dinâmica do sistema de partículas é dado pela expressão:

$$\mathcal{H}_{em} = \sum_i \left(\frac{1}{2m_i} (p_i - q_i \mathbf{A}_i)^2 + q_i \Phi_i \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (1.7)$$

sendo $i \neq j$ na soma do segundo termo e $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ denota a separação relativa entre um par de partículas qualquer. Note que se não houver campo eletromagnético, $\Phi_i = 0$ e $\mathbf{A}_i = 0$ e o Hamiltoniano fica:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum'_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (1.8)$$

A equação (1.8) mostra explicitamente que a interação entre pares de partículas ocorre somente através de interações coulombianas. Assim, usando a condição do calibre escolhido, a parte que corresponde à energia cinética da expressão (1.7) pode ser expandida para separar a contribuição do campo eletromagnético externo da contribuição coulombiana intrínseca. Nestas circunstâncias, a parte que inclui os potenciais externos pode ser agrupada e o Hamiltoniano toma a forma:

$$\bar{\mathcal{H}} = \sum_i \left(q_i \Phi_i - \frac{q_i}{m_i} \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{p}_i + \frac{q_i^2}{2m_i} A_i^2 \right) \quad (1.9)$$

Assumindo agora que temos apenas um campo magnetostático e que as partículas em consideração são elétrons de carga elétrica $q_i = -e$ e massa em repouso $m_i = m_0$ a contribuição $\bar{\mathcal{H}}$ que depende dos potenciais ao usar a expressão do potencial vetorial dado em (1.4) torna-se:

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{e}{2m_0} \sum_i (\mathbf{B} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)) \cdot \mathbf{p}_i + \frac{e^2}{8m_0} \sum_i |\mathbf{B} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)|^2 \quad (1.10)$$

Se o momento angular do i -ésimo elétron é denotado por $\mathbf{l}_i = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{p}_i$, uma expressão mais compacta pode ser usada para representar a contribuição do campo magnetostático externo na energia do sistema de elétrons de forma que o Hamiltoniano que chamaremos simplesmente Hamiltoniano magnético fica dado pela expressão

seguinte:

$$\mathcal{H}_{mag} = \mathcal{H}_0 + \frac{e}{2m_0} \sum_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_i + \frac{e^2}{8m_0} \sum_i (B^2 r_{i0}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_{i0})^2) \quad (1.11)$$

Este Hamiltoniano ainda não permite calcular todas as propriedades magnéticas pois não considera o spin do elétron como será mostrado [3].

1.2.2 Inclusão do spin no Hamiltoniano magnético

O spin é um grau de liberdade característico das partículas elementares. Ele é interpretado como um momento angular intrínseco que satisfaz todas as propriedades gerais da teoria do momento angular em mecânica quântica [4, 5, 6, 7]. Portanto, representarmos o operador de spin de um elétron por $\mathbf{S}$ que tem três componentes espaciais S_x , S_y e S_z , que satisfazem as regras de comutação:

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \quad (1.12)$$

Seguindo a teoria geral do momento angular, podemos construir auto-estados próprios para o operador de spin usando seu módulo ao quadrado e a componente z , que são denotados por $|s, m_s\rangle$ e os operadores S^2 e S_z satisfazem as equações de auto-estados seguintes:

$$\begin{aligned} S^2|s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle \\ S_z|s, m_s\rangle &= \hbar m_s|s, m_s\rangle \end{aligned} \quad (1.13)$$

Numa notação mais compacta, o operador de spin pode ser expresso em termos das matrizes de Pauli como $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$, onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o vetor com componentes σ_x , σ_y e σ_z as quais são definidas por meio de:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Usaremos estes últimos elementos para introduzir o spin dos elétrons pelo menos qualitativamente.

Interação do spin dos elétrons com campos magnéticos

Na presença de um campo magnético $\mathbf{B}$, a energia do elétron tem duas contribuições, uma devido ao momento magnético $\boldsymbol{\mu}_s$ associado ao momento angular intrínseco de spin $\mathbf{S}$ dada por $\mathcal{H}_{sf} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$, e outra devido ao momento angular orbital $\mathbf{L}$ dada por $\mathcal{H}_L = -\boldsymbol{\mu}_L \cdot \mathbf{B}$, onde $\boldsymbol{\mu}_L = -e\mathbf{L}/2m_0$, sendo e a magnitude da carga elétrica fundamental e m_0 a massa em repouso do elétron. Além do mais, o momento magnético de spin do elétron é proporcional à razão giromagnética g_e , e seu valor experimental é igual a 2.0023. Assim, o momento magnético de spin eletrônico é $\boldsymbol{\mu}_s = -g_e e\mathbf{S}/2m_0$. No caso de um sistema de elétrons, a contribuição à energia magnética por todos esses momentos magnéticos de spin é:

$$\mathcal{H}_{sf} = \left(\frac{g_e \mu_B}{\hbar} \right) \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B} \quad (1.15)$$

onde μ_B é chamado de magneton de Bhor e representa o momento magnético fundamental com um valor igual a $e\hbar/2m_0$ no sistema internacional de unidades [3].

Interação spin-órbita

Esta interação também estará incluída no Hamiltoniano magnético e podemos introduzi-la pelo menos fenomenologicamente como no caso da interação do spin com um campo magnético. Para isso, suponha que um elétron está ao redor de um núcleo se movimentando com velocidade $\mathbf{v}_e$. A carga elétrica do núcleo cria um campo elétrico na sua vizinhança $\mathbf{E}_N$, o qual atua diretamente no elétron como se fosse um campo elétrico externo. Por sua vez, o núcleo percebe a presença de um campo magnético que é produzido pelo movimento do elétron, o qual denotamos simplesmente como $\mathbf{B}_N$ e dado por.

$$\mathbf{B}_N = \frac{1}{c^2} (\mathbf{E}_N \times \mathbf{v}_e) \quad (1.16)$$

O campo $\mathbf{B}_N$ é o mesmo que perceberia o elétron se fosse o núcleo a se movimentar. Ao campo elétrico podemos associar um potencial central $\Phi_N(\mathbf{r})$, o que é uma aproximação muito boa no casos de átomos em campos ligados. Assim, o campo elétrico é dado por

$\mathbf{E}_N = -\nabla\Phi_N(\mathbf{r})$ e o campo de indução magnética ficará como:

$$\mathbf{B}_N = \frac{1}{c^2}(\mathbf{v}_e \times \nabla\Phi_N(\mathbf{r})) \quad (1.17)$$

Devido a que o potencial $\Phi_N(\mathbf{r})$ é central, sua dependência será exclusivamente só da distância radial que ha ao centro de força, isto indica que $\nabla\Phi_N(\mathbf{r}) = r^{-1}(\partial\Phi_N/\partial r)\mathbf{r}$.

Em relação ao anterior, agora denotaremos o momento angular orbital dos elétrons que têm masa em repouso m_0 como $\mathbf{l}_e = \mathbf{r} \times m_0\mathbf{v}_e = \mathbf{r} \times \mathbf{p}_e$. Este resultado permite expressar o campo indução magnética da seguinte maneira:

$$\mathbf{B}_N = -\left(\frac{1}{m_0c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi_N}{\partial r}\right) \mathbf{l}_e \quad (1.18)$$

A relação dada pela equação (1.18) permite introduzir a interação do spin eletrônico com o campo de indução magnética nuclear $\mathbf{B}_N$ que fará uma contribuição à energia magnética e que representaremos como $\mathcal{H}_{so} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B}_N$. Então, a forma de incluir explicitamente o spin é a través da relação $\boldsymbol{\mu}_e = -(g_e e/2m_0)\mathbf{S}$, sendo g_e o fator giro-magnético do elétron, que no final conduz até:

$$\mathbf{B}_N = \xi_N^{(e)}(r)\mathbf{S} \cdot \mathbf{l} \quad (1.19)$$

A quantidade $\xi_N^{(e)}(r)$ que aparece em (1.19) carateriza a intensidade da interação do acoplamento, que de acordo com os procedimentos anteriores é dada pela seguinte expressão:

$$\xi_N^{(e)}(r) = -\frac{g_e e}{2m_0c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi_N}{\partial r} \quad (1.20)$$

Na realidade, essa expressão está errada pelo fato de não incluir a precessão de Thomas, o qual é um efeito de natureza relativística. Para corrigir o erro da equação dita, procederemos de uma forma um pouco intuitiva.

Vamos supor que temos um giroscópio e que um de seus eixos próprios de rotação

está em movimento precessional com velocidade angular Larmor $\boldsymbol{\omega}_L = (e/m)\mathbf{B}$, então o movimento precisa ser corrigido no sistema inercial onde o núcleo seja considerado como fixo, neste caso a velocidade angular muda de acordo com $\boldsymbol{\omega} \rightarrow \boldsymbol{\omega}_L + \boldsymbol{\omega}_T$, onde $\boldsymbol{\omega}_T$ é a precessão de Thomas e dada por:

$$\boldsymbol{\omega}_T = -\frac{1}{2c^2}(\mathbf{v} \times \mathbf{a}) \quad (1.21)$$

Aqui, $\mathbf{v}$ é a velocidade do elétron, $\mathbf{a}$ sua aceleração. Podemos usar lei de forças, que liga o campo elétrico e aceleração, isto é, $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$. Portanto, podemos determinar com facilidade $\boldsymbol{\omega}_T$, cujo valor é igual $\boldsymbol{\omega}_T = (e/2m_0c^2)(\mathbf{v} \times \mathbf{E})$. Se usamos a relação entre os campos elétrico e magnético do tipo (1.16), chegaremos então ao resultado em que $\boldsymbol{\omega}_T = -\boldsymbol{\omega}_L/2$.

Do anterior, chegamos a perceber que correção de Thomas é transcendental pois conduz à adição de um fator 1/2 que corrige a constante de acoplamento spin-órbita, que agora em sua forma corrigida transforma-se em.

$$\xi_N(r) = -\frac{g_e e}{4m_0 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi_N}{\partial r} \quad (1.22)$$

Finalmente, para um sistema de muitos elétrons, o potencial que atua num elétron só, é a contribuição de todas as partículas restantes que têm carga. Esses potenciais, são não locais e suas derivadas não estão muito bem definidas, mas em forma aproximada é possível considerar a contribuição de spin-órbita à energia magnética como:

$$\mathcal{H}_{so} = \sum_i \xi(r_i) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{L}_i \quad (1.23)$$

onde agora ξ é fator de acoplamento corrigido e dado pela equação (1.22) [3].

Interação dipolar magnética

Uma contribuição adicional à energia magnética é aquela que leva em conta a interação entre um par de momentos magnéticos, ou equivalentemente entre um par de spins.

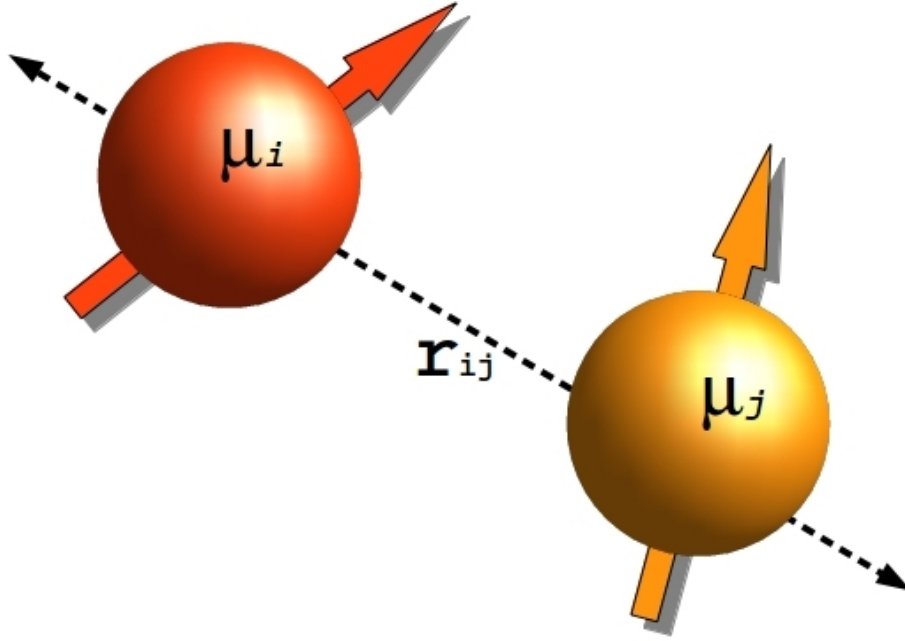


Figura 1.1: Interação entre um par de momentos magnéticos associados a dois elétrons localizados nas posições $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{r}_j$.

Como nas situações anteriores, trataremos o caso de spins eletrônicos, mas os resultados continuam sendo válidos para qualquer tipo de íon que possui carga total diferente de zero.

Consideremos dois elétrons, um na posição $\mathbf{r}_i$ e outro localizado em $\mathbf{r}_j$ como ilustrado na figura 1.1. O elétron que está posicionado em $\mathbf{r}_j$, cria um campo de indução magnética na posição do outro elétron em $\mathbf{r}_i$ e assim reciprocamente. Esses campos são denotados como $\mathbf{B}_j(\mathbf{r}_i)$ e $\mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j)$ respectivamente. Então, a contribuição à energia magnética, que denotaremos como $\mathcal{H}_{ss}$ é dada por:

$$\mathcal{H}_{ss} = -\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B}_j(\mathbf{r}_i) = -\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j) \quad (1.24)$$

Para encontrar a expressão explícita de $\mathcal{H}_{ss}$ precisamos do campo de indução magnética, mas para isso, usaremos a equação (1.4). Em consequência, é importante lembrar dois fatos fundamentais. O primeiro é usar a identidade $\nabla_j^2 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^{-1} = 4\pi\delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ e o segundo que faremos é tomar $\nabla_i \nabla_j = (\nabla_i \nabla_j - \frac{1}{3}\delta_{ij} \nabla^2) + \frac{1}{3}\delta_{ij} \nabla^2$. Com isto, o campo

de indução é o seguinte.

$$\mathbf{B}_j(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_j \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) - \frac{\boldsymbol{\mu}_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} + 3 \frac{\boldsymbol{\mu}_j \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^5} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \right) \quad (1.25)$$

Se comparamos as expressões (1.5) e (1.25), percebemos que surge um novo termo nesta última equação, o qual é uma correção para levar em conta o efeito de contato entre os spin. Além disso, é evitado uma singularidade no ponto $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$. Portanto, a contribuição à energia magnética proveniente da interação entre um par momentos magnéticos, ou um par spins é igual a:

$$\mathcal{H}_{ss} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j \delta(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{\boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) \quad (1.26)$$

O primeiro termo de $\mathcal{H}_{ss}$ é o termo que chamamos antes de contato entre os spin e explicitamente ele toma a forma:

$$\mathcal{H}_{cont} = -\frac{2\mu_0}{3} \boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j \delta(\mathbf{r}_{ij}) \quad (1.27)$$

Por outro lado, acostuma-se de chamar termo dipolar à parte adicional de $\mathcal{H}_{cont}$ em (1.26), ou seja, o restante de $\mathcal{H}_{ss}$. Assim para chegar a ter uma expressão onde apareçam explicitamente os spins dos elétrons é suficiente lembrar a relação existente entre spins eletrônicos e momentos magnéticos, isto é, $\boldsymbol{\mu}_i = -(g_e \mu_B / \hbar) \mathbf{S}_i$. Portanto, a contribuição à energia magnética por parte de $\mathcal{H}_{dip}$ fica em forma explícita no final como:

$$\mathcal{H}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{g_e \mu_B}{\hbar} \right)^2 \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (1.28)$$

Para incluir todas as possíveis interações dipolares presentes no sistema, temos que tomar uma soma dupla em i e j na equação para $\mathcal{H}_{dip}$ [3, 8].

Interação de exchange

Nesta seção trataremos uma das interações mais conhecidas do magnetismo e também uma das mais importantes. Como veremos, a energia de exchange de um sistema de

partículas carregadas, que aqui serão elétrons, é a contribuição à energia de efeitos eletrostáticos coletivos onde estão envolvidas as propriedades de simetria das funções de onda do sistema de partículas. Então, para poder introduzir as interações de exchange, iniciamos pelo caso mais simples, isto é, consideramos dois elétrons interagindo. Então, cada uma das partículas por separado está ligada a um campo de forças nuclear com carga elétrica igual a Ze . Como os núcleos são mais massivos, seu movimento é desprezível ao se comparar com o movimento dos elétrons¹. Por esta razão, é possível assumir que os núcleos estão fixos no espaço.

Entre as principais suposições que tomaremos em conta estão as seguintes.

- Os centros de carga nuclear são considerados em posições fixas no espaço e cujas localizações são denotadas por $\mathbf{r}_a$ e $\mathbf{r}_b$ respectivamente.
- O Hamiltoniano associado a cada elétron não inclui explicitamente seu spin, embora esse spin seja tomado em conta para construir os estado de dois elétrons. Também não ha nenhuma interação magnética externa que afete o espectro de energia dos elétrons.
- Se $\mathcal{H}_0(\mathbf{r})$ é o Hamiltoniano que descreve a dinâmica de um elétron assumiremos que as soluções do problema de valores próprios $\mathcal{H}_0(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n\varphi_n(\mathbf{r})$ são conhecidas.
- Assumiremos que os átomos interagem fracamente de forma que o Hamiltoniano completo pode ser escrito como a soma de dois Hamiltonianos de elétrons independentes, mais um potencial de interação que depende da separação relativa dos elétrons só. Assim, nossa suposição inclui implicitamente o fato de que os elétrons das camadas mais internas conseguem blindar a carga nuclear. O anterior, está indicando que se U_{eN} e U_{eNN} são as interações elétron-núcleo e núcleo-núcleo respectivamente, então é satisfeita a condição: $|\langle U_{eN} \rangle + \langle U_{NN} \rangle| \ll |\langle U_{ee} \rangle|$. Por-

¹Esta aproximação é chamada aproximação adiabática [4, 5, 6].

tanto, o Hamiltoniano de interação completo toma a forma.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_1) + \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_2) + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (1.29)$$

Em relação aos argumentos anteriores, o fato de ter um Hamiltoniano para um elétron só, independente de interações magnéticas como também ter explicitamente ao spin do elétron mesmo, permite escrever as funções de ondas desses elétrons como um produto de uma função de onda espacial e uma de spin, isto é, $\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{s})$. Assim, as funções de onda para o sistema completo devem ter uma forma como $\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{s}_1, \mathbf{r}_2\mathbf{s}_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$, onde ψ é uma função que depende das coordenadas e χ depende somente dos spins. Também, $\mathbf{s}_1$ e $\mathbf{s}_2$, são os spin dos dois elétrons considerados [8, 9].

Agora reservaremos algumas linhas para introduzir alguns comentários da função de onda total. Em primeiro lugar, as funções de onda que denotamos como Ψ devem satisfazer as propriedades de simetria das partículas indistinguíveis respeito de uma troca simultânea de coordenadas espaciais e de spin dos elétrons, isto em acordo com o principio de exclusão de Pauli. Como os elétrons obedecem a estatística de Fermi-Dirac, as propriedades de simetria de Ψ têm que ser as de uma função antissimétrica, e por isso são representadas pelos determinantes de Slater.

De outra forma, se a função de onda de spin total é simétrica ($S = 1$) as propriedades globais de simetrias são satisfeitas se a função de onda espacial é simétrica. Agora, se a função de onda de spin total é antissimétrica ($S = 0$), a função espacial têm que ser simétrica. Além do mais, para a diagonalização do Hamiltoniano, construiremos um espaço de funções expandido por uma base de tamanho finito com dimensão 4. Para isso, assumiremos também que os dois elétrons estão em seus estados mais baixos de energia, caracterizados pelas funções de onda φ_a e φ_b onde cada estado se encontra com energias E_a e E_b respectivamente.

As funções de base representadas por determinantes de Slater, serão denotadas por

$\{\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4\}$. Também, poderá se apreciar com simplicidade, que formam um conjunto completo ortonormal. Assim, poderemos avaliar explicitamente a matriz associada ao Hamiltoniano $\mathcal{H}$. Então, temos o seguinte conjunto de expressões para as Ψ_i .

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)] \chi_1(\mathbf{s}_1)\chi_1(\mathbf{s}_2) \\ \Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)] \chi_2(\mathbf{s}_1)\chi_2(\mathbf{s}_2) \\ \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi_2(\mathbf{s}_1)\chi_1(\mathbf{s}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi_1(\mathbf{s}_1)\chi_2(\mathbf{s}_2)] \\ \Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi_1(\mathbf{s}_1)\chi_2(\mathbf{s}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi_2(\mathbf{s}_1)\chi_1(\mathbf{s}_2)]\end{aligned}\tag{1.30}$$

Não é difícil ver que os elementos da matriz Hamiltoniana na base $\{\Psi_i\}$, com $i = 1, \dots, 4$ são da forma $\langle \Psi_i | \mathcal{H} | \Psi_j \rangle = (E_a + E_b)\delta_{ij} + \langle \Psi_i | U | \Psi_j \rangle$. Por tanto, para ter definidos explicitamente os elementos $\mathcal{H}_{ij}$ precisaremos definir duas quantidades adicionais que representaremos como J_{ab} e C_{ab} e chamaremos integrais de Exchange e de Coulomb respectivamente.

$$\begin{aligned}J_{ab} &= \int d\mathbf{r}_1^3 \int d\mathbf{r}_2^3 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_a(\mathbf{r}_1)^* \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2)^* \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\ C_{ab} &= \int d\mathbf{r}_1^3 \int d\mathbf{r}_2^3 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2\end{aligned}\tag{1.31}$$

Usando as definições anteriores é possível perceber que os elementos da matriz U que são diferentes de zero vêm dados pelas seguintes expressões: $\langle \Psi_2 | U | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_3 | U | \Psi_3 \rangle = C_{ab}$, $\langle \Psi_2 | U | \Psi_3 \rangle = \langle \Psi_3 | U | \Psi_2 \rangle = -J_{ab}$ e também $\langle \Psi_1 | U | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_4 | U | \Psi_4 \rangle = C_{ab} - J_{ab}$. Portanto, a matriz Hamiltoniana está dada por:

$$\mathcal{H} := (E_a + E_b) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C_{ab} - J_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{ab} & -J_{ab} & 0 \\ 0 & -J_{ab} & C_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{ab} - J_{ab} \end{pmatrix}\tag{1.32}$$

Observando a expressão que define a matriz Hamiltoniana dada na equação (1.32), a diagonalização de $\mathcal{H}$ é reduzida a um subespaço de dimensão 2×2 , onde a matriz

reduzida $\mathcal{H}'$ para ser diagonalizada está definida como:

$$\mathcal{H}' := \begin{pmatrix} C_{ab} & -J_{ab} \\ -J_{ab} & C_{ab} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

Resulta obvio da expressão (1.33), que devemos usar o carácter aditivo da energia, porque do contrario teríamos inconsistência nos valores próprios calculados para $\mathcal{H}$. Em todo caso, acontece que as soluções da equação de valores próprios $\det(\mathcal{H}' - \lambda \mathbf{I}_2) = 0$, onde $\mathbf{I}_2$ é a matriz identidade da ordem 2×2 estão dadas por:

$$\lambda = C_{ab} \pm J_{ab} \quad (1.34)$$

Quando tomamos em conta os resultados da equação (1.34) na diagonalização do Hamiltoniano completo, encontramos que três, dos quatro valores próprios de energia são iguais, portanto eles formaram um tripleto onde o spin total para todos eles é a $S = 0$. O valor próprio de energia restante, é caracterizado porque tem um spin $S = 1$ e este é um singleto. Assim nossos valores próprios de energia ficam definidos por:

$$\begin{aligned} E_s &= E_a + E_b + C_{ab} + J_{ab}, & \text{Singleto } S &= 1 \\ E_t &= E_a + E_b + C_{ab} - J_{ab}, & \text{Tripleto } S &= 0 \end{aligned} \quad (1.35)$$

Vemos então que, se $J_{ab} > 0$, $E_s > E_t$, isto indica então que E_t será a energia do estado base do sistema. Este fato é fundamental, pois explica o comportamento ferromagnético de alguns materiais, e como pode ser visto, este estado é favorecido por um alinhamento paralelo entre os spins. Agora poderemos identificar os estados de $\mathcal{H}$ etiquetando-os pelos valores do spin total e a componente z no spin total, isto é, usando $|S, S_z\rangle$

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_2 + \Psi_3) & |1, 1\rangle &:= \Psi_1 \\ |0, 0\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_2 - \Psi_3) & |1, -1\rangle &:= \Psi_4 \end{aligned} \quad (1.36)$$

Depois de concluir que o exchange direto numa base de orbitais ortonormais favorece ao

ferromagnetismo², passamos a escrever o Hamiltoniano $\mathcal{H}$ em termos dos operadores de spin $\mathbf{s}_1$ e $\mathbf{s}_2$ dos elétrons individuais. Para este propósito, observemos que a diferença de energia entre os estados singleto e tripleto é justamente duas vezes o valor da integral de exchange J_{ab} . O passo seguinte é lembrar que o momento angular de spin total é $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ e que a partir de aqui chegamos a ter que:

$$2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + \frac{1}{2} = \mathbf{S}^2 - 1 = \begin{cases} +1, & \text{Para o estado tripleto.} \\ -1, & \text{Para o estado singleto.} \end{cases} \quad (1.37)$$

Voltando agora para a expressão das energias do singleto e tripleto respectivamente não é difícil ver que o Hamiltoniano pode ser escrito elegantemente da seguinte maneira.

$$\mathcal{H} = K_0 - 2J_{ab}\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \quad (1.38)$$

sendo K_0 uma constante aditiva. Para avançar, apontamos que a energia de exchange pode ser expressada em termos de operadores de spin somente. Este fato que foi inicialmente notado por Dirac pode ser generalizado sem problema a sistemas mais complexos que o caso de dois elétrons.

Para finalizar esta discussão, se em forma geral as componentes orbitais são mantidas fixas, o Hamiltoniano de exchange fica em boa aproximação como:

$$\mathcal{H}_{exc} = -2 \sum'_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.39)$$

onde o apóstrofo no símbolo do somatório está indicando que o caso $i = j$ fica completamente excluído. A quantidade J_{ij} costuma ser chamada de “constante acoplamento de exchange” [8, 9].

²Isto é totalmente equivalente a dizer que $J_{ab} > 0$.

Anisotropia de um íon

Além da anisotropia que pode ser criada pela interação dipolar, existe outra chamada anisotropia de um íon, também chamada anisotropia cristalina. O origem desta forma de anisotropia é devido a que os níveis de energia dos íons magnéticos são afetados de forma muito forte pelo campo cristalino, o que se reflete nos spins por meio da interação de spin-órbita. Seguindo Bleany e Stevens um Hamiltoniano efetivo de spin pode ser escrito na forma mais geral [10]:

$$\mathcal{H}_{1-ion} = -D \sum_i \left(S_i^{(z)} \right)^2 - F \sum_i \left((S_i^{(x)})^2 - (S_i^{(y)})^2 \right) \quad (1.40)$$

onde D e F são os parâmetros de anisotropia magnética. Pode acontecer, que a simetria do cristal favoreça à situação no qual $F = 0$, e a equação (1.40) seja reduzida ao caso de anisotropia uniaxial, de forma que teremos somente um parâmetro de anisotropia magnética, $D \neq 0$. Então, a situação da que estamos falando se apresenta muito em uma ampla variedades de materiais cristalinos. Ali, estão incluídos compostos do tipo: perovskita, rutila, etc. Além do anterior, o parâmetro F em forma muito geral, é uma medida da magnitude da anisotropia no plano xy . Em materiais com simetria cristalina cúbica teremos $D = F \neq 0$. Então, reduzindo à anisotropia de um íon a seu caso mais simples, isto é, uniaxial e considerando além dela somente a interação Zeeman o Hamiltoniano toma a forma:

$$\mathcal{H} = - \sum_i \left(\mu H_0 S_i^{(z)} + D (S_i^{(z)})^2 \right) \quad (1.41)$$

A diagonalização do Hamiltoniano (1.41) é imediata, devido que a única dependência que existe é na componente z total no spin do sítio i , onde seus valores estão compreendidos no intervalo $|m| \leq S$. Assim, os autovalores do Hamiltoniano são da forma $E_m = -(\mu H_0 m + D m^2)$. Obviamente, como os E_m dependem explicitamente de m , haverá um total de $2S + 1$ valores de energia possíveis igualmente espaçados. Além disso, pode-se observar, que há $2S$ excitações, cada uma com frequência diferente, tal que as transições permitidas obedecem a regra de seleção $\Delta m = \pm 1$ [11].

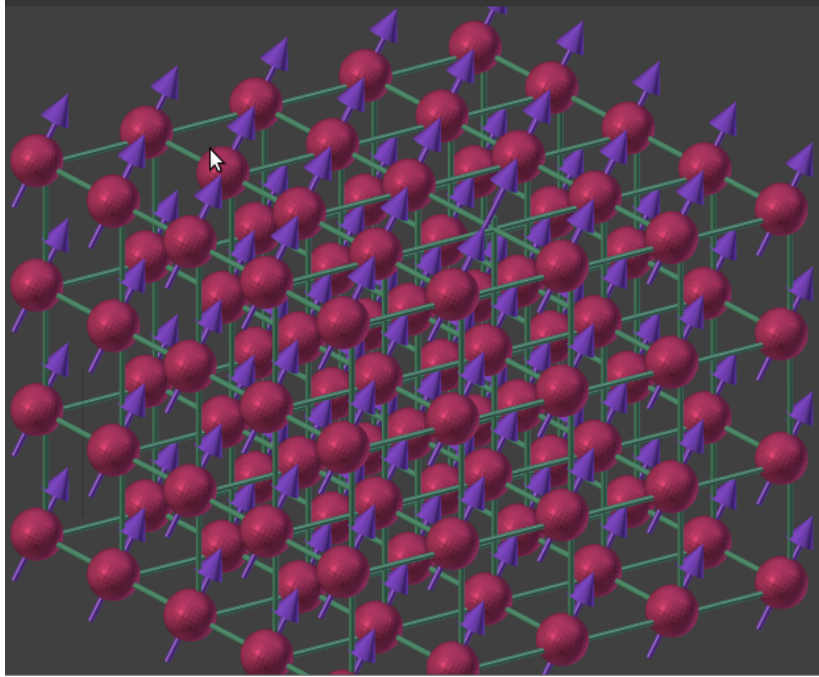


Figura 1.2: Distribuição no espaço dos momentos magnéticos de um cristal ferromagnético.

1.3 Ondas de spin em ferromagnetos: tratamento quântico

A seguir, apresentaremos o tratamento da propagação de ondas de spin num sistema ferromagnético sob o ponto de vista quântico. Assim, para o desenvolvimento da teoria concentraremos toda nossa atenção nas interações mais relevantes que foram discutidas na seção 1.2. Mas antes de detalhar o assunto e progredir no mesmo, começaremos fazendo uma descrição breve do ferromagnetismo como fenômeno que está muito bem estabelecido, isto é mais para ter uma sequência lógica na cadeia de fatos que vamos descrever posteriormente.

Consideremos um sólido cristalino, onde cada íon que faz parte do cristal é caracterizado por ter um momento magnético permanente não nulo, como é mostrado na figura 1.2. Então, o ferromagnetismo, é um fenômeno físico que é produzido pela ordenação de todos os momentos magnéticos desses íons e orientados de tal forma que

eles apontam na mesma direção ao interior do cristal. Além disso, cada um dos momentos magnéticos envolvidos têm a mesma magnitude. Os materiais que apresentam ferromagnetismo são chamados ferromagnéticos. Porém, a interação ferromagnética, é a interação magnética que faz com que os momentos estejam dispostos a se alinhar ao longo da mesma direção e é estendida por todo o sólido.

Um fenômeno que é apresentado por todos os materiais ferromagnéticos reais, é que no interior da amostra, existem regiões onde há um momento magnético total diferente ao momento magnético global do material. Acostuma-se de chamar essas regiões particulares nos ferromagnetos como domínios magnéticos. Também, as superfícies de separação dos domínios são conhecidas como paredes magnéticas. Acontece então, que se um material ferromagnético é submetido ao efeito de um campo magnético muito intenso, os domínios tendem-se a alinhar paralelamente ao campo aplicado, e quando o campo é desligado, parece como se tivesse acontecido um acréscimo dos efeitos magnéticos do material, mas na verdade o que ocorreu foi um alinhamento dos domínios magnéticos parciais numa direção comum, este processo é chamado de saturação magnética, pois o valor da magnetização da amostra alcança um valor limite.

Por outra parte, é natural esperar que os momentos magnéticos individuais de cada íon na rede interajam mutuamente. Assim, haverá lugar a diversas interações que ocorrem num nível microscópico, e porém, para entender o que acontece no interior do sistema, nós formularemos um modelo relativamente elementar que forneça explicação de algumas das propriedades dos ferromagnetos simples. Para isso, vamos supor que o campo magnético externo no qual é colocada nossa amostra, tem magnitude H_0 . Para simplificar um pouco mais a situação, o campo ficará orientado ao longo do eixo z . Então, de todas as possíveis interações que possam acontecer, levaremos em conta somente três: Zeeman, Exchange e Dipolar.

Em relação ao anterior, o Hamiltoniano que empregaremos com essas contribuições, fará possível determinar a interação entre os modos magnéticos de excitação coletiva.

Explicitamente estaremos achando os Hamiltonianos de interação de segunda, terceira e quarta ordem de aproximação. Portanto, se $\mathcal{H}$ é o Hamiltoniano para nossos propósitos ele terá a forma: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Ze} + \mathcal{H}_{Ex} + \mathcal{H}_{Dip}$ onde os termos que fazem parte desta expressão resultam óbvios e vêm dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{Ze} &= -\mu \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i \\ \mathcal{H}_{Ex} &= -2 \sum'_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ \mathcal{H}_{Dip} &= \frac{1}{2} \mu^2 \sum'_{ij} \left(\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right)\end{aligned}\tag{1.42}$$

No conjunto de expressões (1.42), os vetores $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{S}_j$ representam os spins associados com os sítios de rede i e j respectivamente, e a separação relativa entre esses spins é denotada como $\mathbf{r}_{ij}$. Também, para simplificar tomamos o fator $\mu = g\mu_B$ onde g é o fator de Landé e μ_B denota o momento magnético fundamental ou magneton de Bohr. Além disso, para não usar muita simbologia estranha nas equações, as primas das somas estarão indicando de agora em diante que os índices i e j são diferentes excluindo a possibilidade de ter uma singularidade que não descreve nenhum fato físico.

Uma peculiaridade que aparece no conjunto de expressões (1.42), é o fato de não ter na frente o fator $(\mu_0/4\pi)$ que está em algumas das equações da seção 1.2. A explicação de isto é simples: embora tínhamos usado inicialmente o sistema de unidades **MKS** para expressar nossas equações, por razões de simplicidades passaremos a usar o sistema de unidades **CGS** onde as equações passam a serem mais simples algebricamente. Portanto, para ser capaz de estudar as propriedades termodinâmicas e cinéticas dos cristais ordenados magneticamente, é desejável ter na mão um método quântico que permita descrever as interações entre as excitações magnéticas elementares que apareçam.

Voltando a nossa tarefa inicial de buscar os modos normais de um sistema de spins, esqueçamos momentaneamente a interação dipolar de forma que o Hamiltoniano considerado é reduzido a $\mathcal{H}' = \mathcal{H}_{Ze} + \mathcal{H}_{Ex}$. De agora em diante, no tratamento das

interações, as somas em j serão estendida aos primeiros vizinhos e as somas em i serão estendida a todo o cristal. O estado base, é aquele onde todos os spins estão alinhados paralelamente a um campo magnético aplicado D. C. Neste estado, as energias Zeeman e de Exchange atingem seu valor mínimo. Também, se α_{ij} denota o ângulo entre um

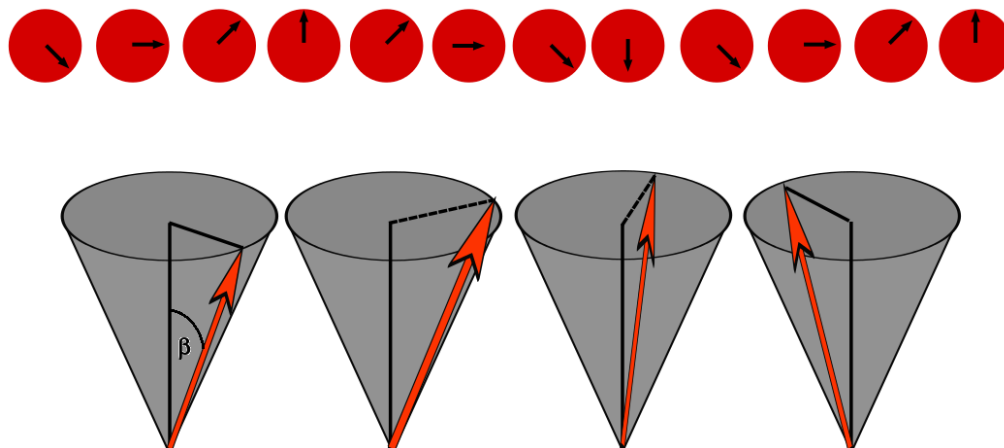


Figura 1.3: Representação geométrica da configuração dos spins de um material ferromagnético num campo magnético externo aplicado.

par de spins vizinhos, a energia de exchange será proporcional a $\cos \alpha_{ij}$. Além disso, esta energia pode chegar a ter um valor enorme, assim para manter-la pequena é suficiente que o ângulo α_{ij} seja pequeno. Então um giro ao redor do eixo z do sistema de spins, dará um valor mais pequeno da energia de exchange do que uma virada de um spin individual. Se o giro não é feito cuidadosamente, mais da metade dos spins podem ficar antiparalelos ao campo magnético externo D. C. aplicado, produzindo uma energia Zeeman muito grande [12].

A configuração de spins mais estável que existe, é apresentada na figura 1.3. Cada spin é desviado o mesmo ângulo β em relação à direção de equilíbrio, o qual recebe o nome de ângulo precessão. Na visão clássica, as extremidades dos spins descrevem uma trajetória circular (no caso mais geral é uma elipse). O ângulo entre um par de spins vizinhos adjacentes é α_{ij} , se este ângulo é pequeno, a energia de exchange é pequena. Também, se o ângulo de precessão é pequeno, a energia Zeeman é pequena. Portanto, esta perturbação do sistema de spins recebe o nome de onda de spins e é um modo

normal da distribuição de spins [8, 9, 12].

O vetor de propagação de uma onda de spin é representado por $\mathbf{k}$, então a distância mais curta entre dois spins paralelos ao longo do vetor de onda $\mathbf{k}$ é seu comprimento de onda λ . Cada onda de spin será descrita por seu vetor de propagação, com $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\hat{\mathbf{k}}$, sendo $\hat{\mathbf{k}}$ o vetor unitário que indica a direção de propagação. Um ponto crucial para descrever uma onda de spin, ao ir da descrição clássica para a quântica, e que precisamos, é de sua amplitude. Então para quantizar amplitude de uma onda de spin, suponhamos que m_z é a componente z do momento magnético total do sistema. Além disso, quando a temperatura é nula sua magnetização do sistema vale $M(0)$. O máximo valor permitido para m_z acontece quando todos os spins são paralelos ao campo e cujo valor é $M(0)V$, sendo V o volume da amostra. Se os spins são deslocados o ângulo β , existe uma diminuição em m_z igual a μ . Isto é similar a virar um spin completamente até ficar antiparalelo ao campo. Neste casos, a componente z do momento magnético total muda de acordo com $m_z = M(0)V - \mu$. Uma onda quantizada desta forma é chamada mágnon. No caso que exista presente mais de um mágnon, o valor de m_z é reduzido em μ por cada mágnon excitado. Assim, se o numero de mágnons com vetor de onda $\mathbf{k}$ é igual a $n_{\mathbf{k}}$, teremos que m_z está dado por.

$$m_z = M(0)V - \mu \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \quad (1.43)$$

A introdução da equação (1.43), é uma maneira razoável e intuitiva de quantizar uma onda de spin. Um fato importante nesta discussão e que não devemos pular, é apontar que a densidade de modos de ondas de spin é muito maior que a densidade de modos magnetostáticos, isto tem como implicação que a maioria das propriedades dos materiais magnéticos podem-se explicar considerando os modos de onda de spin somente.

Nosso primeiro passo do tratamento formal, consiste em re-escrever cada contribuição do Hamiltoniano do sistema, em termos de novos operadores chamados desvios de spin e os quais denotaremos como $a^\dagger$ e a . Assim, o spin do sito i que é identificado por

$\mathbf{S}_i = S_i^{(x)} \mathbf{e}_x + S_i^{(y)} \mathbf{e}_y + S_i^{(z)} \mathbf{e}_z$, será primeiramente rescrito em termos de três novos operadores também de spin e definidos por meio das seguintes expressões:

$$S_i^{(\pm)} = S_i^{(x)} \pm iS_i^{(y)}, \quad S_i^{(z)} = S - a_i^\dagger a_i \quad (1.44)$$

A motivação para introduzir os novos operadores $S_i^{(\pm)}$ e $S_i^{(z)}$ que aparecem em (1.44), é conseguir passar facilmente aos operadores de desvios $a_i^\dagger$ e a_i , fato que é suportado pela discussão na mudança da componente z do momento magnético total e dito através da equação (1.43). Neste caso, o efeito que tem o operador $a_i^\dagger$ é diminuir a componente m_z em uma unidade quântica fundamental de momento magnético no sitio i e a_i faz todo o oposto [8, 9, 12, 13].

Embora não seja dito até aqui, as relações de comutação para as componentes dos spins são as usuais $[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$. Então, amparados nestas regras de comutação, dá para inferir que as relações de comutação que deverão ser satisfeitas pelos operadores de desvios de spins estão contidas no seguinte conjunto de expressões:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = 0 \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (1.45)$$

O número de ocupação dos desvios de spins que representaremos por n_i e que é o valor próprio do operador $a_i^\dagger a_i$, é definido com ajuda da equação (1.43) como $n_i = S - S_{iz}$. Assim, vemos que n_i põe de manifesto a diminuição na componente z do spin, a partir de seu máximo valor S . Agora, os estados próprios do operador número de desvios de spins vamos denota-los como $|n_i\rangle$. Em adição, observamos que os operadores $a_i^\dagger a_i$, $a_i^\dagger$ e a_i satisfazem as seguintes equações:

$$a_i^\dagger a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \quad (1.46)$$

onde o estado próprio do operador numero, é uma abreviação de $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$. Em relação ao anterior, o fato de $\mathbf{S}_i$ ter uma magnitude constante, faz direta a mudança das variáveis $S_i^{(\pm)}$ e $S_i^{(z)}$ para as variáveis $a_i^\dagger$ e a_i . Os operadores de escada $S_i^{(\pm)}$ que

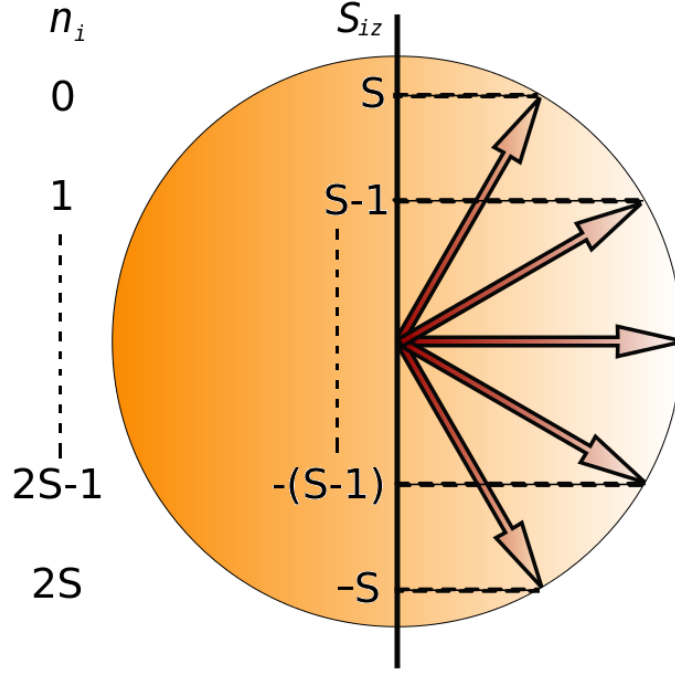


Figura 1.4: Representação pictórica entre o numero de desviação de spin n_i e a componente z do spin.

são usados como operadores independentes têm equações:

$$S_i^{(\pm)} |S_{iz}\rangle = \sqrt{S(S+1) - S_{iz}(S_{iz} \pm 1)} |S_{iz} \pm 1\rangle \quad (1.47)$$

Aproveitando as relações anteriores e o valor S_{iz} em termos de n_i , chegamos as seguintes equações de $S_i^{(\pm)}$.

$$\begin{aligned} S_i^{(+)} |n_i\rangle &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n_i - 1}{2S}\right)^{1/2} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \\ S_i^{(-)} |n_i\rangle &= \sqrt{2S} \sqrt{n_i + 1} \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{1/2} |n_i + 1\rangle \end{aligned} \quad (1.48)$$

Fazendo uma comparação direta entre o conjunto de equações (1.46) e (1.48), chegamos às expressões que relacionam os $S_i^{(\pm)}$ com os operadores de desvios de spins, isto é:

$$S_i^{(+)} = \sqrt{2S} f(a_i^\dagger a_i) a_i, \quad S_i^{(-)} = \sqrt{2S} a_i^\dagger f(a_i^\dagger a_i), \quad S_i^{(z)} = S - a_i^\dagger a_i \quad (1.49)$$

onde a função de operadores f que aparece nas equações anteriores, está definida de

acordo com a seguinte relação:

$$f(a_i^\dagger a_i) = \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} \quad (1.50)$$

Sem precisar de uma análise exaustiva, resulta obvio que seria impossível trabalhar nas soluções de nossos problemas magnéticos ao substituir as equações (1.49) na expressão geral do Hamiltoniano, pois o fator $f(a_i^\dagger a_i)$ impossibilitaria que o fizemos. Por conseguinte, uma solução ao inconveniente consiste em fazer uma expansão em serie de Taylor da função do operador f . Mas para isto, nós temos que garantir uma convergência muito rápida na serie, que acontece só no caso em que o operador $a_i^\dagger a_i/2s$ tenha um valor promédio bastante pequeno. A afirmação anterior é válida somente no limite de baixas temperaturas onde a magnetização é desviada muito pouco do valor que tem no zero absoluto. Efetivamente, pode ser visto da equação (1.43), que a desviação sofrida pela magnetização da temperatura $T = 0$ é:

$$\frac{M(0) - M(T)}{M(0)} = \frac{\langle a_i^\dagger a_i \rangle}{S} \quad (1.51)$$

Em altas temperaturas nossa aproximação é pobre conduzindo a um maior acoplamento entre os estados do Hamiltoniano. O método que acabamos de descrever foi proposto inicialmente por T. Holstein e H. Primakoff para estudar as variações da magnetização nos domínios intrínsecos de um ferromagneto num campo magnético externo [14].

Com o objetivo de diagonalizar o Hamiltoniano, na expansão em serie de f , tomaremos uma aproximação até primeira ordem em $a_i^\dagger a_i$, de forma que os operadores de spins como função dos operadores de desvios de spins são transformados de acordo com:

$$\begin{aligned} S_i^{(-)} &= \sqrt{2S}a_i^\dagger - \frac{1}{2\sqrt{2S}}a_i^\dagger a_i^\dagger a_i, & S_i^{(+)} &= \sqrt{2S}a_i - \frac{1}{2\sqrt{2S}}a_i^\dagger a_i a_i \\ S_i^{(z)} &= S - a_i^\dagger a_i \end{aligned} \quad (1.52)$$

Com a nova forma dos operadores de spins, calcularemos cada uma das contribuições ao Hamiltoniano ferromagnético, de tal forma que fiquem em termos dos operadores

de desvios de spins. Certamente, o caso da interação Zeeman que é a mais simples de todas, ficará dada por:

$$\mathcal{H}_{Ze} = -\mu H_0 N S + \mu H_0 \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (1.53)$$

O primeiro termo na equação (1.53) que é independente dos operadores de desvios de spins, é a contribuição Zeeman da ordem zero. Do mesmo modo, é natural esperar também que existam contribuições da ordem zero por parte dos Hamiltonianos de exchange e dipolar. Em consequência, a adição deles, formarão a energia do ponto zero e não farão parte de nossas computações, inferências e análises, dado que será uma constante aditiva que marca o zero na energia. Seguidamente, o segundo termo também na equação (1.53), é uma contribuição de segunda ordem que ajuda a entender as oscilações harmônicas no espectro energético das ondas de spins no cristal ferromagnético. Também para os casos das contribuições de exchange e dipolar, haverá termos de segunda ordem nos operadores de desvios de spins. Por tanto, todas essas contribuições de segunda ordem serão os constituintes primários da parte harmônica e representa a parte do espectro que não apresenta interação de acoplamento com os diversos modos possíveis. No tratamento das interações de exchange e dipolar existe um elemento adicional que é a aparição das somas duplas, produto de interações mútuas entre os spins em sítios diferentes. Então, vamos fazer algumas suposições que ajudam a simplificar o problema. Assim, a soma que percorre no índice j será tomada a primeiros vizinhos e a soma que percorre no i será estendida por todo o cristal. Por isso, a constante de acoplamento de exchange J_{ij} será simplesmente substituída por J . Neste caso, as primeiras contribuições não nulas de $\mathcal{H}_{Ex}$ que são a ordem: zero, dois e quatro ficam dadas pelas seguintes expressões.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Ex}^{(0)} &= -zJNS^2 \\ \mathcal{H}_{Ex}^{(2)} &= JS \sum'_{ij} \left(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i \right) \\ \mathcal{H}_{Ex}^{(4)} &= \frac{J}{4} \sum'_{ij} \left(a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_j + a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_j - 4a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j \right) \end{aligned} \quad (1.54)$$

Ao usar as equações (1.52) no Hamiltoniano de exchange aparece uma contribuição de ordem seis que não anotamos simplesmente porque não estaremos usando. Da mesma forma a como foi feito antes, escreveremos a contribuição dipolar ao Hamiltoniano até ordem quarta, mas antes precisamos definir algumas quantidades simplificadoras e obviamente úteis, mais exatamente serão funções da posição que não são outra coisa que os coeficientes da expansão. Essas funções têm a seguinte forma funcional.

$$\begin{aligned} F_{ij} &= \frac{3z_{ij}^2 - r_{ij}^2}{r_{ij}^5} & G_{ij}^{(-)} &= \frac{z_{ij}r_{ij}^{(-)}}{r_{ij}^5} & H_{ij}^{(-)} &= \frac{[r_{ij}^{(-)}]^2}{r_{ij}^5} \\ G_{ij}^{(+)} &= (G_{ij}^{(-)})^\dagger & H_{ij}^{(+)} &= (H_{ij}^{(-)})^\dagger \end{aligned} \quad (1.55)$$

Voltando para o Hamiltoniano dipolar mesmo $\mathcal{H}_{Dip}$, os primeiros termos da expansão que não fazem contribuições nulas ao espectro energético das ondas de spins e que são dados como funções dos operadores de spins ficam da seguinte maneira.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Dip}^{(0)} &= -\frac{1}{2}\mu^2 S^2 \sum'_{ij} F_{ij} \\ \mathcal{H}_{Dip}^{(2)} &= \frac{S\mu^2}{4} \sum'_{ij} \left[F_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i + 2a_i^\dagger a_i + 2a_j^\dagger a_j) - 3(H_{ij}^{(-)} a_i a_j + H_{ij}^{(+)} a_i^\dagger a_j^\dagger) \right] \\ \mathcal{H}_{Dip}^{(3)} &= -\frac{3}{4}\sqrt{2}S\mu^2 \sum'_{ij} \left(G_{ij}^{(+)} (a_i^\dagger a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger a_j + \frac{1}{4}a_i^\dagger a_i^\dagger a_i + \frac{1}{4}a_j^\dagger a_j^\dagger a_j) + \right. \\ &\quad \left. G_{ij}^{(-)} (a_i^\dagger a_i a_j + a_j^\dagger a_j a_i + \frac{1}{4}a_i^\dagger a_i a_i + \frac{1}{4}a_j^\dagger a_j a_j) \right) \\ \mathcal{H}_{Dip}^{(4)} &= -\frac{1}{2}\mu^2 \sum'_{ij} F_{ij} \left(a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + \frac{1}{8}a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_j + \frac{1}{8}a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_j \right) \\ &\quad + \frac{3}{16}\mu^2 \sum'_{ij} \left(H_{ij}^{(-)} (a_j^\dagger a_j a_j a_i + a_i^\dagger a_i a_i a_j) + H_{ij}^{(+)} (a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i^\dagger a_j^\dagger a_i) \right) \end{aligned} \quad (1.56)$$

Em forma geral, todos os desenvolvimentos anteriores indicam que a estrutura da expansão do Hamiltoniano que é usado para descrever as propriedades de um cristal ferromagnético usando as interações citadas até aqui e amparadas na condição (1.51), é da forma $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(2)} + \dots$. Isto claramente, mostra que o termo de ordem zero é a energia do ponto zero, o Hamiltoniano de ordem um não faz contribuição

nenhuma à energia, o Hamiltoniano de ordem dois é contribuição harmônica e para as contribuições de ordem três em diante, elas representam os termos que são responsáveis pelas relaxações das ondas de spins. Por isto, os termos de ordem superior a dois, são necessários para explicar os fatos de porque que as ondas de spin não podem sobreviver eternamente num material.

1.3.1 Diagonalização da parte quadrática do Hamiltoniano ferromagnético

O método padrão para diagonalizar a parte quadrática do Hamiltoniano total, é justamente as transformadas de Fourier. A razão física de porque utilizar esse método termina sendo simples. Assim, pode ser visto que a expressão explícita que usáramos para defini a $\mathcal{H}^{(2)}$ e que é a soma de todas as contribuições quadráticas, conterá fatores que relaciona operadores de desvios em posições diferentes. Por exemplo, há termos que são do tipo $a_i^\dagger a_j$ e assim por diante. Então, o que a transformada de Fourier faz basicamente, é pegar o termo do sitio i e levar-nos a operadores $a_{\mathbf{k}}$ que relaciona a todos os sítios na amostra cristalina. Isto indica, que os operadores $a_{\mathbf{k}}$, descrevem efeitos coletivos das interações. Por ista razão de agora em diante sempre falaremos que as ondas de spins não são outra coisa que excitações de natureza coletiva do sistema de spins. A seguir, apresentamos as transformadas de Fourier e suas respectivas transformadas inversas.

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}} & a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger \\ a_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_i & a_{\mathbf{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_i^\dagger \end{aligned} \quad (1.57)$$

Nas equações (1.57), N é o numero total de spins no sistema, $\mathbf{k}$ os vetores de onda e $\mathbf{r}_i$ a posição do sítio i . Também, não é difícil mostrar usando as relações que temos (1.45), que os novos operadores de excitações coletivas satisfazem as regras de comutação seguintes:

$$[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = 0 \quad [a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0 \quad (1.58)$$

Para obter as relações de comutação (1.58) temos usado a seguinte definição da função delta de Kronecker:

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} = \begin{cases} 1, & \text{Se } \mathbf{k} = 0 \\ 0, & \text{Se } \mathbf{k} \neq 0 \end{cases} \quad (1.59)$$

Agora já temos os elementos necessários para dar o passo de operadores de desvios spins aos de excitações coletivas. Para isso, é suficiente substituir os $a_i^\dagger$ e a_i nas contribuições de segunda ordem no Hamiltoniano para ter uma dependência dos operadores de criação e destruição de mágnons $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ e $a_{\mathbf{k}}$ respectivamente. Especificamente, a contribuição de segunda ordem depois da substituição fica dada por uma expressão da forma:

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger) \quad (1.60)$$

onde os coeficientes da soma são dados pelas equações seguintes:

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &= \mu H_0 + 2zJS(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}\hbar\omega_M \text{sen}^2\theta_{\mathbf{k}} \\ B_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{4}\hbar\omega_M \text{sen}^2\theta_{\mathbf{k}} e^{-i2\phi_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (1.61)$$

onde $\theta_{\mathbf{k}}$ e $\phi_{\mathbf{k}}$ são as coordenadas polares esféricas do vetor de onda $\mathbf{k}$. Também, o fator $\gamma_{\mathbf{k}}$ que aparece ali, vem da interação de exchange e está dado por $z^{-1} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}$, onde z é o numero de primeiros vizinhos. Além do mais nesse resultado final, foram feitas mudanças uteis para simplificar as equações. Assim por exemplo o momento magnético é definido como $\mu = g\mu_B = \hbar\gamma$ e a magnetização de saturação é definida por $M_S = (g\mu_B SN)/V$, elas fazem possível definir a: $\omega_M = 4\pi\gamma M_S$, daí teremos que $S\mu^2 N/V = (\hbar\omega_M)/4\pi$. Em efeito, o conjunto de relações definidas em (1.61), representa o caso particular em que o fator desmagnetizante ao longo do eixo z tem valor igual à unidade. Esta situação, assume implicitamente o caso de amostras planas como é o caso que desenvolveremos o longo desta tese.

Aplicação das transformações unitárias de Bogoliubov na diagonalização do Hamiltoniano $\mathcal{H}^{(2)}$ ferromagnético

Resulta evidente da equação (1.60), que o Hamiltoniano quadrático não é diagonal devido à presença dos operadores de criação e destruição de partículas com momentos opostos $\mathbf{k}$ e $-\mathbf{k}$ respectivamente. Para resolver esse problema, precisaremos fazer algumas transformações adicionais que convertem ao Hamiltoniano quadrático numo que seja a soma de osciladores harmônicos independentes, é dizer, que tenha a forma $\sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$. De acordo com isto, a mudança na representação dos operadores de mágnons ficará dada por certas transformações lineares unitárias que relacionam os operadores de excitações coletivas antigos, com outros $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ que também são operadores coletivos, tais relações têm as seguintes formas:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger, & a_{-\mathbf{k}}^\dagger &= v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger & \text{Transformação Direta} \\ \alpha_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}}^\dagger, & \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} & \text{Transformação Inversa} \end{aligned} \quad (1.62)$$

Uma condição necessária para garantir a unitariedade das transformações dadas nas expressões (1.62) é exigir que $u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Esta relação, é fundamental no momento de encontrar as frequências próprias dos modos harmônicos de oscilação do sistema de spins. Agora bem, aproveitando a harmonicidade que os novos operadores de mágnons apresentam, eles podem-se expressar no quadro de Heisenberg simplesmente como $\alpha_{\vec{k}}(t) = \alpha_{\vec{k}}(0) e^{-i\omega_{\vec{k}} t}$, onde as $\omega_{\vec{k}}$ são as frequências próprias de oscilação. Portanto, cada um desses operadores satisfaz a equação de movimento $i\hbar \dot{\alpha}_{\vec{k}}(t) = [\alpha_{\vec{k}}(t), \mathcal{H}^{(2)}]$.

A maneira de proceder para achar as relações de dispersão do sistema de spins é a seguinte: Tomamos os novos operadores de mágnons $\alpha_{\vec{k}}(t)$ e encontramos a equação de movimento explicita usando o Hamiltoniano quadrático $\mathcal{H}^{(2)}$, o lado direito da expressão que aparece no procedimento dependerá dos operadores antigos $a_{\vec{k}}(t)$ e seu transposto hermitiano respectivo. Feito isso, aplicamos as transformações dadas em (1.62), de forma que ambos lados da equação fique em termos de uma classe de operadores somente, para formar assim um sistema de equações homogêneo 2×2 nos coe-

Alguns valores dos parâmetros característicos do YIG

$\gamma = 2.80 \text{ GHz/kOe}$	$a = 12.38 \times 10^{-8} \text{ cm}$
$z = 8$	$g_e = 2.00$
$D = 5.17 \times 10^{-9} \text{ Oe} \cdot \text{cm}^2$	$S = 5/2 \text{ (Para um íon de Fe)}$

Tabela 1.1: Valores dos parâmetros do YIG usados para calcular as frequências de oscilação dos mágnons ferromagnéticos, onde $D = 2JSa^2$ para uma estrutura cubica simples. Estes valores foram tirados da referencia [15].

ficientes das transformações de Bogoliubov. Em consequência, as soluções não triviais do problema de valores próprios, conduz a uma equação polinomial de grau dois que fornece as frequências. Logo após das computações necessárias, chegamos a concluir que as frequências próprias de oscilação vêm dadas pela relação $\omega_{\mathbf{k}} = (A_{\mathbf{k}}^2 - 4|B_{\mathbf{k}}|^2)^{1/2}$, mais explicitamente temos:

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\left(\gamma H_0 + \frac{2zJS}{\hbar}(1 - \gamma_{\vec{k}})\right) \left(\gamma H_0 + \frac{2zJS}{\hbar}(1 - \gamma_{\vec{k}}) + \omega_M \sin^2 \theta_{\vec{k}}\right)} \quad (1.63)$$

De outra parte, os coeficientes das transformações $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ ficam determinados pelas seguintes expressões adicionais.

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{A_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}}}, \quad v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{A_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}}} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \quad (1.64)$$

1.3.2 Gráficos das relações de dispersão para o YIG

A granada de Ítrio-Ferro (YIG), cuja formula estequiométrica é $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, possui uma estrutura cristalina cúbica com grupo espacial $Ia - 3d$ como é apresentado na figura 1.5 [16]. O valor da constante de rede para a célula cúbica unidade é $a = 12.376 \times 10^{-8} \text{ cm}$ e contém oito unidades da fórmula com 160 átomos dos quais somente os íons Fe^{3+} possuem um momento magnético não nulo igual a $5\mu_B$, sendo μ_B o magneton de Bhor cujo valor é $9,27 \times 10^{-21} \text{ erg G}^{-1}$. Dos 40 íons Fe^{3+} numa célula unitária, 16 estão localizados em sítios octaédricos e 24 estão localizados em sítios tetraédricos. Cada íon

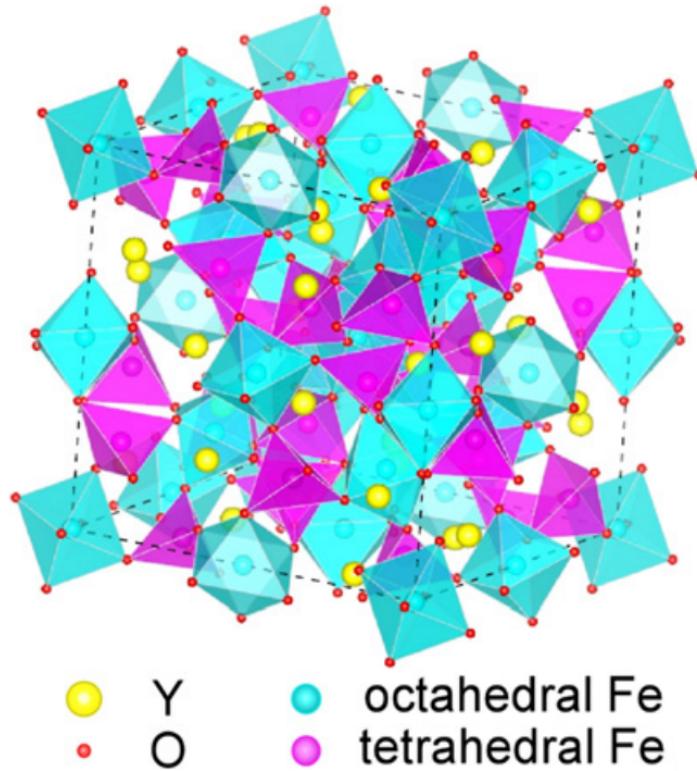


Figura 1.5: Representação geométrica da estrutura cristalina correspondente a uma célula unitária do YIG [16].

de Fe em posições octaédricas está ligado a 6 íons Fe em posições tetraédricas e estes a sua vez estão ligados a quatro Fe em posições octaédricas por meio de uma troca de vértices com átomos de oxigênio formando assim uma rede do tipo octaedro-tetraedro. Os momentos magnéticos de todos íons de Fe em posições octaédricas estão alinhados paralelamente, o mesmo acontece para todos os íons em posições tetraédricas, mas em direção oposta à de íons Fe em posições octaédricas, formando um ordenamento ferrimagnético. Historicamente, o YIG foi descoberto em 1956 por Bertaut e Forrat [17]. Posteriormente, em 1967 J. E. Mee [18], conseguiu crescer o primeiro filme de YIG monocristalino. A partir dali, os filmes deste material se converteram num objeto de intensos estudos no campo do magnetismo. As propriedades fundamentais e magnéticas desses filmes tais como os campos internos que possuem simetria uniaxial, os campos de anisotropia cristalina cúbica de primeira e segunda ordem, o valor do fator giromagnético, as constantes de exchange, a relação de dispersão de ondas de spins, os parâmetros de perda magnética, as constantes de acoplamento de magne-

toestrição entre outras, todas foram determinadas mediante técnicas de ressonância ferromagnéticas FMR, sendo esta uma das primeiras técnicas usadas para pesquisar essas propriedades [19, 20]. Também, tem sido demonstrado que duas características marcantes do YIG são sua largura de linha muito estreita e tempos de relaxação de ondas de spins muito longos, isto significa que as perdas magnéticas no material são bastante pequenas, por ista razão é um material muito atrativo para aplicações tecnológicas, por exemplo para construir amplificadores de micro-ondas paramétricas [21, 22], linhas de atraso variável [23], filtros de micro-ondas de tunelamentos [24], memórias de borbulhas magnéticas [25] e também dispositivos magneto óticos [26]. Na atualidade, a atenção que tem ganhado o YIG vai pelo campo da spintronics, posto que o material apresenta características únicas nos fenômenos de transporte de ondas de spins, exatamente em fenômenos tais como os efeitos Spin Hall e Spin Seebeck [27]-[41].

As considerações do cálculo e ajuste das relações de dispersão desta seção serão aplicadas ao YIG. Estritamente falando, este não é um material ferromagnético como tal, ele é uma substância de carácter ferrimagnético. Apesar disso, o material tem um comportamento parecido ao apresentado por um material ferromagnético a temperatura ambiente e abaixo desta, como também para campos magnéticos externos aplicados relativamente baixos. Além disso, possui uma estrutura cristalina bastante complexa e vamos supor que a estrutura cristalina formada por seu íons magnéticos pode ser tomada em boa aproximação como uma estrutura cúbica simples e que se comporta como um ferromagneto ordinário.

Por outra parte, o valor máximo da magnitude do vetor de onda $\mathbf{k}$ será alcançado no limite superior da primeira zona de Brillouin e denotamos seu valor por k_{ZB} . Assim, para uma estrutura cúbica simples temos que $\gamma_{\mathbf{k}} = (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))/3$. Então, assumindo que os produtos $k_i a$ com i igual a x, y, z são aproximadamente isotrópicos, é dizer, $k_x a \approx k_y a \approx k_z a \approx ka$, o fator $\gamma_{\mathbf{k}}$ pode ser tomado em boa aproximação como $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos(ka)$. Em consequência, para efeitos práticos usaremos variáveis sem dimensão. Por conseguinte, para o vetor de onda definimos a magnitude relativa como

$x = k/k_{ZB}$, deforma que ficamos limitado à região $0 \leq x \leq 1$.

A seguir, apresentamos as relações de dispersão $\omega_{\mathbf{k}}$ dadas pela equação (1.63) para o caso do YIG. Vamos considerar duas situações, na primeira usamos os parâmetros característicos da estrutura do YIG junto com os valores do spin S e a constante de exchange J reportados na literatura [15, 42], e com eles calculamos a quantidade $2zSJ/2\pi\hbar$. A segunda situação consiste em ajustar o valor da quantidade $2zSJ/2\pi\hbar$, usando como modelo de ajuste a equação (1.63). Além do mais, o ajuste do modelo teórico é feito usando medidas experimentais de espectroscopia de nêutrons, especificamente tomamos as medidas da banda de mágnons acústicos ao longo da direção [001] da primeira zona de Brillouin, para uma temperatura de 295 K [43].

Relações de dispersão sem ajustar

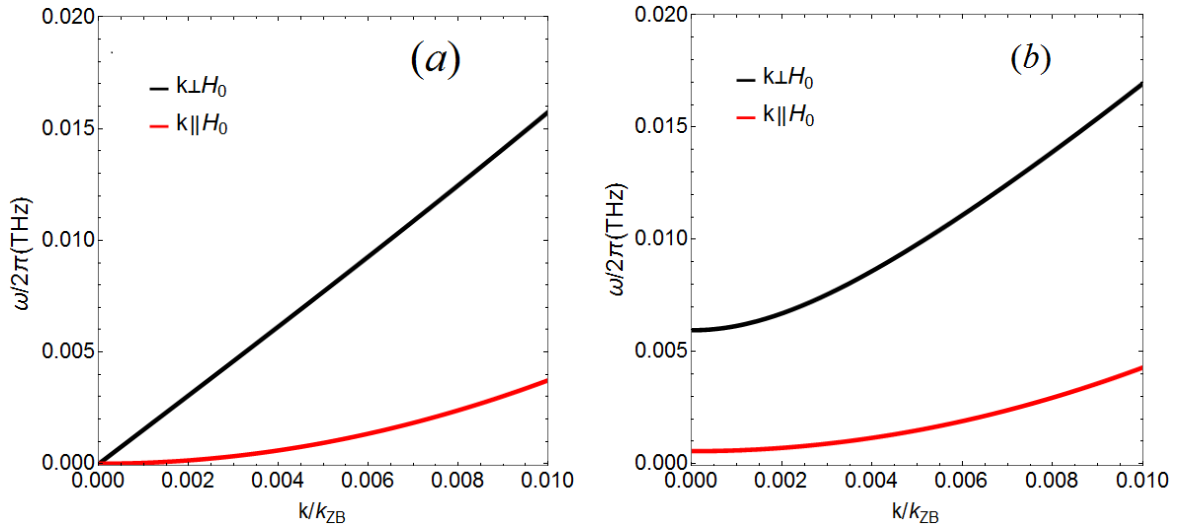


Figura 1.6: Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda. (a) Para campo magnético aplicado $H_0 = 0.00$ kOe, (b) Para campo magnético aplicado $H_0 = 0.20$ kOe.

Em relação ao anterior, usando os valores dos parâmetros da tabela 1.1 encontramos que $2zSJ/2\pi\hbar = 7.56$ THz. Adicionalmente, como a magnetização de saturação para o YIG é $4\pi M_s = 1.780$ kG, obtemos para $\omega_M = 4\pi\gamma M_s = 3.13 \times 10^{10}$ rad/s. Então,

esses valores mostram que a interação dipolar levada em consideração no Hamiltoniano do cristal ferromagnético é considerável somente quando k é pequeno. Portanto, substituindo os valores de ω_M e $2zSJ/\hbar$ na equação (1.63) e tomando o intervalo $0 \leq x \leq 0.01$, calculamos as relações de dispersão mostradas nos gráficos da figura 1.6 para um valor fixo de campo aplicado, este caso corresponde a primeira situação mencionada com anterioridade. O ângulo $\theta_{\mathbf{k}}$ indica a orientação de dispersão do mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}$ em relação ao eixo z e posto que o campo magnético aplicado fica ao longo de z , as situações $k \perp H_0$ e $k \parallel H_0$ da figura 1.6 correspondem aos valores $\theta_{\mathbf{k}} = 0$ e $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$ respectivamente. Na figura 1.7 apresentamos dois conjuntos de gráficos

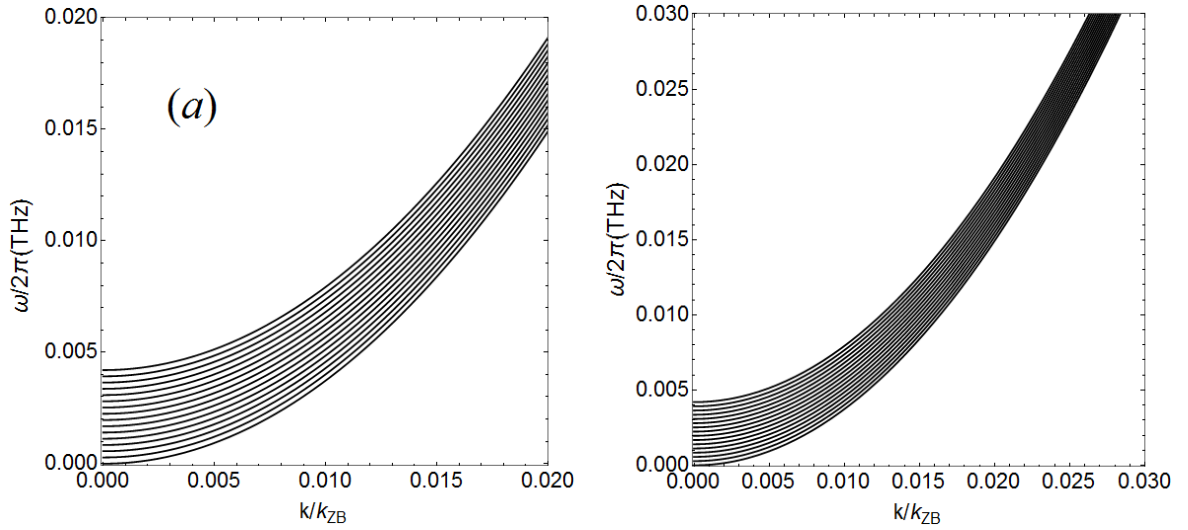


Figura 1.7: Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda, ressaltando os efeitos da interação dipolar e o campo magnético aplicado H_0 . Para os gráficos (a), as relações de dispersão são desenhadas na faixa $0 \leq x \leq 0.02$ e os gráficos (b) são desenhados na faixa $0 \leq x \leq 0.03$. Nos dois conjuntos de curvas, cada uma de elas é desenhada para um valor fixo de campo magnético aplicado H_0 . Estes valores de H_0 variam desde 0.00 até 1.50 kOe em passos de 0.10 kOe. Para todas as relações de dispersão, o ângulo de espalhamento é $\theta_{\mathbf{k}} = 0$ de forma que $k \parallel H_0$.

das relações de dispersão como uma função do vetor de onda. O objetivo principal dessas curvas é mostrar como a interação dipolar diminui sua intensidade a medida que a magnitude de $\mathbf{k}$ aumenta. Além disso adicionamos o efeito do campo externo na relação de dispersão.

Relações de dispersão ajustadas

Agora consideremos a segunda situação que havíamos comentado. Ao ajustar³ os dados experimentais de espectroscopia de nêutrons [43], usando a equação (1.63) como modelo teórico de ajuste, encontremos que o valor fornecido para a quantidade $2zSJ/2\pi\hbar$ é 8.95 THz. Então, na figura 1.8 mostramos dois gráficos. Em 1.8 (a) estão os valores teóricos dados pela equação (1.63) tomando para $2zSJ/2\pi\hbar$ o valor sem corrigir, de 7.56 THz. Em 1.8 (b) usamos o valor corrigido de $2zSJ/2\pi\hbar$. Devido a complexidade das relações de dispersão verdadeiras do YIG, nós limitamos a faixa de vetores de onda tomados para fazer o ajuste ao intervalo $0 \leq x \leq 0.5$, isto corresponde precisamente à metade da primeira zona de Brillouin.

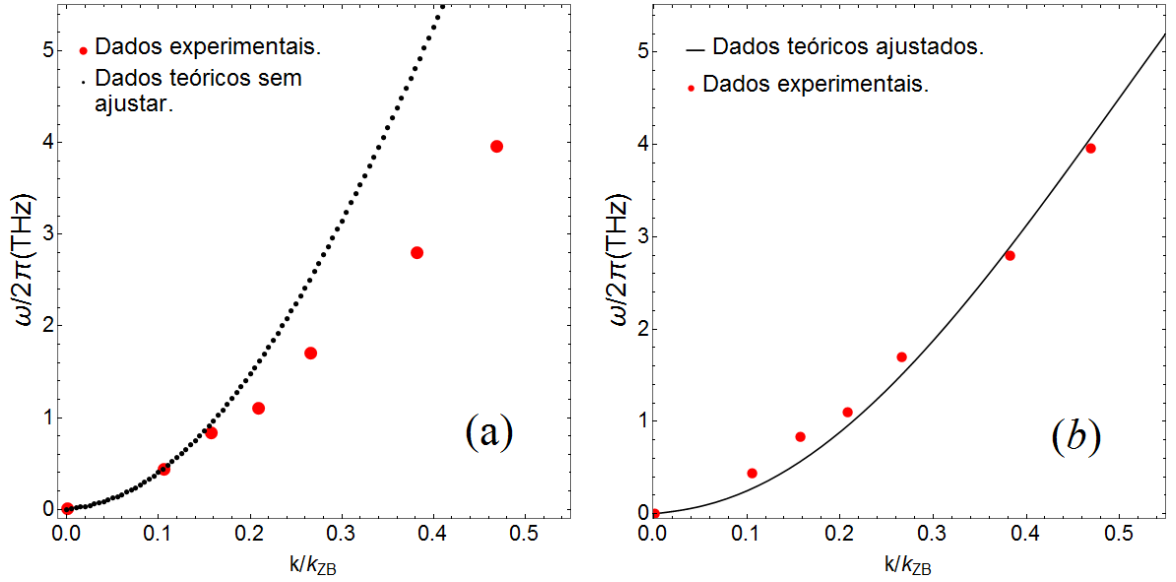


Figura 1.8: Relação de dispersão para o YIG na primeira zona de Brillouin como função do vetor de onda. Os gráficos em (a) compara nosso modelo sem ajuste, é dizer, equação (1.63) com os dados experimentais [43]. Os gráficos em (b) são o modelo teórico ajustado e os dados experimentais. As relações de dispersão foram obtidas sem campo magnético aplicado.

³Nesta tese, em todos os modelos de ajuste empregamos as rotinas implementadas no kernel do software MATHEMATICA para fazer as computações numéricas [44].

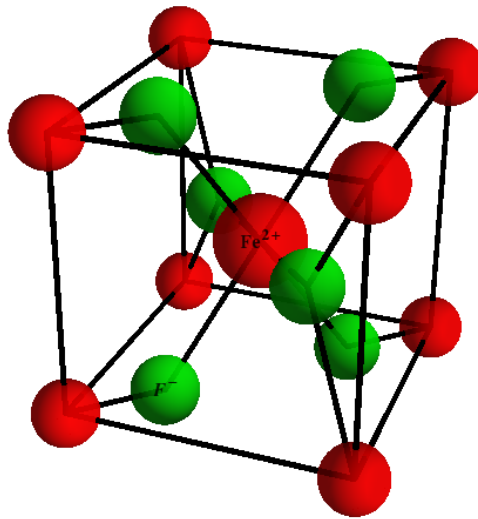


Figura 1.9: Estrutura cristalina do material antiferromagnético FeF_2 .

1.4 Sistemas materiais antiferromagnéticos

Iniciamos esta seção fazendo algumas descrições dos aspectos gerais do material fluoreto de ferro FeF_2 que são relevantes. Por exemplo, uma característica apresentada por este composto quando ele é resfriado a temperaturas abaixo de 78.35 K é sua natureza antiferromagnética, onde a temperatura indicada é a de Néel e denotada por T_N . Além do mais, os estudos feitos com raios X indicam que possui a mesma estrutura cristalina que a rutila, e portanto semelhante com a de outros materiais do grupo do ferro como o MnF_2 , CoF_2 entre outros. Na figura 1.9, apresentamos a maneira como estão distribuídos os íons magnéticos no cristal, se observa que a estrutura é tetragonal centrada no corpo e caracterizada porque em cada célula há duas unidades da fórmula estequiométrica FeF_2 , de forma que em total temos dois íons magnéticos por célula.

Por outro lado, existe uma enorme quantidade de informação obtida a partir de estudos teóricos e experimentais sobre o FeF_2 [69, 45, 46, 47, 48]. Assim, no caso experimental há análises que envolvem: ressonância antiferromagnética (AFMR), ressonância magnética nuclear (MNR), medidas de susceptibilidades e calores específicos. A informação obtida nesses experimentos, indicam que os íons magnéticos interagem

principalmente por meio de interações de exchange isotrópicas, tipo Heisenberg. Adicionalmente, um fato estabelecido claramente nessas pesquisas é que as intensidades das interações de exchange entre os íons magnéticos vizinhos da mesma célula unidade muda de acordo com o plano geométrico cristalino onde estão localizados os íons na célula tetragonal. Especificamente, há três tipos de interações que são chamadas de primeiros, segundos e terceiros vizinhos da célula.

Em relação ao anterior, é importante apontar que os momentos magnéticos dos átomos de Fe, estão alinhados paralelamente ao longo do eixo de simetria cristalina c . Assim, para os momentos magnéticos dos íons que ficam nos vértices do tetrágono, a orientação deles é tomada na direção positiva ao longo de c . Além do mais, anotamos que o momento magnético do íon localizado no corpo da célula unidade, aponta em direção oposta, portanto será negativa. O primeiro grupo de momentos magnéticos, constituem a sub-rede que chamaremos do tipo A e o segundo conjunto constituem a sub-rede que chamaremos de tipo B. Também numa célula unidade, o íon localizado no corpo está rodeado por um octoedro distorcido de íons de flúor que ajudam a modificar a estrutura de níveis de energia pela contribuição de campo cristalinos que eles criam [49], como é mostrado na figura 1.10.

É importante anotar que a estrutura cristalina do FeF_2 pertence ao grupo espacial D_{4h} . Também, a configuração eletrônica do ferro Fe é igual a $[\text{Ar}]3d^64s^2$, de forma que sua camada do tipo $3d$ está incompleta. Assim o átomo é caracterizado por um estado base tipo 5D e quando esse íon é colocado no campo cristalino octaédrico produzido pelos ânions F^- , o estado base que é degenerado, é desdobrado num dubleto E_g e num tripleto T_{2g} como é mostrado na figura 1.10. A importância destas considerações dos níveis de energia é porque vamos considerar somente o Hamiltoniano de spins, pois os Hamiltonianos do íon livre, de campo cristalino e acoplamento de spin-órbita são maiores que a interação de exchange tipo Heisenberg.

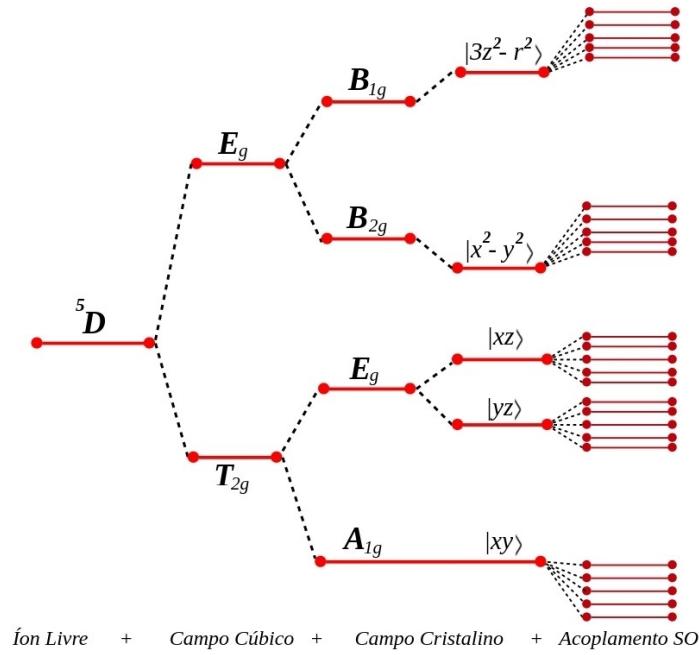


Figura 1.10: Estrutura do desdobramento dos níveis de energia do íon Fe^{2+} no material antiferromagnético FeF_2 [49].

1.5 Ondas de spin em antiferromagnetos

A seguir veremos que os tratamentos desta seção são uma extensão dos realizados na seção passada. Assim, como foi feito para o ferromagnetismo nossa intenção principal é introduzir a propagação de ondas de spins em sistemas antiferromagnéticos. Mas para isso, começaremos lembrando que o antiferromagnetismo é um fenômeno que é apresentado quando temos a interação de duas ou mais sub-redes tais que a magnetização global no sistema é completamente nula.

Os ordenamentos ferromagnéticos e antiferromagnéticos que vamos discutir, podem ser afetados por diferentes razões. Por exemplo, tanto na ordem magnética como em qualquer tipo de ordenamento a temperatura é um fator muito decisivo para preservá-lo. A temperaturas suficientemente altas, a agitação térmica é mais importante que as interações de troca entre átomos vizinhos e o material é considerado como um sistema desordenado, e pior ainda, quando as temperaturas são extremamente altas até perder o ordenamento cristalino, o material muda tanto que poderia sofrer uma transição

de estado físico. Em consequência, os momentos magnéticos estão orientados aleatoriamente não sendo possível estabelecer entre eles algum tipo de ordem. Esta fase magnética é identificada como fase paramagnética, e está caracterizada porque a magnetização total é nula, devido ao desordem das orientações dos momentos magnéticos do sistema. À medida que a temperatura diminui, as interações entre os momentos magnéticos se impõem levando a estruturas ordenadas. Assim, as mais simples que podem ser formadas de acordo com a interação dominante, são as fases ferromagnética e antiferromagnéticas.

Seguindo as ideias anteriores, outro fator que pode alterar a ordem magnética de um material é a presença de um campo magnético externo aplicado. Nesta situação, os momentos magnéticos tendem a alinhar-se na direção do campo externo. No caso de um material na fase antiferromagnética, é apresentada uma estrutura de fases muito rica, pois existe uma competição do campo externo com a tendência própria que possuem os momentos magnéticos a se anti-alinhar. Consequentemente, quando o estado antiferromagnético é quebrado pelo campo externo aplicado, geralmente aparecerá uma magnetização líquida que cresce com o campo aplicado. É importante notar, que a magnetização é uma quantidade que experimentalmente é mensurável, sendo uns dos indícios observáveis mais diretos do que o ordenamento microscópico dos spins num sistema magnético está sendo mudado.

Entre os possíveis sistemas antiferromagnéticos que possam surgir, nós faremos a escolha nesta descrição do caso mais simples, isto é, aquele onde temos duas sub-redes uma que chamaremos sub-rede A e outra que será chamada B , tal como é ilustrado na figura 1.11. Pode ser observado sem dificuldade, que a ideia é mostrar aos íons de A tendo spins que apontem em direção oposta aos íons de B . Além disso, precisamos voltar para a equação (1.39) e nessa expressão tomaremos o termo de acoplamento J_{ij} negativo, devido a que essa condição é a que favorece o aparecimento da interação antiferromagnética, isto é, anti-alinhamento dos spins.

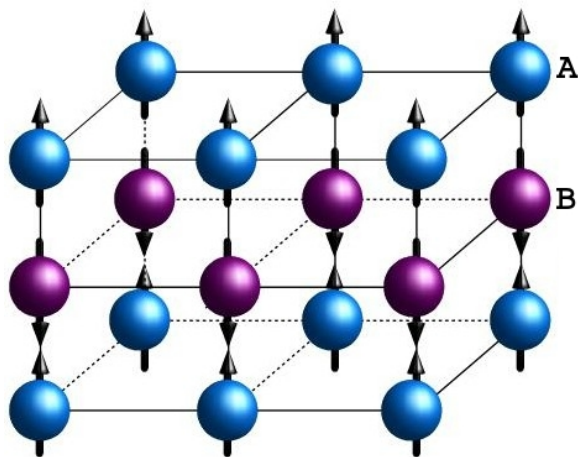


Figura 1.11: Ilustração da distribuição dos íons magnéticos num material antiferromagnético de duas sub-redes.

Para tomar a abordagem quântica do problema, faremos a suposição que a temperatura existente no sistema está abaixo da temperatura de Néel T_N . Assim, é possível usar uma representação de bósons onde usamos a teoria das ondas de spin. Como no caso do ferromagnetismo, a representação bosônica usada deve obrigatoriamente satisfazer as relações de comutação para o spin, e neste caso a escolhida é obviamente a de Holstein-Primakoff [14]. O passo seguinte, consiste em construir o Hamiltoniano do sistema antiferromagnético de duas sub-redes de spins. Para isso, vamos ter que supor que a interação de acoplamento mais forte que existe entre as duas sub-redes de nosso sistema é a interação de exchange. Também, não está demais dizer que a condição de ordenamento antiparalelo dos spins é satisfeita só na ausência de campo magnético aplicado, um argumento que a primeira vista é obvio devido à geometria do sistema.

Por outro lado, além da interação de exchange já considerada, estaremos supondo que há presente em nosso sistema uma anisotropia de um íon que assumiremos uniaxial e tenta alinhar os spins paralelamente ao eixo de simetria z na direção positiva. Também, colocaremos o sistema antiferromagnético num campo magnético aplicado que é paralelo aos spins, cuja magnitude é pequena comparada com o campo de spin-flop. Então, ao juntar todos os argumentos expostos até aqui, podemos garantir que um bom Hamiltoniano para descrever as propriedades do sistema de spins considerado é

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Ze} + \mathcal{H}_{Ex} + \mathcal{H}_{Ani}$, onde os termos estão representando as contribuições: Zeeman, exchange e anisotropia uniaxial respectivamente.

Seguindo o tratamento de S. M. Rezende [50], e lembrando que temos duas sub-redes, vamos diferenciá-las por meio dos índices A e B respectivamente. Assim, o índice A é para a sub-rede cujos spins apontam na direção z positiva, e o índice B para a sub-rede de spins opostos, exatamente como está ilustrado na figura 1.11. Ao levar em conta a contribuição Zeeman na energia total das duas sub-redes, pensaremos por um momento que os spins podem ser tratados como vetores clássicos. Então, a expressão para o Hamiltoniano Zeeman $\mathcal{H}_{Ze}$, quando o campo magnético $\mathbf{H}$ é aplicado na direção z e cuja magnitude é H_0 , fica dada pela seguinte equação:

$$\mathcal{H}_{Ze} = -\mu H_0 \sum_i S_{iz}^A - \mu H_0 \sum_i S_{iz}^B \quad (1.65)$$

A contribuição de exchange que usamos no Hamiltoniano total, é descrita muito bem por uma do tipo Heisenberg isotrópica que liga aos spins em sub-redes diferentes, isto é semelhante à equação (1.39), mas com $J_{ij} \rightarrow -J_{ij}$ e $J_{ij} > 0$.

$$\mathcal{H}_{Ex} = 2 \sum'_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i^A \cdot \mathbf{S}_j^B \quad (1.66)$$

O apóstrofo que aparece no símbolo do somatório da equação (1.66), está indicando que aqueles termos onde $i = j$ são excluídos. Também, o índice i percorre ao longo das posições dos íons localizados na sub-rede A e o índice j é tomado sobre as localizações dos íons da sub-rede B . Finalmente para terminar de construir o Hamiltoniano total do sistema antiferromagnético de duas sub-redes, levamos em consideração a contribuição da anisotropia uniaxial.

$$\mathcal{H}_{Ani} = -D \sum_i (S_{iz}^A)^2 - D \sum_i (S_{iz}^B)^2, \quad (1.67)$$

Os operadores de spin da sub-rede A em termos dos operadores de criação e des-

truição na representação de Holstein-Primakoff (RHP), são semelhantes as do caso ferromagnético. Isto é assim pela escolha da orientação geométrica que temos feito para essa sub-rede. Portanto, o operador $a_i^\dagger$ será responsável pela criação de um desvio numa unidade quântica de momento magnético fundamental da componente z do spin, diminuindo seu valor a partir do valor máximo que denotaremos como S . Adicionalmente, a interpretação para o operador a_i é justamente a oposta de $a_i^\dagger$. No caso da sub-rede B , representamos aos operadores de criação e destruição por $b_i^\dagger$ e b_i respectivamente. Assim, de acordo com os convênios adotados para as orientações geométricas e demais fatos que derivam das simetrias desses operadores, podemos escrever tais operadores como:

$$\begin{aligned} S_{iA}^{(+)} &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i & S_{iA}^{(-)} &= \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} & S_{iA}^{(z)} &= S - a_i^\dagger a_i \\ S_{iB}^{(+)} &= \sqrt{2S} b_i^\dagger \left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S}\right)^{1/2} & S_{iB}^{(-)} &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S}\right)^{1/2} b_i & S_{iB}^{(z)} &= -S + b_i^\dagger b_i \end{aligned} \quad (1.68)$$

Lembrando que a temperatura existente no sistema é menor que a temperatura de Néel, podemos aproximar os fatores das raízes quadradas dos operadores de spin por uma serie de Taylor até primeira ordem. Isto, é baseado num argumento similar ao empregado em (1.51). Logo após de fazer as respectivas aproximações, elas são substituídas nos operadores de spin de forma que com isso chegamos ao conjunto de expressões resumido na tabela (1.2). O passo seguinte, é usar as expressões das aproximações

Sub-rede A	Sub-rede B
$S_{iA}^{(+)} = \sqrt{2S} a_i - \frac{1}{2\sqrt{2S}} a_i^\dagger a_i a_i$	$S_{iB}^{(+)} = \sqrt{2S} b_i^\dagger - \frac{1}{2\sqrt{2S}} b_i^\dagger b_i^\dagger b_i$
$S_{iA}^{(-)} = \sqrt{2S} a_i^\dagger - \frac{1}{2\sqrt{2S}} a_i^\dagger a_i^\dagger a_i$	$S_{iB}^{(-)} = \sqrt{2S} b_i - \frac{1}{2\sqrt{2S}} b_i^\dagger b_i b_i$
$S_{iA}^z = S - a_i^\dagger a_i$	$S_{iB}^z = -S + b_i^\dagger b_i$

Tabela 1.2: Aproximação a primeira ordem dos operadores de spin das sub-redes A e B respectivamente.

feitas nos operadores de spins para escrever também em forma aproximada cada uma das interações que temos considerado e descrever nosso modelo. Então, as interações Zeeman e de anisotropia uniaxial dadas explicitamente como função da componentes z dos operadores de spins das duas sub-redes são expressadas em (1.65) e (1.67). Em

consequência, a mudança aos operadores de desvios é imediata, mas isso não acontece no caso de exchange. Então, precisamos voltar um pouco atrás para apontar que a interação de exchange em termos dos operadores de spins fica dada por:

$$\mathcal{H}_{Ex} = 2 \sum'_{ij} J_{ij} \left(S_{iA}^z S_{jB}^z + \frac{1}{2} S_{iA}^{(+)} S_{jB}^{(-)} + \frac{1}{2} S_{iA}^{(-)} S_{jB}^{(+)} \right) \quad (1.69)$$

Ao momento de substituir os operadores de spins no Hamiltoniano total, aparecerá uma soma de contribuições todas da ordem par nos operadores de desvios. Assim, o Hamiltoniano que achamos pode ser escrito como $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(2)} + \mathcal{H}^{(4)} + \dots$. Os termos que fazem parte das contribuições superior a dois serão as responsáveis pela relaxação no sistema. Mas por enquanto, estamos interessados na contribuição quadrática que representam as oscilações harmônicas. Em todo caso, o termo que faz parte da energia do ponto zero no antiferromagneto nessa conversão de operadores, depois de juntar as contribuições consideradas é: $\mathcal{H}^{(0)} = -2NDS^2 - 2zJNS^2$. Esta expressão é obtida logo após de supor que a soma em j vai sobre os primeiros vizinhos e i está estendida pelo cristal. Neste caso, estamos supondo que o valor da integral de exchange não muda. As quantidades restantes são: N é o número de íons magnéticos no cristal, S o máximo valor absoluto da componente z dos spins e sem criar confusão, também usamos z para representar o número de primeiros vizinhos.

Em relação ao anterior, o Hamiltoniano quadrático que aparece em termos dos operadores de desvios, é transformado em termos de operadores de mágnons. Isto é obtido após de usar novamente as transformadas de Fourier dos operadores de desvios de spins das duas sub-redes. De acordo com isto, teremos simplesmente:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}} \quad b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}} \quad (1.70)$$

Nas expressões anteriores os sinais das exponenciais são arbitrários, mas nós fizemos essa escolha por razões de conveniência. Assim, os resultados finais não deverão depender disso, um fato que é posto de manifesto pela simetria espacial cristalina. Adici-

onalmente, as notações estabelecidas para a delta de Kronecker e o fator de estrutura $\gamma_{\mathbf{k}}$ são mantidos. Assim, depois de fazer as simplificações algébricas correspondentes, encontramos que o Hamiltoniano de segunda ordem fica:

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} \left(A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + C_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + C_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \quad (1.71)$$

Onde as quantidades que definem os coeficientes $A_{\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}}$ e $C_{\mathbf{k}}$ no somatório são dados pelas expressões seguintes: $A_{\mathbf{k}} = \mu H_0 + 2S z J + D(2S - 1)$, $C_{\mathbf{k}} = 2S z J \gamma_{\mathbf{k}}$. Mas, entre os coeficientes $A_{\mathbf{k}}$ e $B_{\mathbf{k}}$, existe a relação $A_{\mathbf{k}} - B_{\mathbf{k}} = 2\mu H_0$.

1.5.1 Diagonalização da parte quadrática do Hamiltoniano antiferromagnético de duas sub-redes com spins opostos

O ponto de início nesta seção é usar a expressão encontrada para o Hamiltoniano $\mathcal{H}^{(2)}$ e fazer as transformações semelhantes que forem feitas para o caso ferromagnético. Assim podermos escrever esse Hamiltoniano em forma diagonal, o qual estará representando ao conjunto de osciladores harmônicos não interagentes que descrevem os mágnons antiferromagnéticos não amortecidos. Portanto, usaremos dos novos conjunto de operadores de mágnons que são os responsáveis de fornecer as propriedades das excitações coletivas ao desligar os modos de oscilação no sistema. Esses operadores são denotados como $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\beta_{\mathbf{k}}$, junto com seus transpostos hermitianos respetivamente. Como no caso do ferromagneto, os operadores de mágnons antigos são relacionados por meio das transformações Bogoliubov com os novos. Explicitamente, as relações matemáticas para estas transformações e seus inversas são:

Transformações Diretas	Transformações Inversas	
$a_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$	$\alpha_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$	(1.72)
$b_{\mathbf{k}} = -v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$	$\beta_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$	

Para chegar até as equações (1.72), foi exigido que os operadores $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\beta_{\mathbf{k}}$ satisfaçam as relações de comutação para bósons, isto é: $[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = [\beta_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ e as relações

de comutação entre uma classe de operadores do mesmo tipo, é dizer, criação-criação e destruição-destruição, ou seja: $[\alpha_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \beta_{\mathbf{k}}^\dagger] = \dots = 0$ e todas as combinações possíveis. Outro ponto importante do conjunto de relações que acabamos de ressaltar, é ter que $u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Pelo fato de $\bar{\mathcal{H}}^{(2)}$ representar a parte harmônica do problema, é natural supor que a nova forma que terão os operadores que diagonalizam este Hamiltoniano, eles sejam proporcional a $\exp(-i\omega t)$. Por esta razão, podemos escrever sem problema que:

$$\alpha_{\mathbf{k}}(t) = \alpha_{\mathbf{k}}(0)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \quad \beta_{\mathbf{k}}(t) = \beta_{\mathbf{k}}(0)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \quad (1.73)$$

A forma usada para encontrar a relação de dispersão é muito parecida ao caso do ferromagneto. Em primeiro lugar, tomamos os novos operadores de mágnons e obtemos suas equações de movimentos, novamente na representação de Heisenberg. Daí, é construído um sistema de equações algébricas homogêneas nos coeficientes das transformações de Bogoliubov, que embora não seja dito, é importante apontar que esses coeficientes são independentes do tempo. Assim, quando calculamos as derivadas nas equações de movimentos, elas serão tomadas somente nos operadores antigos e novos. Portanto as soluções não triviais que surgem no sistema de equações conduzem a seguinte relação de dispersão.

$$\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\gamma}\right) = H_0 \pm \sqrt{H_{crit}^2 + H_E^2(1 - |\gamma_{\mathbf{k}}|^2)} \quad (1.74)$$

Na equação (1.74) tomamos a definição do campo critico como $H_{crit} = \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$, e os campos de exchange e anisotropia são definidos a partir das expressões $\gamma\hbar H_E = 2zJS$ e $\gamma\hbar H_A = (2S - 1)D$ respectivamente. Fica claro que para um mesmo vetor de onda $\mathbf{k}$ há dois modos próprios de oscilação, um para cada sub-rede. Se definimos a $f_{\mathbf{k}}$ mediante a expressão $f_{\mathbf{k}} = \gamma\sqrt{H_{crit}^2 + H_E^2(1 - |\gamma_{\mathbf{k}}|^2)}$ e também $f_{AE} = \gamma(H_E + H_A)$, e além disso levando em conta que o coeficiente $u_{\mathbf{k}}$ é definido positivo, depois de algumas simplificações obtemos que os coeficientes de Bogoliubov ficam dados por:

$$u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{f_{AE} + f_{\vec{k}}}{2f_{\mathbf{k}}}\right)^{1/2} \quad |v_{\mathbf{k}}| = \left(\frac{f_{AE} - f_{\vec{k}}}{2f_{\mathbf{k}}}\right)^{1/2} \quad (1.75)$$

Finalmente depois de tomar todas as simplificações anteriores em nosso tratamento,

encontramos que o Hamiltoniano $\mathcal{H}^{(2)}$ para o sistema antiferromagnético de duas sub-redes, pode ser transformado numa expressão que tem a forma de uma superposição de osciladores harmônicos independentes, isto é, $\mathcal{H}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} (\hbar\omega_{\alpha\mathbf{k}}\alpha^\dagger\alpha + \hbar\omega_{\beta\mathbf{k}}\beta^\dagger\beta)$, onde $\omega_{\alpha\mathbf{k}}$ e $\omega_{\beta\mathbf{k}}$ são as frequências dos modos harmônicos de oscilação característicos das duas sub-redes. Estos modos de frequências estão dado pelas expressões:

$$\omega_{\alpha\vec{k}} = f_{\vec{k}} + \gamma H_0 \quad \omega_{\beta\vec{k}} = f_{\vec{k}} - \gamma H_0 \quad (1.76)$$

1.5.2 Relações de dispersão para o material FeF₂

Vamos aplicar a equação (1.74) como modelo de ajuste para determinar a expressão que nos permitirá calcular as frequências dos modos de oscilação dos spins no material antiferromagnético FeF₂. Então, lembremos que a estrutura cristalina deste material é tetragonal e que seus parâmetros de redes são iguais a $a = 3.3090 \times 10^{-8}$ cm e $c = 4.6970 \times 10^{-8}$ cm respectivamente. Neste caso, o fator de estrutura agora toma a forma $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z c/2)$. Em forma análoga ao caso do ferromagneto, assumiremos que os produtos $k_x a$, $k_y a$ e $k_z c$, podem ser substituídos por novos produtos que aproximam seus respectivos valores e que todos dependem de uma mesma variável somente. Assim, tomaremos como referencia a $k_z c$ e vamos supor que os produtos restantes, estão relacionados com $k_z c$ por médio das relações $(k_x a/k_z c) = p_1$ e $(k_y a/k_z c) = p_2$ respectivamente. Adicionalmente, limitaremos o valor de k_z até um valor máximo k_z^{max} , que pode ser alcançado no interior da primeira zona de Brillouin. Com isso, definimos $(k_z/k_z^{max}) = t$ onde t toma valores no intervalo $0 \leq t \leq 1$. Também, assumiremos que o valor de k_z^{max} pode ser expressado como $k_z^{max} = \lambda_0(\pi/c)$ onde λ_0 é um parâmetros ajustável, usando esto a componente k_z pode ser escrita como $k_z = \lambda_0(\pi/c)t$.

Usando as relações entre os produtos $k_x a$, $k_y a$ com $k_z c$, também é possível escrever as componentes restantes de $\mathbf{k}$ como $k_x = \lambda_1(\pi/a)t$ e $k_y = \lambda_2(\pi/a)t$ respectivamente, onde λ_1 e λ_2 são parâmetros ajustáveis e estão relacionados com λ_0 , p_1 e λ_2 por médio de $\lambda_1 = \lambda_0 p_1$ e $\lambda_2 = \lambda_0 p_2$. Substituindo as aproximações de $k_x a$, $k_y a$ e $k_z c$ na expressão

de $\gamma_{\mathbf{k}}$ encontramos:

$$\gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow \gamma_t = \cos\left(\frac{\lambda_0\pi}{2}t\right) \cos\left(\frac{\lambda_1\pi}{2}t\right) \cos\left(\frac{\lambda_2\pi}{2}t\right) \quad (1.77)$$

Se (1.77) é substituído em (1.74) e depois tomamos a raiz positiva, criamos um modelo teórico de ajuste que permite encontrar todos os parâmetros λ_i com $i = 0, 1, 2$ que aparecem na expressão (1.77) junto com duas quantidades importantes de interesse: o campo de anisotropia H_A contido na expressão de H_{crit} e o campo de exchange H_E . Especificamente, vamos usar os dados experimentais de espalhamento inelástico de nêutrons de B. D. Rainford *et al* [51]. Estes autores mediram o espectro de energia de excitação mágnon-fônon ao longo das direções $\langle 001 \rangle$ e $\langle 100 \rangle$ na primeira zona de Brillouin para uma temperatura de 4.2 K e campo magnético externo aplicado nulo $H_0 = 0$. Aqui, nós tomamos as medidas da direção $\langle 001 \rangle$, iniciamos com os pontos do ramo M do gráfico (a) da figura 1.12. Os primeiros pontos vão do ponto A até o ponto B ambos circulados com vermelhos, daí passamos ao ramo T começando no ponto C e terminando no ponto D também circulados em vermelho, essas mediadas mostram que existe uma forte ligação entre mágnons e fônons, então o passo de um ramo para o outro é justamente para ter em conta a maior contribuição possível dos mágnons ao espectro de excitação. Resulta evidente que as medidas de Rainford *et al* estão em meV, então nós usamos o fator de conversão $1 \text{ THz} \equiv 4.1360 \text{ meV}$ para escrever as frequências em THz.

Em relação ao anterior uma vez que as medidas do espectro de excitação de mágnons-fônons sejam convertidas de meV para THz, substituímos a equação (1.77) em (1.74) para obter o modelo de ajuste dado pela equação (1.78). Empregando o método de otimização não linear de Nelder-Mead [44], encontramos que o melhor ajuste fornece para os parâmetros λ_i da equação (1.77) os valores $\lambda_0 = 1.7088 \times 10^{-5}$, $\lambda_1 = 1.0654$, $\lambda_2 = 0.3155$ respectivamente. Também, a partir do fitting encontramos os valores $\gamma H_{crit} = 1.5904 \text{ rad/s}$ e $\gamma H_E = 1.8769 \text{ rad/s}$. Usando para o fator giromagnético do FeF_2 o valor $\gamma = 1.97 \times 10^{10} \text{ rad s}^{-1} \text{ kOe}^{-1}$, encontramos diretamente o valor

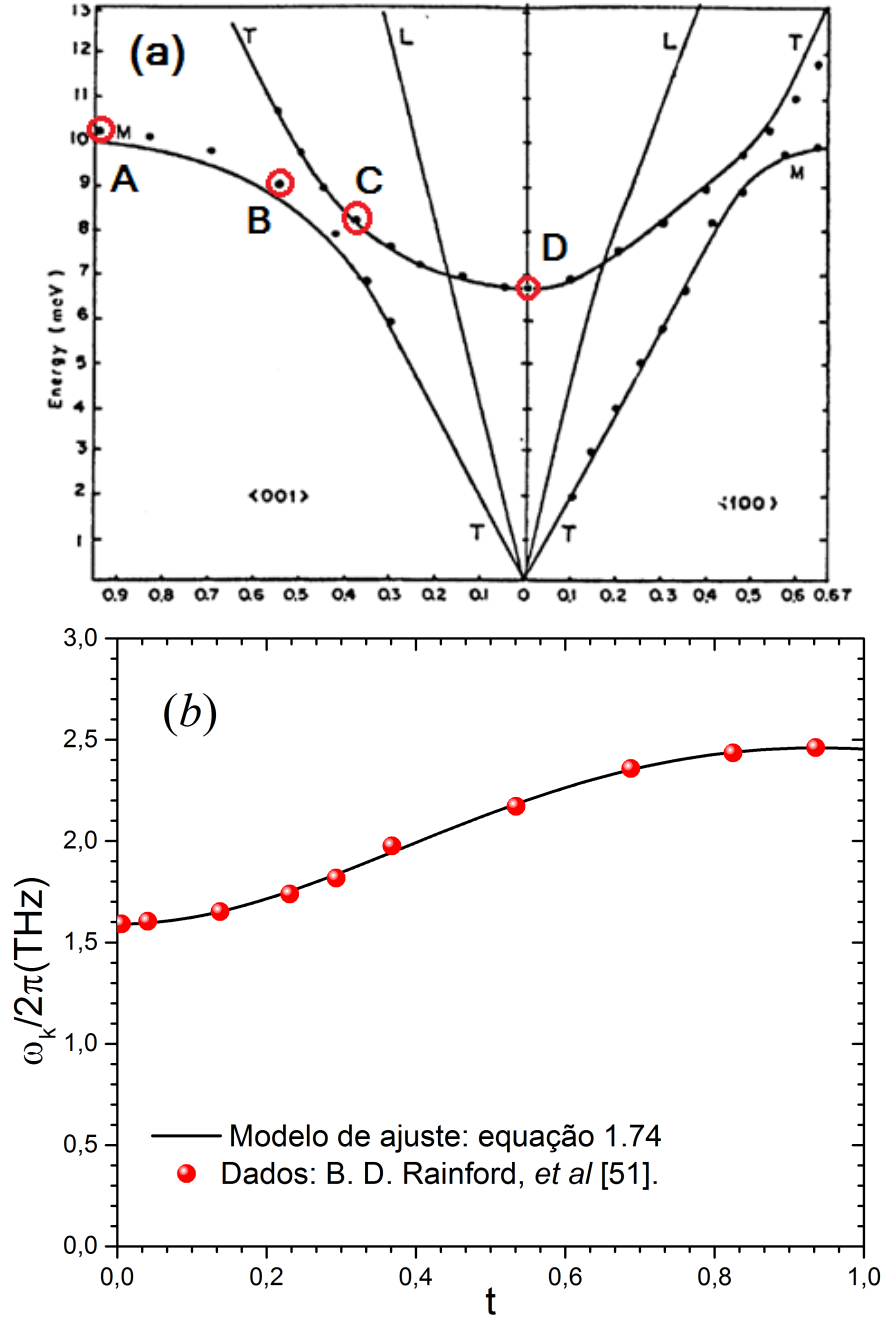


Figura 1.12: (a) Medidas do espectro de excitação de mágnon-fônon para o FeF_2 usando espalhamento inelástico de nêutrons. As medidas foram feitas num campo externo nulo $H_0 = 0$ para uma temperatura de $T = 4.2$ K [51]. (b) Comparação dos dados experimentais do gráfico (a) (pontos vermelhos) com o resultado obtido do fitting empregando a equação (1.78) como modelo teórico de ajuste (linha sólida). O melhor ajuste, fornece para os parâmetros λ_i da equação (1.77) os valores $\lambda_0 = 1.7088 \times 10^{-5}$, $\lambda_1 = 1.0654$, $\lambda_2 = 0.3155$ respectivamente. A partir do fitting encontramos diretamente o valor $H_E = 598.6232$ kOe para o campo de exchange. Usando o valor encontrado ajustado de H_{crit} junto com equação $H_{crit} = \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$ obtemos o valor $H_A = 186.0121$ kOe para o campo de anisotropia.

$H_E = 598.62$ kOe para o campo de exchange. Além disso, usando o valor de H_E que foi encontrado, e também o valor para γH_{crit} fornecido pelo ajuste junto com equação $H_{crit} = \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$ obtemos o valor $H_A = 186.01$ kOe para o campo de anisotropia. Os valores obtidos no ajuste para os campos de exchange e anisotropia são bastante próximos aos empregados por S. M. Rezende no estudo da relaxação das frequências de ressonância antiferromagnética [50].

$$f(H_{crit}, H_E; \boldsymbol{\lambda}) = \sqrt{\gamma^2 H_{crit}^2 + \gamma^2 H_E^2 (1 - |\gamma_t(\boldsymbol{\lambda})|^2)}, \quad \text{com } \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2) \quad (1.78)$$

Por outra parte, na figura 1.12 são mostrados dois gráficos, no primeiro que corresponde a 1.12 (a) estão contidas as medidas experimentais e o segundo gráfico 1.12 (b), mostra o resultado teórico fornecido pela equação (1.78), que logo é comparado com as medidas de B. D. Rainford [51]. O gráfico (b) foi construído usando os parâmetros teóricos do melhor ajuste, nele se desenha a curva de frequência para campo magnético aplicado nulo e medida em rad s^{-1} , como uma função da magnitude relativa da componente z do vetor de onda, isto é, em termos de $t = (c/\lambda_0\pi)k_z$. Este gráfico mostra que o modelo proposto para determinar os campos de exchange e anisotropia fornece um resultado ótimo. Para estender nossos resultados, fazemos um conjunto adicional de gráficos também de frequências em função de t para valores diferentes de campo magnético aplicado e apresentados na figura 1.13 (a), nesses gráficos o valor de campo magnético foi variado em passos de 100 kOe, então para a curva preta foi atribuído o valor de 100 kOe, para as curvas seguintes se acrescento o valor de H_0 até chegar a curva azul forte que tem atribuído um valor de 600 kOe, em todas as curvas o comportamento é semelhante, é dizer, ha um aumento da frequência com o vetor de onda.

Usando os mesmos parâmetros de ajuste, na figura 1.13 (b) também temos duas curvas de frequências, mas esta vez em função do campo magnético aplicado H_0 para quando $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, neste gráfico a frequência continua medindo-se em rad s^{-1} e o campo magnético aplicado é medido em kOe e seus valores estão compreendidos na faixa de 0 kOe até 650 kOe. A curva superior vermelha é o valor de $\omega_{\mathbf{k}}$ dada na equação (1.74)

quando é tomado o sinal positivo que representamos por $\omega_0^{(+)}$. O gráfico mostra que o modo de oscilação associado a $\omega_0^{(+)}$ cresce monotonamente com o campo aplicado H_0 . Além disso, quando tomamos o sinal negativo da equação (1.74), o modo de oscilação associado agora é denotado por $\omega_0^{(-)}$. Para este caso, desenhemos o valor absoluto do modo de oscilação $\omega_0^{(-)}$, o qual decresce monotonamente até atingir o valor de H_{crit} que é representado pela linha preta tracejada e cujo valor é 507 kOe. As curvas mostram que os modos de oscilação são degenerados no campo magnético aplicado. Então, o modo superior da figura 1.13 (b) é o modo de alta frequência e o inferior é o modo de baixa frequência.

1.6 Interações entre mágnons

O primeiro cálculo rigoroso de ondas de spins foi feito por F. J. Dyson[52], mas seus cálculos são complexos, por essa razão, formulações alternativas são empregadas, como por exemplo o formalismo de Holstein-Primakoff-Bogoliubov que usamos nas seções anteriores e resultam ser completamente equivalente ao tratamento de Dyson. Então, em forma geral sem importar a quantidade de interações que sejam consideradas, sempre que usemos a formulação de ondas de spins a expansão do Hamiltoniano em operadores de mágnons pode ser escrita como $\mathcal{H} = \sum_n \mathcal{H}^{(n)}$, onde $\mathcal{H}^{(n)}$ é o Hamiltoniano de ordem n -ésimo na expansão de operadores de mágnons. Portanto, a forma mais geral dos termos da expansão têm as formas [8, 12, 13].

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(0)} &= \text{Constante} \\
\mathcal{H}^{(1)} &= \sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}} + C.C \\
\mathcal{H}^{(2)} &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\
\mathcal{H}^{(3)} &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) + C.C \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{1.79}$$

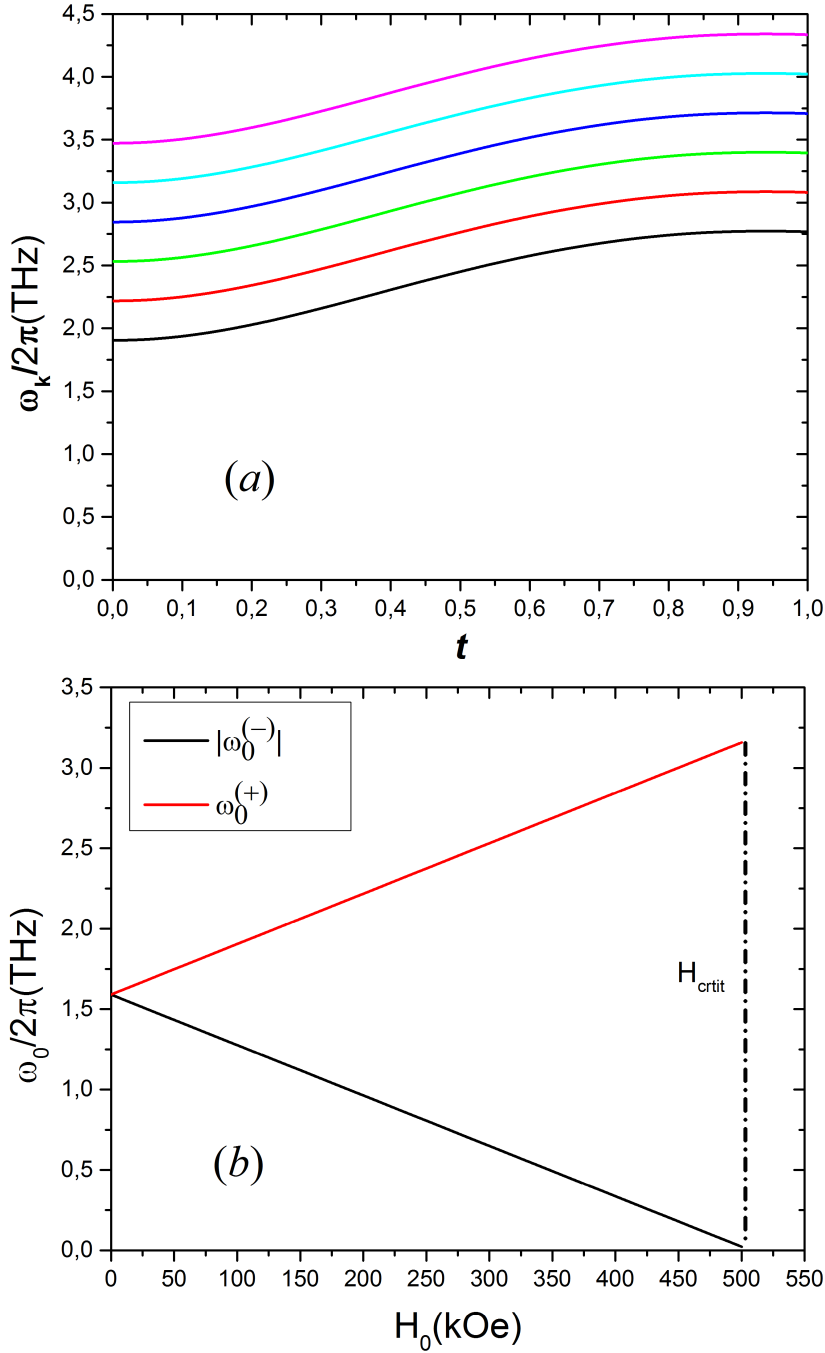


Figura 1.13: (a) Curvas de frequências em função de $t = k_z/k_z^{max}$. Neste gráfico há seis curvas cada uma para um valor fixo de campo magnético aplicado, para a curva preta o valor de campo magnético aplicado é $H_0 = 100$ kOe as curvas seguintes foram feitas com incrementos de 100 kOe cada uma delas até alcançar a curva de cor magenta onde $H_0 = 600$ kOe. (b) Curvas de frequências como uma função do campo magnético aplicado para $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, a linha vermelha corresponde à solução com sinal positivo da equação 1.74 e denotamos ela por $\omega_0^{(+)}$. A linha azul corresponde ao valor absoluto da solução com sinal negativo da mesma equação e é denotada por $|\omega_0^{(-)}|$. A linha preta é o valor de campo para o qual $H_0 = H_{crit}$

No conjunto de expressões (1.79) temos que: $\Delta(\mathbf{k})$ representa a delta de Krocneker, $V(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_i, \dots)$ são os coeficientes que fornecem as intensidades na ordem das interações consideradas. Assim por exemplo, no tratamento do Hamiltoniano ferromagnético e antiferromagnético o termo $\mathcal{H}^{(2)}$ foi transformado numa forma que expressa a superposição de um conjunto de operadores harmônicos não interagente. Em consequência, a existência de termos de ordem superior a dois é uma manifestação muito clara da ligação desses osciladores. Então, as ligações dos osciladores harmônicos independentes, são úteis para explicar algumas das propriedades que possuem os sistemas magneticamente ordenados [8].

Em forma geral, a interação entre os mágnons conduz a uma troca de momento e energia de todos os modos de oscilação do sistema de spins e são justamente essas trocas as que governam as transições entre estados de mágnons. Assim a não linearidade no sistema, apresentada pela existência dos termos de interação, permite estabelecer com firmeza os seguintes fatos:

- *Renormalização:*

Como um caso específico consideremos a interação isotrópica de exchange. O termo não linear de menor ordem neste caso, é um que tem da forma:

$$\mathcal{H}_{Ex}^{(4)} = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) + C.C \quad (1.80)$$

Os termos deste tipo afetam diretamente à frequência de oscilação dos mágnons. Na aproximação linear desenvolvida nas seções anteriores, em nenhuma parte é indicada a dependência da frequência com a temperatura. Portanto tratando esses termos mediante uma aproximação do tipo RPA (Random Phase Aproximation), e considerando interações de primeiros vizinhos somente e logo minimizando a expressão da energia livre respeito à população de mágnons com vetor de onda

$\mathbf{k}$ é obtido que:

$$\omega_{\mathbf{k}}(T) = \omega_{\mathbf{k}}(0) \left(1 - \frac{1}{zJNS^2} \sum_{\mathbf{k}'} \omega_{\mathbf{k}'}(0) \bar{n}_{\mathbf{k}'} \right) \quad (1.81)$$

Na equação (1.81) é perceptível que se aumentamos temperatura as frequências das ondas de spins são diminuídas [8, 13].

- *Relaxação:*

Outro aspecto importante para levar em consideração também devido à não linearidade, é o fato da diminuição da amplitude das ondas de spins quando elas se propagam pelo meio material, este é o denominado fenômeno da relaxação ou amortecimento. Como um caso particular, consideremos a interação dipolar, em contraste à interação de exchange, que aparecem contribuições de ordem par somente, nos termos superiores, a interação dipolar inclui tanto pares como ímpares na expansão de operadores de mágnons. Assim, o termo não linear de ordem mais baixa que faz contribuição ao espectro de energia dos mágnons é:

$$\mathcal{H}_{Dip}^{(3)} = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) + C.C \quad (1.82)$$

Um fato importante que se desprende de $\mathcal{H}_{Dip}^{(3)}$, é a aparição de dois processos que acontecem de maneira simultânea, isto é, são criados mágnons e ao mesmo tempo é desenvolvido o processo inverso de aniquilação. Então, na criação duas partículas que têm momentos y energia bem definidas interatuam para formar um mágnon tal que a nova partícula têm uma energia e momento que é igual à soma dos interagentes. No processo inverso, um mágnon com momento bem definido decai em dois, tal que a energia e momento dos mágnons criados quando são somadas deve ser igual ao mágnon original, estes processos são chamados de: confluência para o primeiro caso e splitting para o segundo respectivamente. Na figura (1.14), fazemos um representação pictórica dos dois processos de espalhamento onde interagem três mágnons. Adicionalmente, uma maneira adequada de calcular a relaxação da frequência é por meio da teoria de perturbações depen-

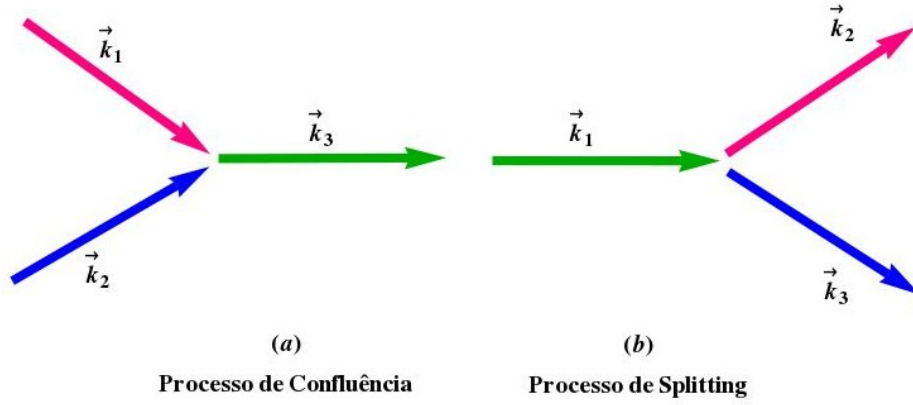


Figura 1.14: Representação pictórica dos processos de confluência y splitting na interação de três mágnons.

dente do tempo. Assim por exemplo, se a população de mágnons caracterizada pelo vetor de onda $\mathbf{k}$ é perturbada de seu estado de equilíbrio, ela será relaxada exponencialmente, até voltar novamente a seu estado inicial que assumimos é o equilíbrio. Isto, permite definir a frequência de relaxação $\eta_{\mathbf{k}}$ de acordo com:

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = -\eta_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}} - \bar{n}_{\mathbf{k}}), \quad \text{onde } \eta_{\mathbf{k}} > 0 \quad (1.83)$$

Na equação (1.83), $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ corresponde à população de mágnons no estado de equilíbrio. Para obter a equação (1.83) empregamos as regras da mecânica quântica:

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = W_{n_{\mathbf{k}} \rightarrow n_{\mathbf{k}}+1} - W_{n_{\mathbf{k}} \rightarrow n_{\mathbf{k}}-1} \quad (1.84)$$

onde as W 's são as probabilidades de transição por unidade de tempo. Aqui, estamos aplicando somente a regra de ouro de Fermi, para determinar a velocidade à qual acontecem as transições entre estados de mágnons sem importar a ordem de contribuição no Hamiltoniano. Além de todo o anterior, existem outros processos não lineares, como por exemplo as excitações paramétricas e bombeamento [53, 54, 55].

CAPÍTULO 2

RENORMALIZAÇÃO DA ENERGIA DE MÁGNONS EM FERROMAGNETOS

2.1 Funções de Green de Dois tempos e dependentes da temperatura

Introdução

Dedicaremos este capítulo à renormalização da energia dos mágnons num ferromagneto, onde basicamente são levadas em consideração as interações Zeeman e de Exchange isotrópica. Mas antes de fazer isso, queremos adicionar alguns comentários gerais acerca do método de cálculo empregado.

A seguir, usaremos o método das funções de Green de dois tempos dependentes da temperatura para determinar a renormalização da energia de mágnons num ferromagneto do tipo Heisenberg isotrópico. Este método foi inicialmente desenvolvido por Bogoliubov e Tyablikov [56, 57], para resolver alguns problemas relacionados com a física estatística e desde que ele foi desenvolvido muitas aplicações com sucesso já foram feitas. O método é especialmente útil na ausência de um parâmetro de ordem pequeno de caráter universal, onde não é possível usar os métodos da teoria de campos

baseados em aproximações perturbativas. Em consequência, a técnica das funções de Green de dois tempos tem sido aplicada por muitos autores numa ampla variedade de problemas de natureza estatística em sistemas ferromagnéticos, ferrimagnéticos e antiferromagnéticos.

A aplicação do método das funções de Green possibilita obter expansões regularizadas da energia, quer dizer, a renormalização. Formalmente, produz soluções para os valores esperados de certas quantidades desejadas como funções da temperatura, mas essas soluções devem ser obtidas a partir de um conjunto infinito de equações diferenciais de primeira ordem acopladas. Assim para desenvolver um problema que seja tratável, será preciso introduzir maneiras apropriadas para separar as cadeias de funções, o que necessariamente envolve aproximações.

2.1.1 Definições das funções de Green de dois tempos

O conceito de função de Green é muito utilizado em teoria de campos para estudar as propriedades dos campos quantizados. Quando as funções de Green são combinadas com a teoria da representação espectral, os resultados obtidos são mais fáceis de compreender do que os fornecidos pelas teorias diagramáticas. Em poucas palavras, podemos resumir que as funções de Green são uma generalização do conceito de função de correlação da física estatística. Existem basicamente três classes de funções de Green de dois tempos: causal $\mathcal{G}^{(c)}(t, t')$, atrasadas ou retardadas $\mathcal{G}^{(r)}(t, t')$ e as funções de Green avançadas $\mathcal{G}^{(a)}(t, t')$ definidas da seguinte maneira [57, 59].

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{(c)}(t, t') &= \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_c = -i \langle T[A(t); B(t')] \rangle \\ \mathcal{G}^{(r)}(t, t') &= \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_r = -i \theta(t - t') \langle [A(t); B(t')] \rangle \\ \mathcal{G}^{(a)}(t, t') &= \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_a = i \theta(t' - t) \langle [A(t); B(t')] \rangle\end{aligned}\tag{2.1}$$

Nas equações anteriores, $\langle \dots \rangle$ indica valor médio estatístico no ensemble grão canônico e $\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle$ são as abreviações das funções de Green: causais, retradas e avançadas. Adicionalmente, as θ são as funções de passo de Heaviside e pode ser observado que

se seus argumentos são nulos, é dizer, se $t = t'$ as funções de Green não existem. Lembrando que o valor médio de um operador $\mathcal{O}$ qualquer é definido como:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}(\rho_G \mathcal{O}) = \frac{\text{Tr} [\mathcal{O} e^{-\beta \mathcal{H}}]}{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}]} \quad (2.2)$$

onde Tr indica a operação de traço, ρ_G é o operador matriz densidade e $\beta^{-1} = K_B T$. O Hamiltoniano total é tomado como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \mu' N$, onde μ' é o potencial químico (não deve ser confundido com o fator $\mu = g\mu_B$), N é o operador número de partículas. Além disso, na equação (2.2), $\mathcal{H}_0$ está indicando que suas soluções são conhecidas e que tampouco dependem do tempo. Embora não seja dito, na definição da função de Green causal o símbolo T representa o ordenamento temporal.

Para o cálculo das funções de Green, tomaremos os operadores $A(t)$ e $B(t)$ na representação de Heisenberg, isto significa então que $A(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} A(0) e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ e da mesma forma para o $B(t)$. No equilíbrio estatístico, o β pode se fixar de forma que as funções de Green dependem do tempo só por meio da diferença $t - t'$, assim por exemplo a função de Green retardada passa a se converter em $\mathcal{G}^{(r)}(t, t') = \mathcal{G}^{(r)}(t - t')$ e da mesma forma acontece com as outras. O que temos chamado de funções na verdade são operadores que representam direta ou indiretamente alguma grandeza física mensurável do sistema em estudo. O próximo passo é construir as equações que governam a dinâmica desses operadores.

2.1.2 Equações de movimento para as funções de Green

Até aqui temos definidas três funções de Green que são: causal, retardada e avançada mas todo o que seja derivado para uma é igualmente válido para as outras. Por essa razão, nós estaremos usando basicamente a função de Green de dois tempos retardada, levando em mente que os resultados obtidos mais para frente da renormalização da energia dos mágnons será independente do tipo de função de Green usada.

Se usamos a representação de Heisenberg, não é difícil ver que a equação que controla

a dinâmica do operador de Green de dois tempos $\mathcal{G}^{(r)}(t - t')$ está dada por:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}^{(r)}(t - t') = \hbar \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle \langle [A(t), \mathcal{H}(t)]; B(t') \rangle \rangle \quad (2.3)$$

As equações do tipo (2.3) são exatas e pode se perceber que o lado direito contém outra função de Green de ordem superior, assim em termos gerais no final ficamos é construindo uma cadeia infinita de equações que ficam acopladas. Não entanto, do tipo de problema que aparece, resulta obvio que a complexidade é enorme, essa dificuldade é resolvida cortando a cadeia para chegar a um número finito de equações e então poder obter informação física a partir das soluções.

2.1.3 Representação espectral das funções de Green retardada e avançadas

Agora consideraremos a representação espectral das funções de Green retardada e avançadas $\mathcal{G}^{(r)}(t - t')$ e $\mathcal{G}^{(a)}(t - t')$ respectivamente. Denotaremos as transformadas de Fourier de essas funções por $\mathcal{G}^{(r)}(E)$ e $\mathcal{G}^{(a)}(E)$ e para o caso específico da função retardada temos que:

$$\mathcal{G}^{(r)}(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{G}^{(r)}(E) e^{-iE(t-t')/\hbar} \quad (2.4)$$

A partir da equação (2.4) é evidente que a inversão dessa integral vai-nos levar diretamente à transformada de Fourier inversa.

$$\mathcal{G}^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}^{(r)}(\tau) e^{iE\tau/\hbar} \quad (2.5)$$

Definimos as funções de correlações estatísticas $\mathcal{F}_{AB}(t, t')$ e $\mathcal{F}_{BA}(t, t')$ entre o par de operadores $A(t)$ e $B(t')$ como:

$$\mathcal{F}_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle \quad \mathcal{F}_{BA}(t, t') = \langle B(t')A(t) \rangle \quad (2.6)$$

As representações integrais dessas funções estarão dadas pelas seguintes expressões [57]:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{AB}(t-t') &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE J(E) e^{\beta E} e^{-iE(t-t')/\hbar} \\ \mathcal{F}_{BA}(t-t') &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE J(E) e^{-iE(t-t')/\hbar}\end{aligned}\tag{2.7}$$

O par de equações (2.7) são as representações espectrais das funções de correlações que precisamos para determinar as representações espectrais das funções de Green. Também a função $J(E)$ é a intensidade espectral de $\mathcal{F}_{BA}$ e está definida como:

$$J(E) = \frac{1}{\mathcal{Q}} \sum_{mn} \langle \varphi_m | B(0) | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | A(0) | \varphi_m \rangle e^{-\beta E} \delta(\Delta_{mn} - E) \tag{2.8}$$

onde os $|\varphi_n\rangle$'s são os auto-estados do Hamiltoniano, $\Delta_{mn} = E_m - E_n$ e $\mathcal{Q}$ é a função de partição no ensemble grão canônico. Agora retomando a discussão previa acerca das funções de Green, depois de substituir a definição das mesmas na equação do tipo (2.5) e fazer logo as respectivas integrações e simplificações usando as funções de correlações como intermediarias nos procedimentos, chegamos ao resultado seguinte.

$$\mathcal{G}^{(r,a)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{E} \left(e^{\beta \bar{E}} - 1 \right) \frac{J(\bar{E})}{E - \bar{E} \pm i\varepsilon} \tag{2.9}$$

Sem entrar em detalhes acerca das propriedades de analiticidade das funções $\mathcal{G}^{(r,a)}(E)$ todas elas serão assumidas. Assim, uma propriedade adicional muito útil é:

$$\mathcal{G}(E + i\varepsilon) - \mathcal{G}(E - i\varepsilon) = -i \left(e^{\beta E} - 1 \right) J(E) \tag{2.10}$$

A relação expressada na equação (2.10) é válida para todas as funções de Green. Agora é preciso desacoplar a cadeia de funções de Green para encontrar $\mathcal{G}(E)$ e depois obter a intensidade espectral $J(E)$. Para obter a representação espectral da função de Green causal usamos o mesmo procedimento, mas como não pode ser continuada analiticamente no plano complexo, é pouco usada em aplicações [60]. A equação (2.10) permite encontrar $J(E)$ sem empregar a definição exposta em (2.8), o que é muito vantajoso.

Com isto, podemos obter a expressão que define a função de correlação em termos das funções de Green que usaremos para a renormalização da energia dos mágnons.

$$\mathcal{F}_{BA}(t - t') = i \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{\mathcal{G}(E + i\varepsilon) - \mathcal{G}(E - i\varepsilon)}{e^{\beta E} - 1} \right) e^{-iE(t-t')/\hbar} \quad (2.11)$$

A característica mais importante da equação (2.11) é que a função de correlação já não depende mais de $J(E)$ e precisamente esse é o coração da seção seguinte.

2.2 Teoria das funções de Green na renormalização da energia dos mágnons num ferromagneto

Usaremos os argumentos expostos na seção 2.1, para renormalizar a energia dos mágnons num ferromagneto de Heisenberg onde são levadas em consideração a contribuição Zeeman e de exchange isotrópica no Hamiltoniano do sistema. Consideremos um sistema ferromagnético submetido à ação de um campo magnético de magnitude constante H_0 aplicado ao longo do eixo z . Portanto o Hamiltoniano usado é:

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i - 2 \sum_{ij}' J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.12)$$

Na equação (2.12), $J_{ij} > 0$ pelo caráter ferromagnético do sistema. A soma dupla é desenvolvida a primeiros vizinhos para o índice j e estendida por todo o cristal no índice i . Vamos considerar apenas interações entre primeiros vizinhos, então $J_{ij} = J$. Também vamos supor que o sistema está numa temperatura menor do que a temperatura crítica T_c . Assim, podemos empregar a teoria das ondas de spins desenvolvida no capítulo 1 na seção 1.3 para escrever o Hamiltoniano (2.12) em termos de operadores de mágnons.

Por outro lado, supondo que todas as contribuições no Hamiltoniano superiores a ordem quarta na expansão de mágnons são depressíveis um argumento que é resulta razoável pela suposição de que $T < T_c$, podemos em boa aproximação expressar o Hamiltoniano

como:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_{\mathbf{k}} C^{(2m)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} C^{(4m)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}} \quad (2.13)$$

Lembrando as definições que temos das quantidades $\gamma(\mathbf{k})$, os coeficientes da expansão do Hamiltoniano de mágnons considerado, são dados pelas expressões:

$$\begin{aligned} C^{(2m)}(\mathbf{k}) &= \mu H_0 + 2zJS(1 - \gamma(\mathbf{k})) \\ C^{(4m)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{zJ}{2N} (\gamma(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{q}) + \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q}) - 4\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Na equação (2.13), a expressão para $\mathcal{H}_0$ está definida por $\mathcal{H}_0 = -\mu H_0 NS - zJNS^2$. Com as suposições e argumentos expressados anteriormente, avançaremos ainda mais se usamos o formalismo da seção previa sobre as funções de Green. Para isso precisamos esclarecer uma coisa: por simplicidade todo o tratamento que falta neste capítulo estará baseado nas funções de Green retardadas, mas os argumentos usados serão igualmente válidos para o caso das funções de Green restantes. Portanto, usando (2.1) definimos as duas funções de Green retardadas $\mathcal{G}^{(r)}(t - t')$ e $\mathbb{G}^{(r)}(t - t')$ como:

$$\mathcal{G}^{(r)}(t - t') = \langle \langle a_{\mathbf{k}}(t); a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle \rangle, \quad \mathbb{G}^{(r)}(t - t') = \langle \langle a_{\mathbf{p}}^\dagger(t) a_{\mathbf{q}}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}}(t); a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle \rangle \quad (2.15)$$

Por razões de simplificação definimos ao operador $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}(t) = a_{\mathbf{p}}^\dagger(t) a_{\mathbf{q}}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}}(t)$ e também tomamos o coeficiente de quarta ordem como $C^{(4m)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow A_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}$. Assim as equações de movimento que governam a dinâmica das funções Green são dadas por:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}^{(r)}(t - t') &= \hbar \delta(t - t') \langle [a_{\mathbf{k}}(t), a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t')] \rangle + \langle \langle [a_{\mathbf{k}}(t), \mathcal{H}(t)]; a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle \rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \mathbb{G}^{(r)}(t - t') &= \hbar \delta(t - t') \langle [\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}(t), a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t')] \rangle + \langle \langle [\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}(t), \mathcal{H}(t)]; a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle \rangle \end{aligned} \quad (2.16)$$

Em relação as equações (2.16) o passo a seguir consiste em calcular os comutadores nas definições das funções de Green explorando as propriedades dos operadores de bósons com o propósito de simplificar as expressões que ali resultem. Outro fato que é evidente e que foi comentado na seção anterior é a aparição de funções de Green de ordem superior o que complica a situação, mas para frente encontraremos um jeito de

resolver esse problema. Assim usando a expressão que temos para $\mathcal{H}$ na equação de movimento para $\mathcal{G}^{(r)}$, encontramos que:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}^{(r)}(t-t') = \hbar \delta(t-t') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + C_{\mathbf{k}}^{(2m)} \mathcal{G}^{(r)} + \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} D_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}^{(4m)} \mathbb{G}^{(r)}(t-t') \quad (2.17)$$

onde o coeficiente da soma dupla tem sido definido como $D_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}^{(4m)} = A_{\mathbf{p}\mathbf{k}\mathbf{q}} + A_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}$. Poderíamos continuar o procedimento agora com a equação de movimento para $\mathbb{G}^{(r)}(t-t')$ mas isso levaria a uma cadeia sem fim. Em lugar de fazer assim optamos por uma aproximação para desacoplar as funções de Green $\mathcal{G}^{(r)}$ e $\mathbb{G}^{(r)}$ dada nas referencias [61, 62].

$$\mathbb{G}^{(r)} \approx (\delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) \bar{n}_{\mathbf{p}} \mathcal{G}^{(r)} \quad (2.18)$$

Substituindo (2.18) em (2.17) e simplificando a expressão que resulta, encontramos que a equação de movimento para $\mathcal{G}^{(r)}$ é reduzida até:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}^{(r)}(t-t') = \hbar \delta(t-t') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^{(r)}(t-t') \quad (2.19)$$

Duas coisas importantes em relação à equação (2.19) são: em primeiro lugar temos $\Lambda_{\mathbf{k}}^{(4m)} = \sum_{\mathbf{p}} (D_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{p}}^{(4m)} + D_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{k}}^{(4m)}) \bar{n}_{\mathbf{p}}$ e ao mesmo tempo por razões de simplificação na notação, definimos a $\epsilon_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}}^{(2m)} + \Lambda_{\mathbf{k}}^{(4m)}$. Agora, para calcular a função de Green, usamos a definição de sua transformada de Fourier dada pela equação (2.5). Com isso, a equação diferencial (2.19) conduz a que a transformada inversa da função de Green que estamos procurando é:

$$\mathcal{G}(E) = \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2\pi} \frac{1}{(E - \epsilon_{\mathbf{k}'})} \quad (2.20)$$

Teremos o resultado verdadeiro fazendo so $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, a renormalização é conseguida determinando os valores médios da energia magnética, isto é:

$$E_{mag} = \langle \mathcal{H} \rangle = \mathcal{H}_0 + \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{(2m)} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} A_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}} \rangle \quad (2.21)$$

Usaremos novamente as definições estabelecidas previamente. A avaliação da densi-

dade espectral $J(E)$ dada em (2.10) e que é necessária para determinar as funções de correlação definidas também nessa seção resulta imediata, por tanto empregando à equação (2.21) com $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ encontramos que é dada pelo resultado seguinte.

$$J(E) = \frac{1}{e^{\beta E} - 1} \delta(E - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.22)$$

Com o resultado conseguido na equação (2.22), o cálculo da primeira função de correlação $\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger(t') a_{\mathbf{k}}(t) \rangle$ ficará pronto. Portanto ao fazer $t = t'$, essa função vai fornecer a população média de mágnons que estão num estado que é caracterizado pelo vetor de onda $\mathbf{k}$ e dado por:

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_{\mathbf{k}}} - 1} = \bar{n}_{\mathbf{k}} \quad (2.23)$$

Em poucas palavras o que temos conseguido no resultado anterior são os fatores de Bose-Einstein onde a energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ foi definida anteriormente. Agora procederemos a determinar a função de correlação restante, isto é, $\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}} \rangle$, para isso empregamos as expressões (2.10) e (2.11). Assim como no caso anterior, tomando $t = t'$, chegamos a que o valor médio da função de correlação será dada por:

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}} \rangle = (\delta_{\mathbf{pq}} + \delta_{\mathbf{kq}}) \bar{n}_{\mathbf{p}} \bar{n}_{\mathbf{k}} \quad (2.24)$$

Então usando (2.23) e (2.24) em (2.21) achamos que a energia magnética média fica dada por:

$$E_{mag} = \bar{\mathcal{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{(2m)} \bar{n}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{kp}} \epsilon_{\mathbf{kp}}^{(4m)} \bar{n}_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{p}} \quad (2.25)$$

Para os coeficientes da energia magnética media dada por (2.25) temos o seguinte: o coeficiente de quarta ordem é definido como $\epsilon_{\mathbf{kp}}^{(4m)} = (A_{\mathbf{kpp}} + A_{\mathbf{kpk}})$, e também, tomamos por facilidade $C_{\mathbf{k}}^{(2m)} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$. Além disso, precisamos das expressões compactas dos coeficientes como também da energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ com o propósito de realizar as computações numéricas precisadas. Em decorrência, as simplificações feitas para os coeficientes in-

dicam que o $\epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4m)}$ é dado por:

$$\epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4m)} = \left(\frac{2zJ}{N} \right) (\gamma(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{p}) - \gamma(\mathbf{k} - \mathbf{p}) - 1) \quad (2.26)$$

Embora a expressão (2.25) seja a energia magnética total em nossa formulação, a parte que contribui para a renormalização é justamente $(E_{mag} - \bar{\mathcal{H}}_0)$. Mas pelo visto, continuamos tendo uma dificuldade e é que os números de ocupação $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ ainda dependem da energia e ao mesmo tempo essa energia depende dos números de ocupação. Devido ao fato das simetrias que possui a interação de exchange, sempre será possível em forma geral sem importar a ordem na expansão de operadores de mágnons que seja considerada, que a energia total poderá ser escrita na forma.

$$E = E_{mag}^{(0)} + E_{mag}^{(2)} + E_{mag}^{(4)} + E_{mag}^{(6)} + \dots \quad (2.27)$$

Voltando para nossa principal dificuldade, podemos resumir a relação de ligadura entre as energias e o número de ocupação por meio das seguintes relações funcionais.

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}(\bar{n}_{\mathbf{k}}), \quad \bar{n}_{\mathbf{k}} = \bar{n}_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.28)$$

Faremos uso do argumento que as contribuições de ordem muito superior para a energia são desprezíveis, isto significa então que o número de ocupação pode ser escrito como $\bar{n}_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \approx \bar{n}_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} + |\delta\epsilon_{\mathbf{k}}|)$, onde $\delta\epsilon_{\mathbf{k}}$ é um pequeno deslocamento da energia total que faz contribuição para os números de ocupação. Adicionalmente, embora $\delta\epsilon_{\mathbf{k}}$ seja pequeno sua contribuição não é desprezível pelo que temos que considera-lo. Também, para determina-lo definimos a $\varepsilon = E_{mag} - \mathcal{H}_0$ por meio da expressão

$$\varepsilon = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} \bar{n}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} \bar{n}_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{p}} \quad (2.29)$$

A mudança num pequeno deslocamento de ε será minimizada com relação aos números de ocupação $n_{\mathbf{q}}$, desta maneira é possível em boa aproximação saber quanto é o valor

de $\delta\epsilon_{\mathbf{k}}$, ou seja:

$$\frac{\delta}{\delta\bar{n}_{\mathbf{q}}}\delta\epsilon = \epsilon_{\mathbf{q}}^{(2)} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{kq}}^{(4)} + \epsilon_{\mathbf{qk}}^{(4)} \right) \delta\bar{n}_{\mathbf{k}} \quad (2.30)$$

Posto que os deslocamentos $\delta\epsilon$ e $\delta\bar{n}_{\mathbf{k}}$ são pequenos mas não desprezível, podemos fazer a escolha $\delta\bar{n}_{\mathbf{k}} \approx \delta\bar{n}_0$ e ao mesmo tempo fazer $(\delta/\delta\bar{n}_{\mathbf{q}})\delta\epsilon \approx 0$, assim conseguimos determinar $\delta\bar{n}_0$ logo usando a equação (2.30) e substituindo o valor conseguido para $\delta\bar{n}_0$ podemos tomar como boa aproximação que $|\delta\epsilon_{\mathbf{k}}| = \left(|\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}|^2 / 2 |\sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{kp}}^{(4)}| \right)$. Temos então que as expressões para os números de ocupação ficaram definidas da seguinte maneira:

$$\bar{n}_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\exp \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}}{K_B T} + \frac{|\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}|^2}{2 K_B T |\sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{kp}}^{(4)}|} \right) - 1} \quad (2.31)$$

Com o resultado anterior nós conseguimos desacoplar por completo as quantidades de interesse. Portanto a renormalização da energia dos mágnons em nosso ferromagneto é imediata. Assim, é evidente que as frequências renormalizadas dependentes da temperatura estão determinadas pela relação geral $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_{\mathbf{k}}\bar{n}_{\mathbf{k}}$, é precisamente este o resultado final que procuramos. Além do mais, resulta muito obvio que tais frequências são obtidas a partir das equações (2.29) e (2.31).

2.3 Avaliação numérica das frequências renormalizadas dos mágnons em YIG

Finalizaremos esta seção com o cálculo das frequências renormalizadas dos mágnons em YIG. Primeiro começaremos reescrevendo a energia para o vetor de onda $\mathbf{k}$, da seguinte maneira: $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_{\mathbf{k}}\bar{n}_{\mathbf{k}}$, onde obviamente as frequências $\omega_{\mathbf{k}}$ são definidas como:

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \bar{\epsilon}_{\mathbf{kp}}^{(4)} \bar{n}_{\mathbf{p}} \quad (2.32)$$

Na expressão anterior, temos que $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} = N\epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)}$. O passo seguinte consiste em substituir a soma por uma integral, isto é:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k f(\mathbf{k}) \quad (2.33)$$

Como os coeficientes γ dependem no máximo da diferença $\mathbf{k} - \mathbf{p}$, teremos total independência da coordenada azimutal φ . Também a integral na coordenada radial do espaço de momento é estendida até o final da primeira zona de Brillouin só, assim a integral 3D é transformada em:

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k f(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{ZB}} dk k^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) f(|\mathbf{k}|, \cos \theta) \quad (2.34)$$

Por outro lado, lembrando que $2zJS = \hbar\gamma zD/a^2$ definimos então a frequência na zona de Brillouin como $\omega_{ZB} = \gamma zD/a^2$ e de acordo com isto a energia $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$ ficará definida como:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} = \hbar \left(\gamma H_0 + \omega_{ZB}(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \right) \quad (2.35)$$

Para o material YIG o valor de ω_{ZB} é igual a 7.56 THz. Para reescrever a $\gamma_{\mathbf{k}}$ usaremos variáveis sem dimensão, isto é conseguido fazendo a mudança $x = k/k_{ZB}$ que põe em evidencia que o limite superior da primeira zona de Brillouin é alcançado quando $x = 1$. A magnitude do vetor de onda é obviamente $k = |\mathbf{k}|$ que no valor extremo da primeira zona é igual a $k_{ZB} = \pi/a$, onde a corresponde a constante de rede. Sabendo que a estrutura cristalina do YIG é cúbica simples, os fatores $\gamma(\mathbf{k})$ que serão usados são da forma $\gamma(\mathbf{k}) = (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)/3$. Supondo que o espaço é isotrópico podemos tomar em boa aproximação que $\cos k_x a \approx \cos k_y a \approx \cos k_z a = \cos(ka)$. Portanto temos que esses fatores podem ser simplificados sem perda de generalidade como $\gamma(\mathbf{k}) = \cos(ak_{ZB}x)$. Com todos os argumentos anteriores conseguimos re-expressar $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$ como:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} = \hbar \left[\gamma H_0 + 2\omega_{ZB} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{4} \right) \right] \quad (2.36)$$

Para determinar a soma que contém ao termo $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)}$ será necessário primeiro definir algumas funções adicionais. Para isso, iniciemos apreciando que a magnitude do vetor

$\mathbf{k} - \mathbf{p}$ que vem dada pela expressão $|\mathbf{k} - \mathbf{p}| = k_{ZB}(x^2 - 2xy \cos \theta + y^2)^{1/2}$ pode ser simplificada se, a raiz quadrada é definida como uma nova função $W(x, y, z)$ adicional que mede o comprimento de sua magnitude. Além disso, definimos a z como $z = \cos \theta$ com $z \in [-1, 1]$, também é obvio que $0 \leq x, y \leq 1$ todo isto indica que $|\mathbf{k} - \mathbf{p}|$ fica muito bem definido na primeira zona. Assim chegamos até $|\mathbf{k} - \mathbf{p}| = \frac{\pi}{a}W(x, y, z)$. Usando todos estes elementos, encontramos que a magnitude da contribuição de quarta ordem na energia magnética depois das simplificações respectivas é dada pela expressão:

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} = \left(\frac{2\hbar\omega_{ZB}}{S} \right) \left(\cos^2 \left(\frac{\pi x}{4} \right) + \cos^2 \left(\frac{\pi y}{4} \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi}{4}W(x, y, z) \right) - 1 \right) \quad (2.37)$$

Agora transformaremos as somas integrais. Em primeiro lugar devemos lembrar nossas mudanças variáveis para assim modificar os integrandos. Em segundo lugar, tomamos $\Omega = a^3$ e assumimos que a primeira zona de Brillouin é esférica. Isto significa então que $4\pi k_{ZB}^3/3 = (2\pi/a)^3$, de aqui é deduzido que $(ak_{ZB})^3 = 3/2(2\pi)^2$ e com estes resultados as integrais que são da forma que aparecem na equação (2.34) ficarão dadas por:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{3}{2} \int_0^1 dx \int_{-1}^1 dz x^2 f(x, z) \quad (2.38)$$

Por outro lado, devido a que os números de ocupação dependem de $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$ e da integral de $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)}$, precisaremos definir as últimas funções para assim juntar todas as peças e proceder à avaliação numérica final. Assim para a integral de $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)}$ obtemos:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} = \left(\frac{3\hbar\omega_{ZB}}{S} \right) L(x) \quad (2.39)$$

Onde a função $L(x)$ é definida por meio da seguinte integral.

$$L(x) = \int_0^1 dy \int_{-1}^1 dz y^2 \left(\cos^2 \left(\frac{\pi x}{4} \right) + \cos^2 \left(\frac{\pi y}{4} \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi}{4}W(x, y, z) \right) - 1 \right) \quad (2.40)$$

Se definimos $\lambda = (\gamma H_0)/(2\omega_{ZB})$, a expressão para $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$ pode ser redefinida introduzindo uma nova função $K(x)$, de forma que $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} \equiv 2\hbar\omega_{ZB}K(x)$, onde a $K(x)$ é dada por:

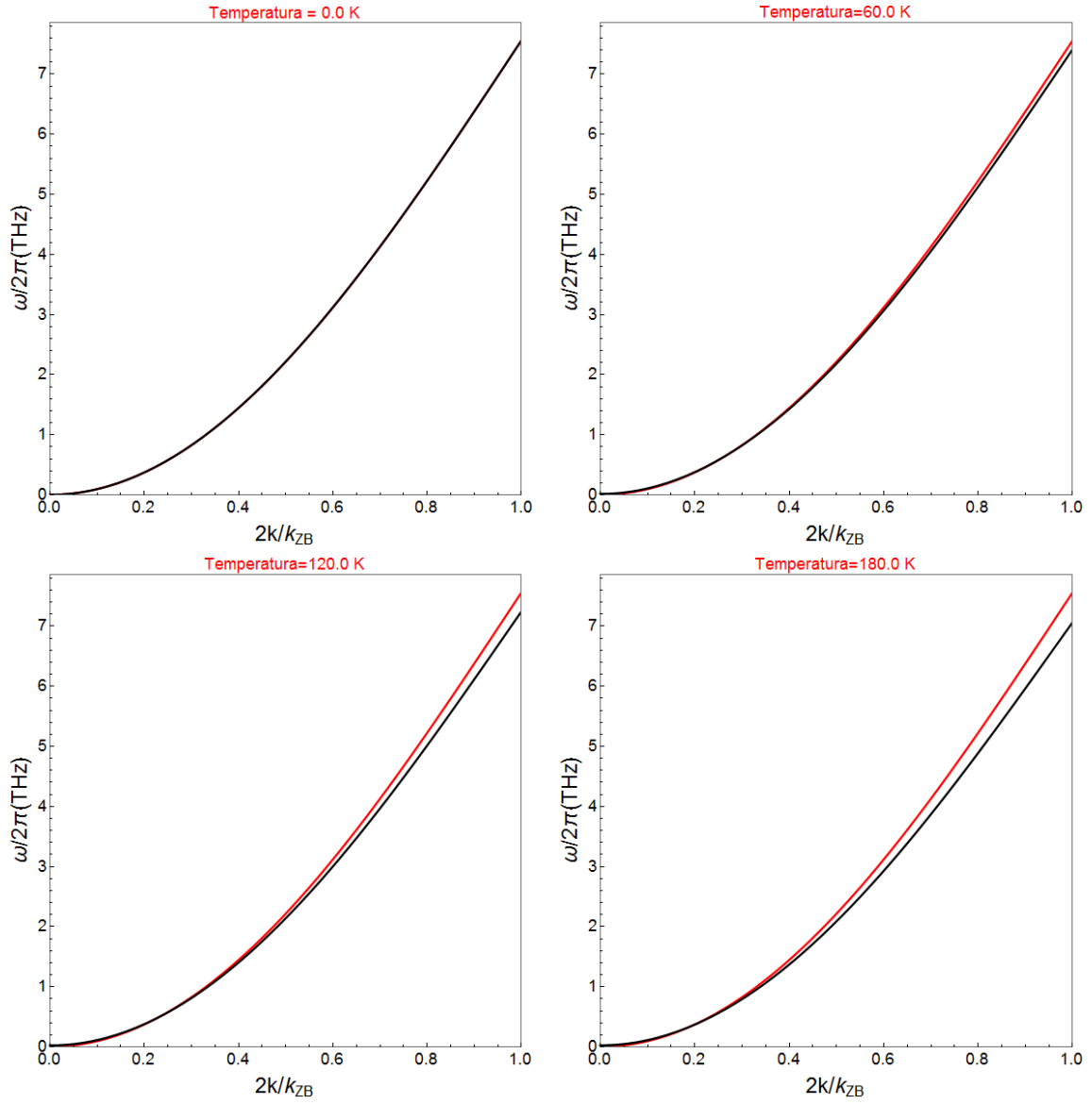


Figura 2.1: Curvas de frequências renormalizadas (pretas) e não renormalizadas (vermelhas) para as ondas de spin no YIG quando o campo magnético aplicado tem valor igual a 1.0 kOe, quando os valores atribuídos à temperatura são 0.0 K, 60.0 K, 120.0 K e 180.0 K. Para calcular a curva vermelha usamos a equação (2.35). Os valores dos parâmetros envolvidos na equação (2.35) que foram empregamos são dados na tabela 1.1. A curva preta foi calculada empregando a equação (5.78) e novamente foram usados os mesmos valores da tabela 1.1 para os parâmetros em (5.78).

$$K(x) = \lambda + \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{4}\right) \quad (2.41)$$

Podemos usar os valores dos parâmetros do YIG dados na tabela 1.1 para definir o par de constantes $C_a = 2\hbar\omega_{ZB}/K_B$ e $C_b = 2\hbar\omega_{ZB}S/3K_B$ as quais têm os valores numéricos $C_a = 725.74 \text{ K}$ e $C_b = 3435.17 \text{ K}$. Com isto, os números de ocupação ficam em forma simplificada ao usar as diferentes funções que temos definido, é dizer $K(x)$ e $L(x)$, assim sua forma funcional em termos de variáveis sem dimensão fica da seguinte maneira:

$$\bar{n}_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \equiv \bar{n}(x, T) = \left[\exp\left(C_a \frac{K(x)}{T} + C_b \frac{K^2(x)}{TL(x)}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.42)$$

Ainda falta uma última expressão que é a contribuição de quarta ordem na energia e dada pela soma que está contida na expressão (2.32). Assim com nossa mudança de variáveis encontramos que:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} \bar{n}_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{(4)} \bar{n}_{\mathbf{p}} = \left(\frac{3\hbar\omega_{ZB}}{S}\right) R(x, T) \quad (2.43)$$

Onde a função $R(x, T)$ é definida por meio da seguinte expressão.

$$R(x, T) = \int_0^1 dy \int_{-1}^1 dz y^2 \left\{ \frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{4}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi y}{4}\right) - \cos^2\left(\frac{\pi}{4}W(x, y, z)\right)}{\exp\left[C_a \frac{K(y)}{T} + C_b \frac{K^2(y)}{TL(y)}\right] - 1} \right\} \quad (2.44)$$

Depois de simplificar chegamos finalmente até a expressão que queremos:

$$\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{ZB}}\right) = 2 \left[K(x) + \frac{3}{2S} R(x, T) \right] \quad (2.45)$$

A seguir apresentamos dois conjuntos de gráficos que mostram os resultados numéricos de nossos cálculos. Em cada gráfico, mostramos duas curvas que indicam como é a variação da frequência como uma função do vetor de onda reduzido ($2k/k_{ZB}$). Em ambos conjuntos de gráficos a frequência é medida em THz. O primeiro conjunto de gráficos está dado na figura 2.1 e em cada um deles há duas curvas: uma vermelha que corresponde a frequência não renormalizada e outra preta que representa a renormalização da

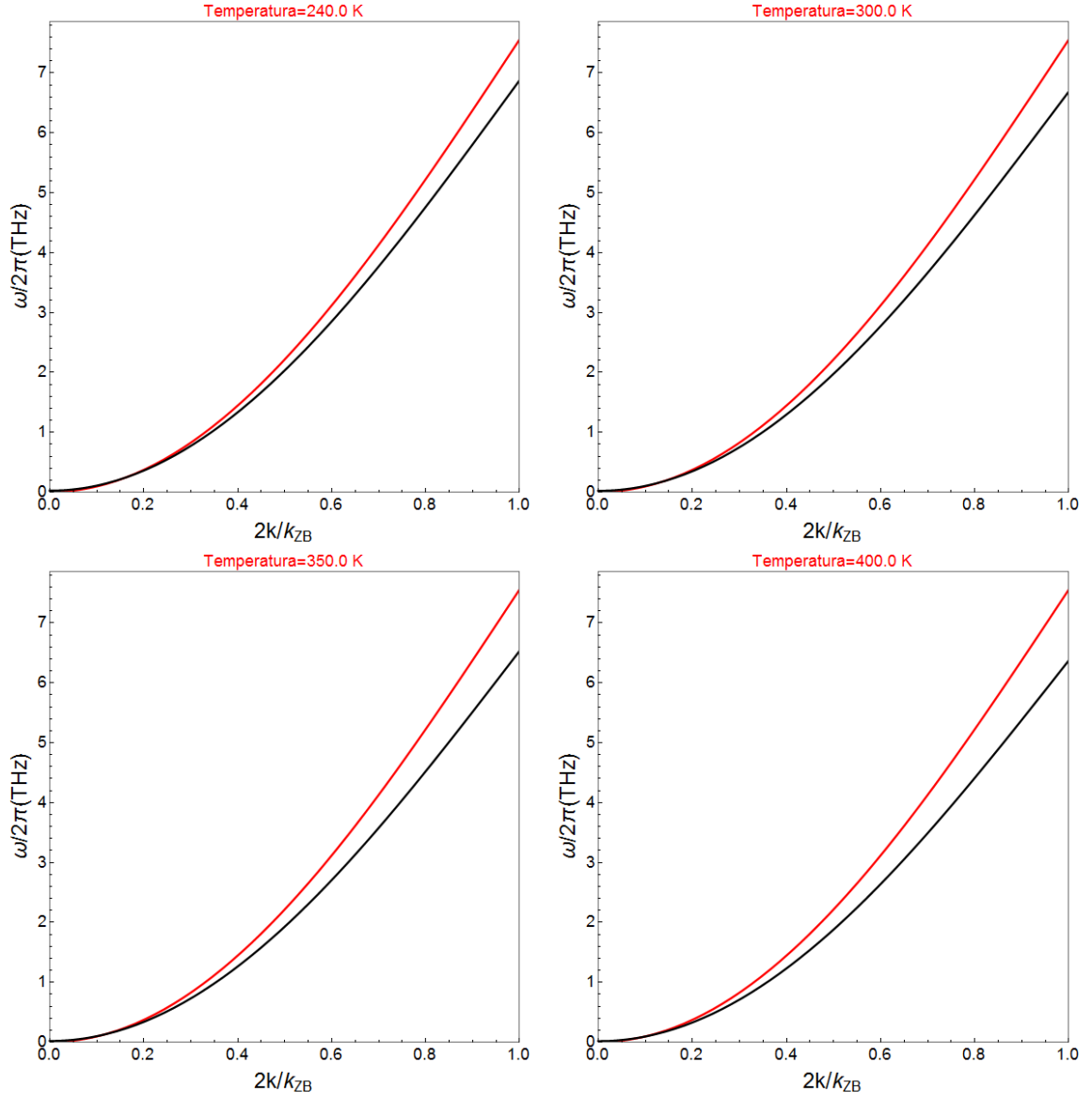


Figura 2.2: Curvas de frequências renormalizadas (pretas) e não renormalizadas (vermelhas) para as ondas de spin no YIG quando o campo magnético aplicado tem valor igual a 1.0 kOe, quando os valores atribuídos à temperatura são 240.0 K, 300.0 K, 350.0 K e 400.0 K. Para calcular a curva vermelha usamos a equação (2.35). Os valores dos parâmetros envolvidos na equação (2.35) que foram empregamos são dados na tabela 1.1. A curva preta foi calculada empregando a equação (5.78) e novamente foram usados os mesmos valores da tabela 1.1 para os parâmetros em (5.78).

frequência. Para todas as curvas se aplica um campo magnético externo de 1.0 kOe. O propósito geral de todos os gráficos é mostrar a mudança que sofre a frequência quando a temperatura do sistema é incrementada. Vemos assim, que quando a temperatura no sistema é de 0.0 K não existe diferença entre as frequências renormalizadas e não renormalizadas, este comportamento é esperado pois os efeitos térmicos em sistemas magnéticos são desprezíveis quando a temperatura é muito baixa em relação à $T = T_C$ ou em seu defeito são completamente nulos em $T = 0$.

Adicional ao caso $T = 0$ na figura 2.1, também são considerados os casos onde a temperatura toma os valores de 60 K, 120 K e 180 K. Pode ser evidenciado que se a temperatura aumenta, a frequência renormalizada diminui seu valor em relação ao caso $T = 0$, que concorda com a não renormalizada. Esta diminuição da frequência renormalizada é uma evidência que os efeitos térmicos se impõem aos efeitos magnéticos. Como estamos interessados no estudo das propriedades térmicas a temperatura ambiente ou próxima desta, consideramos o segundo conjunto de gráficos apresentados na figura 2.2. Novamente se considera a frequência em função do vetor de onda reduzido, mas agora os valores de temperatura considerados são maiores em relação aos gráficos do primeiro conjunto. Agora consideramos para os valores de temperatura a 240 K, 300 K, 350 K e 400 K. Como no caso da figura 2.1, fica evidenciado novamente que para temperaturas mais altas, as frequências renormalizadas diminuem mais rápido. Para fazer os gráficos da figura 2.2, o valor de campo magnético empregado continua sendo o mesmo.

Todos os gráficos descritos nas figuras 2.1 e 2.2, são desenhados considerando o vetor de onda até a metade da primeira zona de Brillouin, pois os valores experimentais são reportados nesta parte da zona de Brillouin [63] e além disso temos que considerar que as relações de dispersão verdadeiras para o YIG na primeira zona de Brillouin são mais complicadas do que a aproximação tomada aqui. Como valor agregado, o propósito final destas estimações consiste em empregá-las para estudar as propriedades de transportes de correntes de spins em bicamadas híbridas entre um ferromagneto isolante e um metal normal como é feito na referência [64].

CAPÍTULO 3

RENORMALIZAÇÃO DA ENERGIA DE MÁGNONS NO ANTIFERROMAGNETO FeF_2

Introdução

No capítulo 1 foram introduzidos os elementos básicos da formulação da teoria de ondas de spins usando a representação de **Holstein-Primakoff-Bogoliubov**, que foi utilizada para determinar as contribuições harmônicas ao Hamiltoniano de um sistema ferromagnético levando em consideração três tipos básicos de interação: exchange, Zeeman e dipolar. Também aplicamos esse formalismo de forma muito semelhante para tratar o caso de um sistema antiferromagnético de duas sub-redes tomando as interações: anisotropia uniaxial, exchange tipo Heisenberg isotrópica e Zeeman como as principais. No capítulo 2, foram consideradas as contribuições de ordem superior no Hamiltoniano ferromagnético, com termos até quarta ordem. Logo após, foi renormalizada a energia de mágnons do ferromagneto usando o método das funções de Green de dois tempos.

Neste capítulo estaremos também dedicados a determinar a renormalização da energia mas esta vez para um sistema antiferromagnético, especificamente vamos considerar o composto FeF_2 . Veremos mais para frente, que no sistema considerado há uma de-

pendência com a temperatura da constante de anisotropia que desempenhará um papel muito importante nas propriedades da energia renormalizada. Além disso, para conseguir nosso propósito podemos dizer em forma geral que combinaremos três tipos de métodos que são: a representação de ondas de spins do capítulo 1, uma aproximação do tipo **RPA**¹ (Random Phase Aproximation) que vai permitir calcular de forma aproximada os valores médios das contribuições de ordem superior na energia e para calcular a dependência na temperatura da constante de anisotropia uma aproximação baseada na teoria de campo médio. Aqui não vamos ser tão formais como no capítulo 2, simplesmente vamos aplicar a teoria **RPA** sem muitos formalismos [65, 66], e que será o coração do capítulo 3.

3.1 Cálculo da constante de anisotropia uniaxial de primeira ordem no FeF_2

Lembremos inicialmente que energia de anisotropia de um antiferromagneto uniaxial de duas subredes pode ser escrita como:

$$E_{ani} = \kappa_1 \sin^2 \varphi + \kappa_2 \sin^4 \varphi + \dots \quad (3.1)$$

onde κ_1 , κ_2 , são as constante de anisotropia de primeira ordem e segunda ordem, respectivamente, φ é o ângulo entre a direção dos momentos magnéticos das sub-redes e o eixo de simetria. Quando a direção dos spins é paralela ao eixo de simetria as seguintes condições têm que ser satisfeitas para que o eixo de simetria seja a direção fácil da magnetização [67]:

$$K_1 > 0; \quad K_2 > -\frac{1}{2}K_1 \quad (3.2)$$

¹Historicamente a aproximação **RPA** apareceu pela primeira vez com um trabalho realizado por D. Bohm e D. Pines no início dos anos cinquenta do século passado. Daí para frente, esses estudos foram estendidos com a ideia de considerar a maior quantidade de efeitos possíveis devido à interação entre elétrons, isto para explicar as propriedades de sistemas tais como: materiais supercondutores, materiais magnéticos, entre outros [68].

O íon Fe tem uma configuração de camada incompleta $3d^6$ e o termo base 5D é desdobrado num dubleto e um tripleto cuja separação é da ordem de $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, como na figura 1.10. No campo cristalino octaédrico a degenerescência orbital é removida, então as interações entre spins e o acoplamento spin-orbita conseguem levantar a degenerescência de ordem quinta do spin no estado base orbital dos íons Fe^{2+} . Em consequência, o desdobramento dos níveis mais baixos pode ser descrito por um Hamiltoniano de spin que atua nos spins verdadeiros ($S = 2$) e toma a forma [69]:

$$\mathcal{H}_s^i = -DS_{iz}^2 + E(S_{ix}^2 - S_{iy}^2) \quad (3.3)$$

Os desdobramentos devidos ao componente ortorrômbico são considerados menores do que aqueles resultantes do campo cúbico. Podemos assim, assumir que o estado base orbital está embaixo do primeiro estado excitado, de forma que pode ser justificada a aplicação da teoria de perturbações para tratar o Hamiltoniano de spin. Então, para escrever a expressão completa do Hamiltoniano, vamos considerar a interação de exchange entre os três primeiros vizinhos como é ilustrado na figura 3.1, a interação de anisotropia uniaxial e também a interação Zeeman. Então, quando o antiferromagneto é introduzido num campo magnético $\mathbf{H}$ o Hamiltoniano ficará dado pela expressão:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 \sum_{j,k}^{(1)} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + J_2 \left(\sum_{j,j'}^{(2)} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j'} + \sum_{k,k'}^{(2)} \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k'} \right) + J_3 \left(\sum_{j,j'}^{(3)} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j'} \right. \\ & + \sum_{k,k'}^{(3)} \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k'} \left. \right) + \sum_j \left(DS_{jz}^2 - E(S_{jx}^2 - S_{jy}^2) + \mu_B \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{g}^{(1)} \cdot \mathbf{H} \right) + \\ & \sum_k \left(DS_{kz}^2 + E(S_{kx}^2 - S_{ky}^2) + \mu_B \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{g}^{(2)} \cdot \mathbf{H} \right) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Pode ser visto que a expressão (3.4) é parecida com a de T. Moriya para o caso do NiF_2 [70]. Nessa equação, indicamos que o índice j representa um sitio num vértice e k um sitio no corpo. Com relação as somas, os índices superiores que aparecem nelas: (1), (2) e (3) indicam as interações entre pares de vizinhos do tipo vértice-vértice ao longo do eixo c , como também no plano ab da célula tetragonal, e por último a interação entre íons Fe^{2+} localizados nos vértices com aqueles situados no centro do corpo. Além do

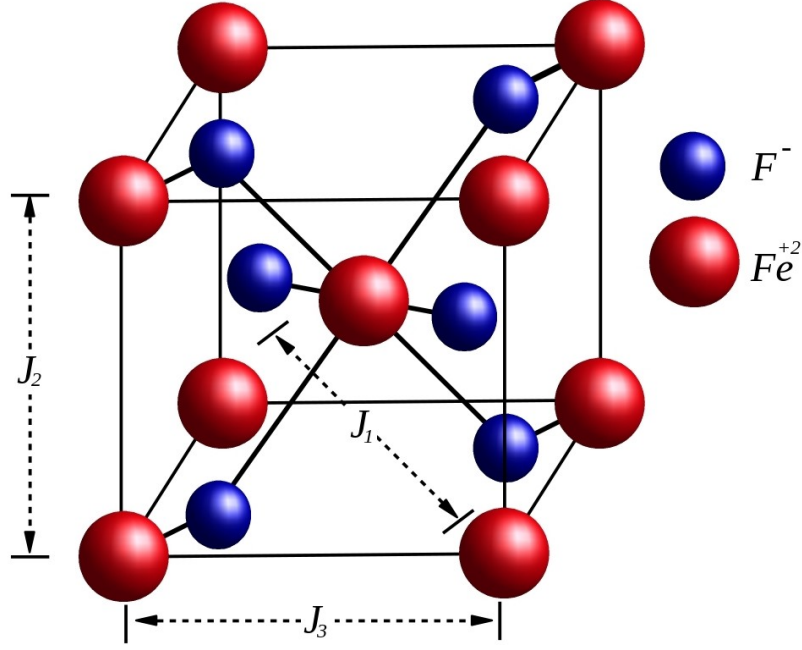


Figura 3.1: Representação gráfica das magnitudes das intensidades nas interações de exchange numa célula unidade do material antiferromagnético FeF_2 .

mais, J_1 , J_2 e J_3 são as constantes de acoplamento de exchange para os diferentes tipos de vizinhos na célula unidade, como é indicado pela figura 3.1. Outras quantidades que aparecem em (3.4) são $\mathbf{g}^{(1)}$ e $\mathbf{g}^{(2)}$, que representam os tensores de cations nos vértices e centrado no corpo respetivamente. Resumindo, podemos ver que a equação para $\mathcal{H}$ considerada aqui, estaria formada exatamente pelas mesmas contribuições que no capítulo 1. Por razões de conveniência, resulta mais fácil trabalhar com os tensores $\mathbf{g}$ numa representação diagonal. Portanto, suas componentes ficariam simplesmente como [70]:

$$\begin{aligned} g_x^{(1)} = g_x^{(2)} = g_1 &= 2(1 - \lambda\Lambda_1) & g_y^{(1)} = g_y^{(2)} = g_2 &= 2(1 - \lambda\Lambda_2) \\ g_z^{(1)} = g_z^{(2)} = g_z &= 2(1 - \lambda\Lambda_z) \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \sum_n \frac{\langle \varphi_0 | L_x | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | L_x | \varphi_0 \rangle}{E_n - E_0} & \Lambda_2 &= \sum_n \frac{\langle \varphi_0 | L_y | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | L_y | \varphi_0 \rangle}{E_n - E_0} \\ \Lambda_z &= \sum_n \frac{\langle \varphi_0 | L_z | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | L_z | \varphi_0 \rangle}{E_n - E_0} \end{aligned} \quad (3.6)$$

No conjunto de equações (3.6), $\mathbf{L}$ é o momento angular dos cátions nos vértices e λ a constante de acoplamento da interação de spin-órbita, $|\varphi_0\rangle$ e $|\varphi_n\rangle$ são os estado base e excitados respectivamente. Em seguida, usaremos a teoria de campo médio e concentraremos nosso tratamento numa célula unitária somente [74]. Assim com a aplicação deste método, conseguiremos uma aproximação razoável e simplificar um pouco o problema. Portanto, a parte do Hamiltoniano que corresponde a interação spin-spin será denotada como $\mathcal{H}_{ss}$ e com isto abreviar os passos seguintes². Como pode ser visto, $\mathcal{H}_{ss}$ é justamente igual aos primeiros três termos da equação (3.4), que podemos escrever numa forma reorganizada como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ss} = & J_1 \sum_{j,k}^{(1)} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + \sum_j \mathbf{S}_j \cdot (J_2 \sum_{j'}^{(2)} \mathbf{S}_{j'} + J_3 \sum_{j'}^{(3)} \mathbf{S}_{j'}) + \\ & + \sum_k \mathbf{S}_k \cdot (J_2 \sum_{k'}^{(2)} \mathbf{S}_{k'} + J_3 \sum_{k'}^{(3)} \mathbf{S}_{k'}) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para aplicar a aproximação de campo médio em (3.7), assumiremos de maneira muito geral que todos os spins que fiquem nos planos ab de qualquer célula, terão o mesmo valor médio. Esta situação, vai corresponder aos spins da sub-rede tipo A, de forma que $\langle \mathbf{S}_{j'} \rangle_{j'-\text{fixo}} = \langle \mathbf{S}_1 \rangle$. Agora, levando em consideração que a orientação dos íons magnéticos localizados no corpo da célula tetragonal é oposta a aqueles que ficam nos planos ab , vai-nos permitir usar o mesmo argumento para fazer a mudança $\langle \mathbf{S}_k \rangle_{k-\text{fixo}} \rightarrow \langle \mathbf{S}_2 \rangle$, este caso é para os spin que conformam a sub-rede tipo B. Como as orientações para os dois tipos de spins são opostas, encontramos que $\langle \mathbf{S}_2 \rangle = -\langle \mathbf{S}_1 \rangle$, de forma que a aplicação da aproximação de campo médio ao Hamiltoniano dado em (3.7) conduz até.

$$\mathcal{H}_{ss} = \sum_j J \mathbf{S}_j \cdot \langle \mathbf{S}_1 \rangle \quad (3.8)$$

Na expressão (3.8) a constante de exchange J está definida como $J = z_3 J_3 + z_2 J_2 - J_1 z_1$, onde z_1 , z_2 e z_3 são os números de coordenação numa célula para os vizinhos tipo 1, 2 e 3 respectivamente. Como todas as células no cristal são idênticas, a equação (3.8) será restringida a uma célula. Não devemos esquecer que esta aproximação será boa sempre

²Em realidade isto não é outra coisa que a interação de exchange tipo Hisenberg.

que o campo aplicado seja menor que do campo critico de spin-flop e que a temperatura do sistema antiferromagneto não fique muito acima da temperatura de Néel T_N , como é o caso que estamos tratando. Se agora observamos a figura 3.1, encontramos que os números de coordenação para as interações de exchange na célula unitária são: $z_1 = 8$, $z_2 = 2$ e $z_3 = 4$. Com isto já podemos formular nosso Hamiltoniano de interação das duas sub-redes, baseados na teoria de campo médio. Aqui, estaremos seguindo basicamente as ideias desenvolvidas nas referências [70, 45] para calcular a constante de anisotropia que depende da temperatura no antiferromagneto FeF_2 e posteriormente usaremos para renormalizar a energia dos mágnons no mesmo. Então, concentraremos toda nossa atenção numa célula cristalina unitária e em lugar de tratar o Hamiltoniano $\sum_j \mathcal{H}_j$, trataremos a $\mathcal{H}_j$ que é dado por:

$$\mathcal{H}_j = J\mathbf{S}_j \cdot \langle \mathbf{S}_1 \rangle + DS_{jz}^2 + E(S_{jx}^2 - S_{jy}^2) + \mu_B \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{g}^{(p)} \cdot \mathbf{H} \quad (3.9)$$

Aqui $p = 1, 2$ de forma que se $p = 1$, então $\mathbf{S}_j$ corresponde ao sitio de um vértice e se $p = 2$ corresponde ao sitio centrado no corpo. Agora nossa maior preocupação fica em diagonalizar o Hamiltoniano para determinar a constante de anisotropia que é obtida mediante o calculo da função de partição. Um caso simples acontece quando não ha campo aplicado ou ele é paralelo ao eixo c , mas não vamos considerar esse caso por ser trivial. Vamos considerar a aplicação de um campo magnético que forma um ângulo φ como o eixo e simetria z . Para esta descrição o eixo z coincidirá obviamente com o eixo cristalino c .

Por outro lado, um fato que devemos adicionar é a igualdade $g_z^{(1)} = g_z^{(2)}$, assim tomaremos eles simplesmente como g . Além disso, não faremos distinção nenhuma nos super-índices de $\mathbf{g}_j^{(p)}$, de forma que tiraremos o p da equação (3.9) porque essa expressão é valida para as duas sub-redes. Outra consideração adicional que usamos por simplificar mais ainda a situação, é $\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_j \equiv S_j^2 \rightarrow S(S+1)$, o autovalor do operador S_j^2 . Também consideramos à polarização do campo magnético aplicado como σ e H_0 sua magnitude. Os estudos feitos mostraram que $E \approx D/10$ [69, 70, 45], com isto po-

demós escrever em boa aproximação o Hamiltoniano para um sítio j na célula unitária do sistema como:

$$\mathcal{H}_j = J\mathbf{S}_j \cdot \langle \mathbf{S}_1 \rangle + DS_{jz}^2 - ES_j^2 + \mu_j g H_0 \mathbf{S}_j \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.10)$$

A forma como temos formulado nossa aproximação, permite supor que os spins terão em forma geral um comportamento semelhante em cada célula cristalina. Assim para maior simplicidade, omitimos o índice j e substituímos o valor médio $\langle \mathbf{S}_1 \rangle$ simplesmente por $\langle \mathbf{S} \rangle$. O passo seguinte para determinar a constante de anisotropia de primeira ordem dependente da temperatura, consiste em calcular a energia livre $\mathcal{F}$ definida por:

$$\mathcal{F} = -N K_B T \log \left(\sum_m e^{-\beta E_m} \right) \quad (3.11)$$

Se tivéssemos um campo magnético externo aplicado na direção z somente como é mostrado na situação (a) da figura 3.2, as energias seriam fáceis de determinar. Neste caso, supondo que a magnitude do campo aplicado é H_0 , e se $|\phi_m\rangle$ é um estado próprio de nosso Hamiltoniano que satisfaz a equação de Schrödinger, os auto-valores de energia E_m , ficaram dados simplesmente como $E_m = \langle \phi_m | \mathcal{H} | \phi_m \rangle$, e como já discutimos $|\langle \mathbf{S}_1 \rangle| \rightarrow S_{1z} \equiv S_z$, conseguimos que:

$$E_m = \vartheta m + Dm^2 - ES(S+1) \quad (3.12)$$

Na equação (3.12) temos definido que $\vartheta = J\langle S_z \rangle + \mu_B g H_0$. Agora pela forma como são dadas as energias próprias, teremos que calcular o valor médio da componente z do spin. Isso é feito usando a definição do momento magnético, devido a que ele guarda relação direta com o operador de spin. Mas essa relação existente entre o momento magnético e o spin é dada por $\boldsymbol{\mu} = g\mu_B \mathbf{S}$, assim depois de combiná-las, a equação do valor médio $\langle S_z \rangle$ é transformada em:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\sum_m m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (3.13)$$

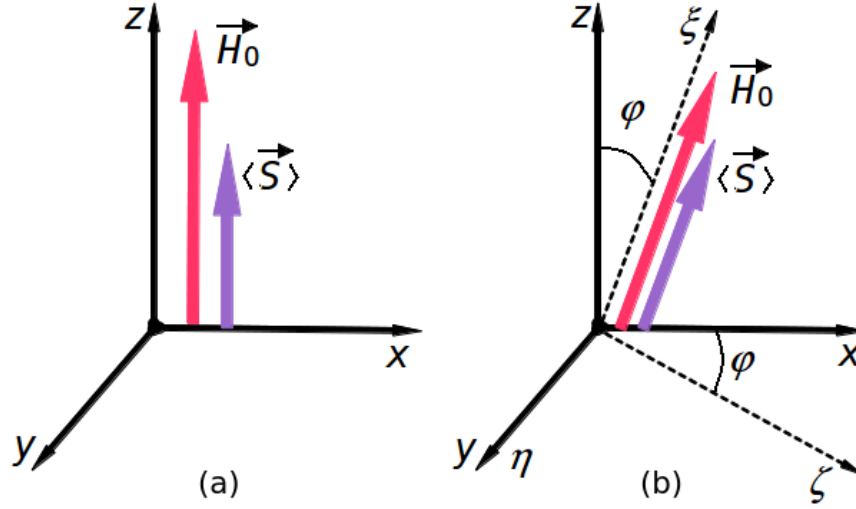


Figura 3.2: Configuração geométrica da interação entre o campo magnético externo aplicado e os spins médios do cristal antiferromagnético FeF_2 .

Ao momento de usar a definição anterior, é fácil de observar que aqueles fatores que contem a $ES(S+1)$ desaparecem posto que são comuns nas duas somas. Com isto já podemos calcular a função de partição e por conseguinte a energia livre que levará a constante de anisotropia de primeira ordem. Vamos supor agora que o campo magnético externo está fora do eixo z e fica contido num plano que também conterá a z , como é representado pela situação (b) da figura 3.2. Isto significa que o operador de spin e seu valor médio mudaram pelo efeito da rotação. Então no plano considerado, $\mathbf{H}$ formará um ângulo φ em relação a z . Assim para resolver a nova dificuldade que surge devido à rotação do campo magnético no sistema, passamos a um novo conjunto de eixos coordenados ortogonais que chamaremos $\xi\zeta\eta$, isto implica que o operador de spin $\mathbf{S}$ muda para $S_\xi \mathbf{e}_\xi + S_\eta \mathbf{e}_\eta + S_\zeta \mathbf{e}_\zeta$. Esta nova situação é verdadeiramente a de nosso interesse, e a descrita anteriormente quando $\mathbf{H}$ aponta ao longo de z é complementar a esta, que ajuda a tratar este novo caso que é mais geral. Também, não é difícil perceber que $\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{S}_n \rangle = \langle S_\xi \rangle \mathbf{e}_\xi + \langle S_\eta \rangle \mathbf{e}_\eta + \langle S_\zeta \rangle \mathbf{e}_\zeta$, sendo $\mathbf{e}_\xi$, $\mathbf{e}_\eta$ e $\mathbf{e}_\zeta$ os vetores unitários no sistema coordenado novo.

Em relação ao anterior, a ligação existente entre os vetores unitários do sistema coordenado antigo e novo resulta ser imediata, e dada por meio de uma transformação

ortogonal unitária elementar. Para este caso, a matriz de rotação é representada por $U(\varphi)$ e está definida de acordo com:

$$U(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

A matriz definida na equação (3.14), permite escrever em forma abreviada o valor médio do operador de spin $\mathbf{S}_n$ no sistema rotacionado, em termos do operador de spin $\mathbf{S}_a$ no sistema sem rotação, isto é, $\mathbf{S}_n = U(\varphi)\mathbf{S}_a$ e relação inversa como $\mathbf{S}_a = U^\dagger(\varphi)\mathbf{S}_n$. Então, quando passamos ao novo sistema coordenado, o Hamiltoniano que tínhamos encontrado antes ficará dado agora por:

$$\mathcal{H}_n = J\mathbf{S} \cdot \langle \mathbf{S}_1 \rangle + DS_\xi^2 - E\mathbf{S}^2 + \mu_B H_0 g_\xi S_\xi \quad (3.15)$$

Para este novo sistema de coordenadas tomamos a orientação tal que $|\langle \mathbf{S}_1 \rangle| \rightarrow \langle S_\xi \rangle$. Um resultado que esperamos com a mudança de sistema de coordenadas é $\mathbf{S}^2 = S_\zeta^2 + S_\eta^2 + S_\xi^2 \rightarrow S(S+1)$. Assim, os autovalores do novo Hamiltoniano são dados pela expressão.

$$E_m = (J\langle S_\xi \rangle + \mu_B g_\xi H_0)m + Dm^2 - ES(S+1) \quad (3.16)$$

Um ponto importante, é que no sistema coordenado novo, as componentes ξ dos operadores de spins satisfazem a equação de Schrödinger $S_\xi |\phi^{(rot)}\rangle = m |\phi^{(rot)}\rangle$ e também pelas mesmas propriedades de simetria de rotação dos operadores de spins, $\mathbf{S}^2 |\phi^{(rot)}\rangle = S(S+1) |\phi^{(rot)}\rangle$, sendo $|\phi^{(rot)}\rangle$ um auto-estado rotacionado do novo Hamiltoniano. Pelo visto, os autovalores mantem a mesma estrutura algébrica no sistema rotacionado o que é evidente se comparamos as formas das equações (3.12) e (3.16). Semelhantemente ao caso em que o campo aplicado aponta ao longo do eixo z no sistema sem rotacionar, definimos a quantidade $\lambda = J\langle S_\xi \rangle + \mu_B g_\xi H_0$. Com a definição de λ , os valores próprios de energia ficam como $E_m = \lambda m + Dm^2 - ES(S+1)$. Então,

a função de partição será dada por:

$$Z = e^{\beta ES(S+1)} \left(1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\beta\lambda) \right) \quad (3.17)$$

Na expressão que define a função de partição o termo β é igual a $(K_B T)^{-1}$, onde K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura medida em Kelvin. Com a função Z já calculada, a determinação da energia livre por íon é imediata. Assim quando usamos (3.17) em (3.11) chegamos até:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 - \left(\frac{N K_B T}{N_I} \right) \log \left(1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\beta\lambda) \right) \quad (3.18)$$

onde temos definido o termo $\mathcal{F}_0$ por meio de $\mathcal{F}_0 = -(N/N_I)ES(S+1)$, onde N_I representa o número de íons magnéticos por célula cristalina. As expressões (3.17) e (3.18) estão definidas explicitamente como uma função de λ . Mas pela forma como foi definido λ resulta obvio que terá uma dependência em $\langle S_\xi \rangle$, que ao mesmo tempo depende dos valores médios $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_z \rangle$ do sistema antigo. Nesta ordem de ideias, um elemento faltante e que faz uso das dependências existentes entre as componentes do spin nos sistemas coordenados novo e antigo, é o valor médio da componente do spin orientada ao longo do campo magnético aplicado. Especificamente, estaremos precisando de $\langle S_z \rangle$. Isto é conseguido se na equação (3.13) usamos $\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_\xi \rangle$, onde os valores próprios E_m que aparecem em (3.13) agora são dados pela expressão (3.16). Então de acordo com isto, obtemos para $\langle S_\xi \rangle$:

$$\langle S_\xi \rangle = -2 \left(\frac{e^{-\beta D} \sinh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \sinh(2\beta\lambda)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\beta\lambda)} \right) \quad (3.19)$$

As soluções da equação (3.19) para cada valor de temperatura T fornecem o valor de $\langle S_z \rangle$, mas não o valor de $\langle S_x \rangle$. Esta dificuldade é resolvida expressando o valor de $\langle S_x \rangle$ em termos de $\langle S_z \rangle$, uma relação que é obtida aproveitando a geometria apresentada na figura 3.2 (b), $\langle S_x \rangle = \tan \varphi \langle S_z \rangle$. Portanto, em relação a isto temos que $\lambda(\varphi) = J \sec \varphi \langle S_z \rangle + \mu_B g_\xi H_0$. Além disso, podemos mostrar que $g_\xi \approx g_z$. Para fazê-lo, consideremos que o tensor $\mathbf{g}$ no sistema de coordenadas antigo é denotado por $\mathbf{g}_a$ de

tal forma que em esse sistema de coordenadas sua representação é diagonal é:

$$\mathbf{g}_a = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 \\ 0 & g_2 & 0 \\ 0 & 0 & g_z \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

No sistema de coordenadas novo, o tensor $\mathbf{g}$ é transformado em outro que denotaremos simplesmente como $\mathbf{g}_n$. De esta maneira a transformação que sofre $\mathbf{g}_a$ pelo efeito da rotação do campo magnético aplicado é justamente $\mathbf{g}_n = U(\varphi)^\dagger \mathbf{g}_a U(\varphi)$. Assim a matriz que representa $\mathbf{g}_n$ é dada por:

$$\mathbf{g}_n = \begin{pmatrix} (g_1 \cos^2 \varphi + g_z \sin^2 \varphi) & 0 & (g_1 - g_z) \cos \varphi \sin \varphi \\ 0 & g_2 & 0 \\ (g_1 - g_z) \cos \varphi \sin \varphi & 0 & (g_1 \cos^2 \varphi + g_z \sin^2 \varphi) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Também, a energia Zeeman é transformada como $\mathcal{H}_{Ze} = \mu_B \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{g}_n \cdot \mathbf{H}_n$. Mas acontece que pelas orientações estabelecidas no sistema novo, temos que $\mathbf{S}_n = (S_\zeta, S_\eta, S_\xi)^\dagger$ e $\mathbf{H}_n = (0, 0, H_0)^\dagger$, isto pode ser verificado facilmente na figura (3.2) (b). Por tanto a energia Zeeman fica como $\mathcal{H}_{Ze} = \mu_B H_0 (g_1 \cos^2 \varphi + g_z \sin^2 \varphi) S_\xi = \mu_B H_0 g_\xi S_\xi$, onde temos designado a g_ξ por $g_\xi = (g_1 \cos^2 \varphi + g_z \sin^2 \varphi)$. Pelos estudos feitos em espectroscopia Mössbauer, está indicado que $g_1 \approx g_z$ [46]. Conseguimos então que $g_\xi \approx g_z$, é por isto que o resultado final para o $\lambda(\varphi)$ é dado por.

$$\lambda \equiv \lambda(\varphi, \langle S_z \rangle, H_0) \approx \frac{J}{\cos \varphi} \langle S_z \rangle + \mu_B g_z H_0 \quad (3.22)$$

Para simplificar a notação, tomaremos a mudança $s = \langle S_z \rangle$ em todas as equações onde aparece $\langle S_z \rangle$. Usando novamente a figura 3.2 (b), observamos que podemos limitar o valor de φ à região $0 \leq \varphi < \pi/2$. Das transformações e simplificações anteriores é obtido que $\langle S_\xi \rangle = s \sec \varphi$, combinando este resultado com as equações (3.19) e (3.22) encontramos que:

$$s = -2 \left(\frac{\sinh(\beta\lambda) + 2e^{-3\beta D} \sinh(2\beta\lambda)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\beta\lambda)} \right) e^{-\beta D} \cos \varphi \quad (3.23)$$

Com a equação anterior temos a dificuldade de que existem três variáveis todas dependentes da temperatura, as quais são: o parâmetro de exchange $J = J_{eff}(T) = z_3 J_3 + z_2 J_2 - z_1 J_1$, o parâmetro $D = D(T)$ e também o spin mesmo. Portanto, não podemos fazer um ajuste tradicional onde são obtidos os valores dos parâmetros porque neste caso existe uma redução apreciável do valor médio da componente z do spin, a medida que ficamos mais perto da temperatura crítica T_N . Para demonstrar isto, vamos considerar o caso em que não há campo externo aplicado, o qual imediatamente conduz à condição $\varphi = 0$. Assim o produto $\beta\lambda$ que aparece em (3.23) é reduzido a $\beta\lambda = (J/K_B T_N) s \tau^{-1}$, onde fizemos a mudança $T = \tau T_N$ e para o produto $\beta D = (D/K_B T_N) \tau^{-1}$. Em consequência, transformamos a equação (3.23) como:

$$s = -2 \left(\frac{e^{-(D/K_B T_N) \tau^{-1}} \sinh \left(\frac{J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right) + 2e^{-(4D/K_B T_N) \tau^{-1}} \sinh \left(\frac{2J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right)}{1 + 2e^{-(D/K_B T_N) \tau^{-1}} \cosh \left(\frac{J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right) + 2e^{-(4D/K_B T_N) \tau^{-1}} \cosh \left(\frac{2J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right)} \right) \quad (3.24)$$

Então quando os valores de J , D e T_N sejam dados, podemos resolver numericamente a equação (3.24) para encontrar o valor médio da componente z do spin como uma função da temperatura. Adicionalmente, lembremos que a dependência da magnetização espontânea das sub-redes com a temperatura se relaciona com o valor médio de spin através da expressão $m(T) = M(T)/M(0) = \frac{1}{2} \langle S_z \rangle$, que pode ser obtida facilmente usando a relação entre o spin e o momento magnético. As computações numéricas usando (3.24) são feitas assumindo que os valores de J , u não dependem da temperatura e seus valores são extraídos da referência [69], com $J_1 = 7.23 \times 10^{-16}$ erg, $J_2 = -9.54 \times 10^{-18}$ erg e $J_3 = 3.85 \times 10^{-17}$ erg respectivamente, para o parâmetro restante temos $D = 1.28 \times 10^{-15}$ erg. Com os valores dados aos parâmetros J_i 's obtemos, $J_{eff} = -5.65 \times 10^{-15}$ erg.

Na figura 3.3, é mostrado o resultado encontrado com o modelo proposto pela equação

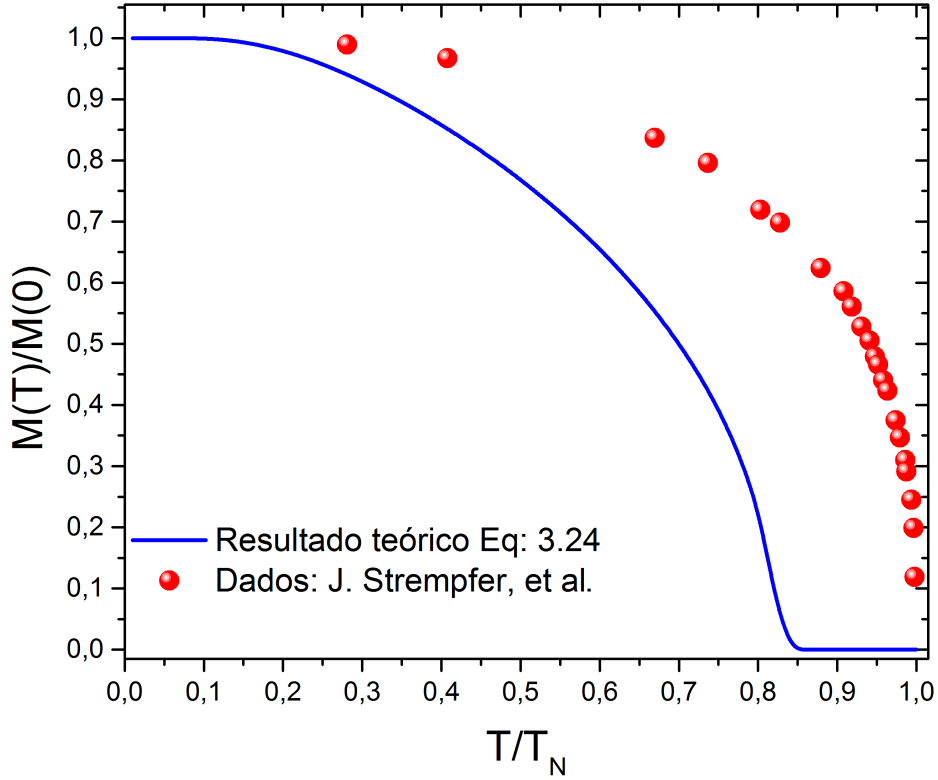


Figura 3.3: Comparação dos dados experimentais de J. Strempfer, *et al* [71, 72] da magnetização espontânea para o FeF_2 , com o resultado teórico fornecido pela equação (3.24), na ausência de campo magnético externo.

(3.24). Basicamente o que fizemos foi buscar os valores de s que satisfazem dita equação para os valores fornecidos de J e D . Foi, assumido que o valor da temperatura de Néel é igual a 78.393 K. Além disso, como $s(T = 0K) = 2$ dividimos por este valor as soluções encontradas, do qual encontramos o valor teórico de $m(T)$ aplicando nosso modelo. Este resultado é representado pela linha azul que é comparado com as medidas de J. Strempfer, *et al* [71, 72] obtidas pela difração magnética de raios-X e representados pelos pontos vermelhos. Se observa a enorme diferencia que existe entre o resultado teórico e os valores experimentais. Esta diferencia é atribuída à mudança que sofrem J_{eff} e u a medida que ficamos mais perto de T_N .

Em relação ao anterior, vamos supor agora que os valores de J_{eff} e u são desconhecidos, e também assumimos novamente o mesmo valor para T_N . Neste caso, empregamos a equação como um modelo de ajuste, isto com o proposito de obter os valores para esses

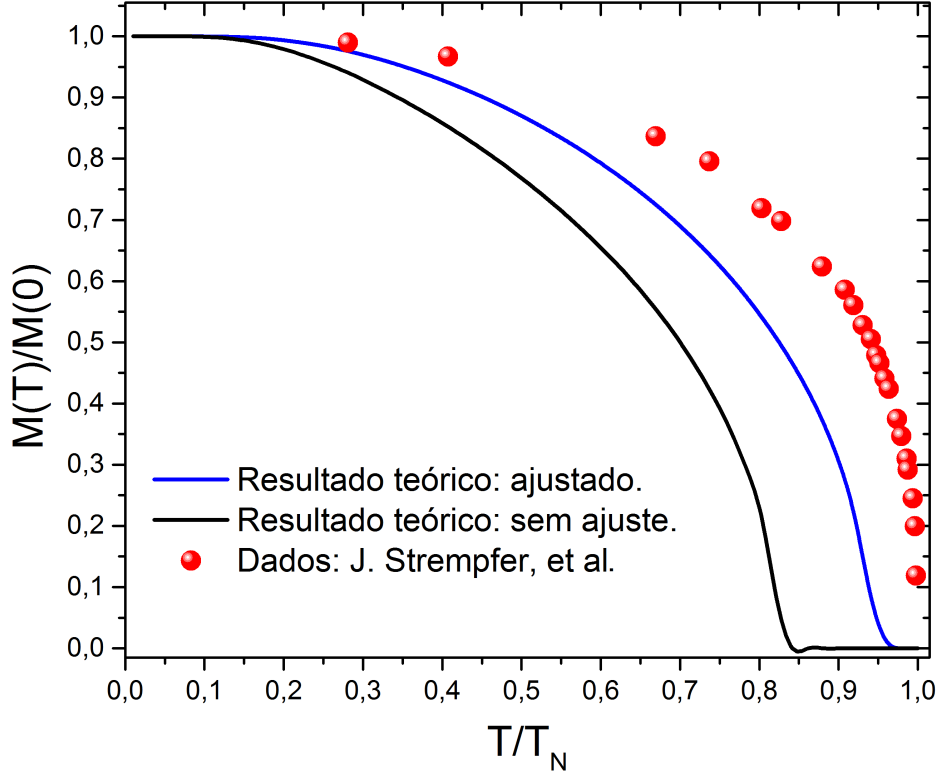


Figura 3.4: Comparação dos dados experimentais de J. Strempfer, *et al* [71, 72] da magnetização espontânea para o FeF_2 , com o resultado teórico fornecido pela equação (3.24), na ausência de campo magnético externo.

parâmetros. Então ao ajustar, usando otimização não linear de Nelder-Mead [44], encontramos que $J_{eff} = -3.86 \times 10^{-14}$ erg e $D = 3.00 \times 10^{-15}$ erg respectivamente, os resultados são apresentados na figura 3.4 e se observa que o ajuste produz um resultado aceitável so para temperatura bem abaixo de T_N . Para seguir fazendo nossas estimações com maior precisão, faremos um ajuste dos dados da magnetização espontânea, de tal forma que criamos uma nova função que forneça valores que estejam muito próximos dos dados reais da magnetização espontânea. Assim, definindo a função $m_A(T)$ como:

$$m_A(T) = 1 - \sum_{n=1}^{N_{max}} \alpha_n \left(\frac{T}{T_N} \right)^{\beta_n} \quad (3.25)$$

encontramos que valores ótimos para os parâmetros da equação (3.25), vêm dados por: $N_{max} = 2$, $\alpha_1 = 0.2775$, $\alpha_2 = 0.5937$, $\beta_1 = 49.3909$ e $\beta_2 = 3.4370$ respectivamente. Então usaremos a $m_A(T)$ para fornecer qualquer valor aproximado de $M(T)/M(0)$ no

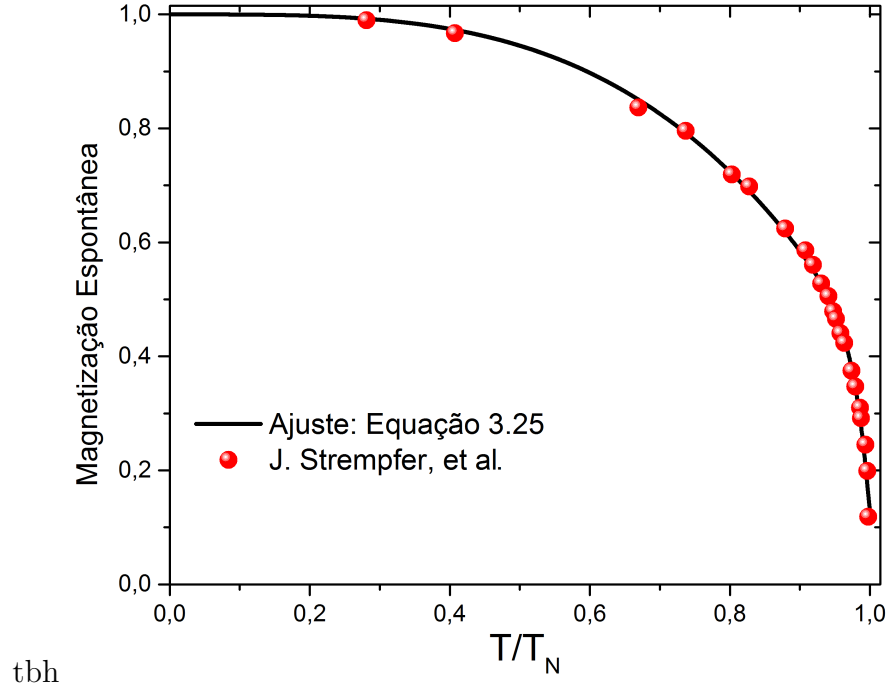


Figura 3.5: Comparação dos dados experimentais das referências [71, 72], com o resultado fornecido pela função de ajuste (3.25).

intervalo $[0, T_N]$. Para ver que tão boa é a função criada, comparamos os dados das referências [71, 72] com $m_A(T)$ e o resultado é apresentado na figura 3.5.

Agora seguimos com a determinação da energia de anisotropia magneto cristalina. Assim vamos concentrar nossa atenção em obter a constante de anisotropia uniaxial. Em consequência, para calcular essa constante a primeira ordem, tomaremos a mudança de variável adicional $w = \sin\varphi$, com $0 < w \leq 1$, então é claro que $\varphi = \varphi(w)$. Portanto, $\mathcal{F} = \mathcal{F}(s, T, H_0, w)$ sempre que o campo seja fixo. Agora se definimos a função $\Lambda(s, T, H_0, w)$ como.

$$\Lambda(s, T, H_0, w) = 1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\lambda) \quad (3.26)$$

a função de partição pode ser expressa de forma simplificada como:

$$\mathcal{F}(s, T, H_0, w) = \mathcal{F}_0 - \left(\frac{N K_B T}{N_I} \right) \log \Lambda(s, T, H_0, w) \quad (3.27)$$

Finalmente para determinar a constante de anisotropia em função da temperatura,

expandimos a $\mathcal{F}(s, T, w)$ numa serie de Taylor na variável w ao redor do ponto $w = 0$.

$$\mathcal{F}(s, T, H_0, w) = \mathcal{F}_0 + w \left(\frac{\partial \mathcal{F}(s, T, H_0, w)}{\partial w} \right)_{w=0} + \frac{w^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}(s, T, H_0, w)}{\partial w^2} \right)_{w=0} + O(w^3) \quad (3.28)$$

Ao calcular as derivadas da função $\mathcal{F}(s, T, H_0, w)$ com relação a w , se encontro que todas as derivadas de ordem ímpar avaliadas em $w = 0$ são nulas. Em consequência, todas as potencias de w na expansão em serie de $\mathcal{F}(s, T, H_0, w)$ com relação a w , são de ordem par. Assim a equação (3.28) é reduzida a uma expressão da forma:

$$\mathcal{F}(s, T, H_0, w) = \mathcal{F}_0 + \frac{w^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}(s, T, w)}{\partial w^2} \right)_{w=0} + \frac{w^4}{4!} \left(\frac{\partial^4 \mathcal{F}(s, T, w)}{\partial w^2} \right)_{w=0} + O(w^6) \quad (3.29)$$

Denotamos os coeficientes da serie de Taylor de $\mathcal{F}(s, T, H_0, w)$ na equação (3.29) como κ_1, κ_2 , etc. Além do mais, se fazemos a substituição $w = \text{sen}\varphi$, a serie de Taylor para a função $\mathcal{F}(s, T, H_0, w)$ é dada por:

$$\mathcal{F}(s, T, H_0, \varphi) = \mathcal{F}_0 + \kappa_1 \text{sen}^2 \varphi + \kappa_2 \text{sen}^4 \varphi + \dots \quad (3.30)$$

Em relação ao anterior, é assumido que as derivadas da energia livre representam muito bem as contribuições de diferentes ordens da energia de anisotropia magnética, a comparação entre as equações (3.1) e (3.30), implica que a constante de anisotropia magnética de primeira ordem ficará finalmente dada pela expressão:

$$\kappa_1(T) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}(s, w)}{\partial w^2} \right)_{w=0} \quad (3.31)$$

Usamos as equações (3.26) e (3.27) para calcular a segunda derivada da energia livre em relação w , avaliando-a em $w = 0$. Depois usamos a definição de $\kappa_1(T)$ dada pela equação (3.31). Com isso, obtemos a relação seguinte.

$$\kappa_1(T) = -\frac{NJ}{N_I} \left(\frac{e^{-\beta D} \text{senh}(\beta \lambda) (1 + 4e^{-3\beta D} \cosh(\beta \lambda))}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta \lambda) + 2e^{-4\beta D} \cosh(2\beta \lambda)} \right) \quad (3.32)$$

A constante de anisotropia D que aparece na expressão do Hamiltoniano do sistema an-

tiferromagnético de duas sub-redes neste capítulo e do capítulo 1, se assumira que pode ser obtida razoavelmente a partir da expressão para s e a que define $\kappa_1(T)$ na equação (3.32). A primeira vista percebemos que (3.32), está condicionada basicamente pela forma como estão distribuídos os momentos magnéticos no cristal antiferromagnético, e que são dependentes dos valores atribuídos aos três parâmetros: temperatura no sistema, intensidade de campo magnético aplicado, e sua orientação no sistema em relação ao eixo específico de referência, que é o eixo cristalino c .

De maneira parecida ao caso do spin médio, não poderemos determinar a expressão para a constante de anisotropia pelo fato que esta depende do spin médio, de J e D que dependem também da temperatura, mas se podemos usar as medidas de ressonância antiferromagnética (AFMR) em função da temperatura de Ohlmann e Tinkham [45] em ausência de campo magnético externo. De acordo com isto, lembremos que a frequência de ressonância antiferromagnética de um sistema antiferromagnético de duas sub-redes com anisotropia uniaxial em campo nulo e $\mathbf{k} = 0$ é dada por $\omega_R = \gamma\sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$, onde $\gamma = (ge/2mc)$ é o fator giromagnético, H_E e H_A são os campos de exchange e anisotropia respectivamente. Então, combinaremos o resultado experimental de ω_R com o valor calculado para $\kappa_1(T)$, para determinar a distribuição de momentos magnéticos e parâmetros relacionados. Portanto quando $H_0 = 0$, a expressão de $\kappa_1(T)$ é dada por:

$$\kappa_1(T) = \frac{NJ}{N_I} \left(\frac{e^{-(D/K_B T_N \tau)} \sinh \left(\frac{J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right) \left(1 + 4e^{-3(D/K_B T_N \tau)} \cosh \left(\frac{J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right) \right)}{1 + 2e^{-(D/K_B T_N \tau)} \cosh \left(\frac{J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right) + 2e^{-4(D/K_B T_N \tau)} \cosh \left(\frac{2J}{K_B T_N} \frac{s}{\tau} \right)} \right) \quad (3.33)$$

Na equação anterior tomamos para os argumentos das funções hiperbólicas e exponenciais as mesmas mudanças que foram tomadas na equação do spin. Pode ser visto da expressão (3.33) que ao tomar o limite $T \rightarrow 0$ obtemos $\kappa_1(T) \rightarrow \kappa_1(0) = NJ(0)/N_I$. Portanto, para combinar os resultados como queremos, precisamos fazer as suposições adicionais $\gamma\hbar H_E = 2zSJ \rightarrow \gamma\hbar H_E \approx 2S|J_{eff}|$ e também $\gamma\hbar H_A = (2S - 1)D \rightarrow \gamma\hbar H_A \approx (2S - 1)|K_1(T)|$, então sem criar confusão tomamos $J_{eff} \equiv J = J(T)$. Por outra parte, usando os dados de [45] para as frequências de ressonância antiferromagnética, como as medidas da magnetização espontânea de J. Strempfer [71, 72] e

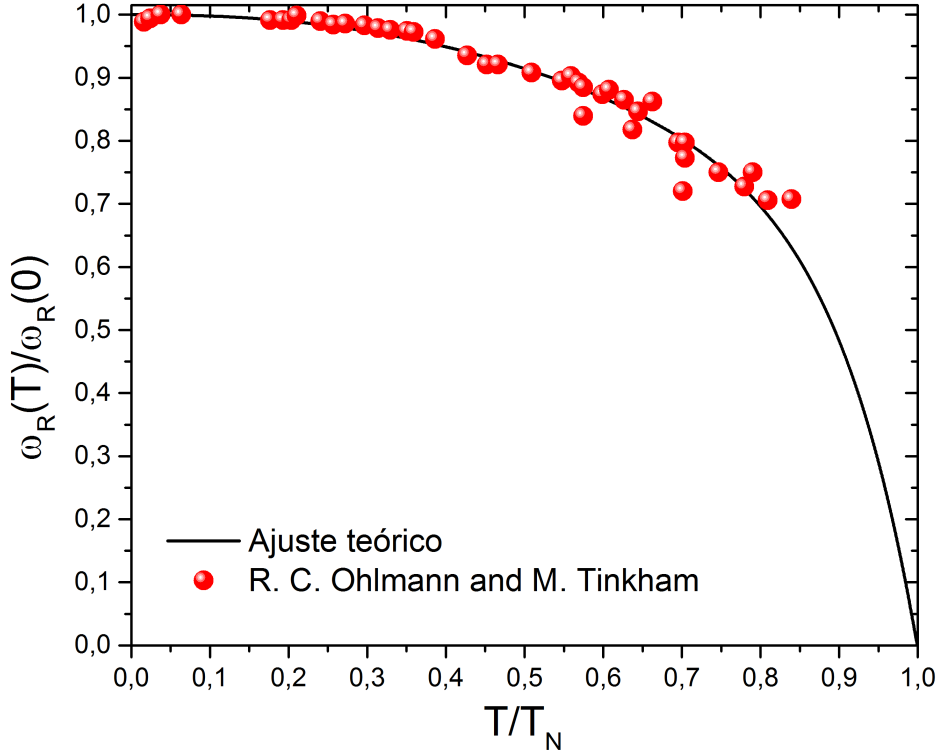


Figura 3.6: Comparação entre os dados de frequências de ressonância antiferromagnética experimental [45], com o ajuste dessas medidas usando um modelo do tipo expressado pela equação (3.25).

empregando as equações (3.24) e (3.33) criamos um sistema consistente de equações algébricas não lineares nas variáveis J e D . Uma dificuldade que deve ser lembrada ao tomar os dados de Ohlmann e Tinkham, é a limitação de que seus dados de frequências foram tomadas somente na faixa de temperaturas compreendidas entre 1.5 K e 66.0 K sendo o limite superior bem abaixo da temperatura de Néel. Apesar disso, podemos resolver a dificuldade procedendo da mesma forma como foi feito para o caso dos dados da magnetização espontânea, isto é, usando um modelo semelhante ao proposto na equação (3.25) criamos uma nova função que aproxime o maior possível os dados experimentais reais para usá-los nas estimações numéricas de interesse empregando nosso modelo. Então, usando o método de otimização não linear de Nelder-Mead [44] para fazer o ajuste, obtemos resultados ótimos que aproximam muito bem na faixa disponível de temperatura os dados de frequência AFMR, com parâmetros: $\alpha_1 = 0.5841$, $\alpha_2 = 0.4213$, $\beta_1 = 10.8358$ e $\beta_2 = 2.3083$ respectivamente. Em relação a todo o ante-

rior, o objetivo central da criação de funções de ajustes que possuam o tipo (3.25), é conseguir valores que estejam o mais próximo possível aos valores reais obtidos experimentalmente, e logo ser usados na modelagem numérica, isto mais que qualquer outro proposito. Na figura 3.6 apresentamos o resultado de comparar $(\omega_R(T)/\omega_R(0))$ medido com o calculado, e observamos que na faixa de temperaturas acessíveis das medidas, o resultado teórico ajusta muito bem os dados experimentais. Este, sera usado para desenvolver os passos seguintes. Então, para conseguir o proposito proposto, usaremos como ponto inferior de temperatura o valor $T_0 = 4.2$ K, isto devido a las limitações que apresentam as medidas de magnetização espontânea e frequência de ressonância anti-ferromagnética em relação ao ponto inicial de temperatura que é tomado para realizar essas medidas. Assim, tomaremos a seguinte notação para representar as quantidades envolvidas: $\omega_R(T) \equiv \omega$, $\omega_R(T_0) \equiv \omega_0$, $H_A(T) \equiv H_A$ e a representação das quantidades restantes é similar. Além disso, precisamos tomar por conveniência as mudanças nos argumentos das exponencias como $a = (D/K_B T_N)$ e $b = (J/K_B T_N)$ respectivamente. Portanto, é observado sem dificuldade que o quadrado de ω/ω_0 está dado por:

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = \left(\frac{H_A + 2H_E}{H_{A0} + 2H_{E0}}\right) \frac{H_A}{H_{A0}} \quad (3.34)$$

Vamos reescrever a equação (3.34), definindo o valor da constante λ_{EA} como o quociente do campo de exchange com o de anisotropia quando a temperatura é 4.2 K, isto é, $\lambda_{EA} = (H_{E0}/H_{A0})$, este valor é fácil de estimar devido as suposições que temos tomado e que além do mais eles ja foram determinados no capítulo 1 do ajuste com as relações de dispersão experimentais obtidas por médio de espalhamento de nêutrons. Então de acordo com isto, a equação (3.34) pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = \left(\frac{(H_A/H_{A0}) + 2(H_E/H_{A0})}{1 + 2\lambda_{EA}}\right) \frac{H_A}{H_{A0}} \quad (3.35)$$

Adicionalmente, das definições estabelecidas para os campos de exchange e anisotropia

se deduz sem dificuldade a seguinte relação:

$$\frac{H_E}{H_A} = \left(\frac{2S}{2S-1} \right) \frac{J}{\kappa} = \left(\frac{2S}{2S-1} \right) \left(\frac{b}{\kappa/K_B T_N} \right) \quad (3.36)$$

Para simplificar as equações o maior possível, tomaremos a parte funcional da constante de anisotropia que contém as funções exponenciais por meio da seguinte definição:

$$f \equiv f(a, b, s, \tau) = \left(\frac{e^{-(a/\tau)} \sinh\left(\frac{bs}{\tau}\right) \left(1 + 4e^{-3(a/\tau)} \cosh\left(\frac{bs}{\tau}\right)\right)}{1 + 2e^{-(a/\tau)} \cosh\left(\frac{bs}{\tau}\right) + 2e^{-4(a/\tau)} \cosh\left(\frac{2bs}{\tau}\right)} \right) \quad (3.37)$$

com ajuda da equação (3.37), podemos expressar a anisotropia de primeira ordem como $\kappa = (NJ/N_I)f$. De acordo com isto, é fácil ver que $\kappa/\kappa_0 = (Jf/J_0 f_0)$, onde f_0 é a função f avaliada na temperatura $T = T_0$, ou seja, $f_0 = f(a(T_0), b(T_0), s(T_0), \tau_0)$. Um fato importante de definir a κ dessa forma, é por exemplo que permite escrever a κ_0 como:

$$\frac{\kappa_0}{K_B T_N} = \left(\frac{2S}{2S-1} \right) \left(\frac{b_0}{\lambda_{EA}} \right) \quad (3.38)$$

Se substituirmos a equação (3.38) na expressão para H_E/H_{A0} , nós encontramos que $(H_E/H_{A0}) = (b/b_0)\lambda_{EA}$. Portanto, substituindo as relações obtidas para: H_E/H_{A0} , H_E/H_{A0} , e H_{E0}/H_{A0} na expressão (3.35), conseguimos a equação complementar de (3.24), que permite obter os valores de a e b para cada valor de s quando a temperatura presente é T , isto é:

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 = \left(\frac{b}{b_0} \right)^2 \frac{f(f + 2\lambda_{EA} f_0)}{f_0^2 (1 + 2\lambda_{EA})} \quad (3.39)$$

O passo final para encontrar a anisotropia consiste em substituir $s = 2m(\tau)$ nas equações (3.24) e (3.39), com essa substituição resolvemos as duas equações simultâneas, das quais encontramos os valores de a e b que são substituídos na expressão (3.33) que define a κ . As computações numéricas são feitas da seguinte maneira: tomamos o intervalo de temperatura $T_0 = 4.200 \text{ K} \leq T \leq T_N = 78.394 \text{ K}$ e dividimos ele em 100 pontos, então para cada valor de temperatura associamos um valor de magnetização espontânea usando a expressão de $m_A(T)$, com isso resolvemos o conjunto de

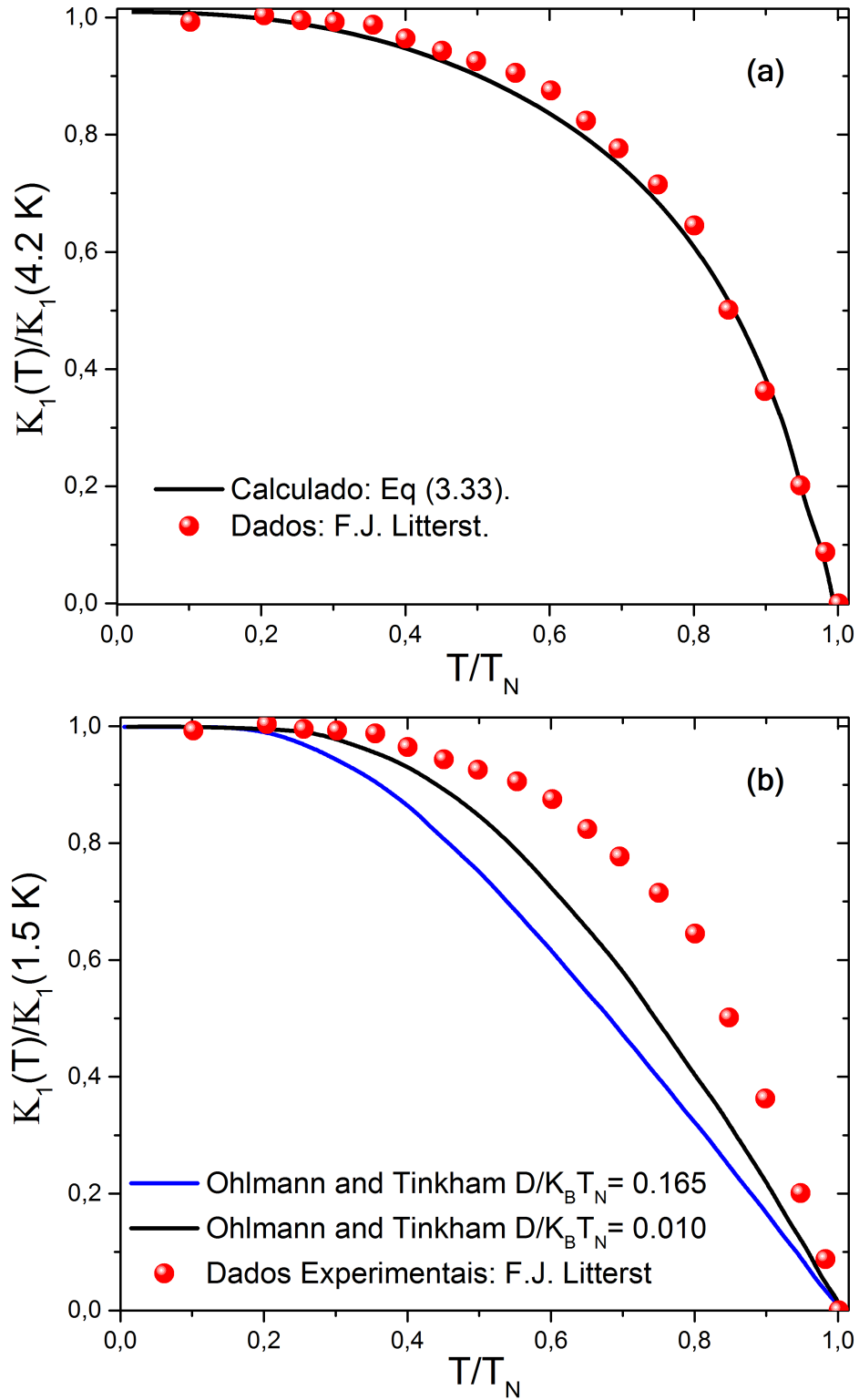


Figura 3.7: (a) Comparação das medidas experimentais da constante de anisotropia magneto cristalina $\kappa_1(T)$ [73], com o resultado teórico fornecido pela equação (3.33) para o material FeF_2 , num campo magnético externo nulo. (b) Comparação do modelo teórico de Ohlmann e Tinkham usando os mesmos dados da referência [73], tomando condições iguais de campo magnético externo nulo e temperaturas menores que T_N .

equações não lineares 3.24 e 3.39, as soluções fornecem os valores de $D(T)$ e $J_{eff}(T)$ que logo substituímos na equação 3.33. O resultado do procedimento numérico anterior é apresentado na figura 3.7. Ali temos dois gráfico da anisotropia magneto cristalina relativa como uma função da temperatura para o FeF_2 . Nossos resultados corresponde ao gráfico (a) e são comparados com os valores experimentais obtidos por F. J. Litterst [73] usando técnicas de espectroscopia Mössbauer, a curva calculada está em bastante acordo com o resultado experimental o que indica que nossas estimações numéricas são satisfatórias. Também como temos usado as mediadas de frequências ressonâncias antiferromagnética de Ohlmann e Tinkham decidimos comparar seus resultados teóricos com as medidas de F. J. Litterst, de forma que exista uma comparação direta entre nosso modelo teórico e o deles, assim resulta perceptível a diferencia entre ambos modelos teóricos quando se compara com os dados experimentais, e observamos que são mais apropriadas nossas estimações. A diferencia fundamental está em que eles assumem que os valores de J e D são fixos, o qual não é certo, isto pode ser visto do gráfico 3.8 onde apresentamos como muda o comportamento de $b(T)/b_0 = J_{eff}(T)/J_{eff}(T_0)$ para todas a temperaturas compreendidas entre 4.2 K e a temperatura de Néel T_N .

Da discussão anterior sobre os gráficos da figura 3.7, se observa que para valores de temperatura perto do ponto $T = 0$, o valor de $\kappa_1(T)/\kappa_1(T_0)$ se mantem quase constante, isto nós permite tomar como boa aproximação a $\kappa_1(0) \approx \kappa_1(4.2\text{K})$. Então, o valor de $\kappa_1(4.2\text{K})$ por íon de Fe^{2+} , pode ser estimado usando a equação (3.38), para isso é preciso o valor de b_0 , que de acordo com as soluções numéricas fornecidas pelo sistema de equações discutido anteriormente quando $T = 4.2$ K, $b_0 = -0.5046$. Também, usamos os valores de H_A e H_E do capítulo 1, posto que κ_1 é positiva, depois de tomar o valor absoluto, o resultado de nossa estimação conduz a $\kappa_1(4.2\text{K}) = 1.37 \times 10^{-15}$ erg ou em inverso de centímetros $\kappa_1(4.2\text{K}) = 6.78 \text{ cm}^{-1}$. Para terminar, apontamos que o objetivo principal das estimações de $\kappa_1(T)$, é determinar o campo critico de transição de fase de spin-flop a uma fase desordenada usando a renormalização da energia dos mágnons no FeF_2 .

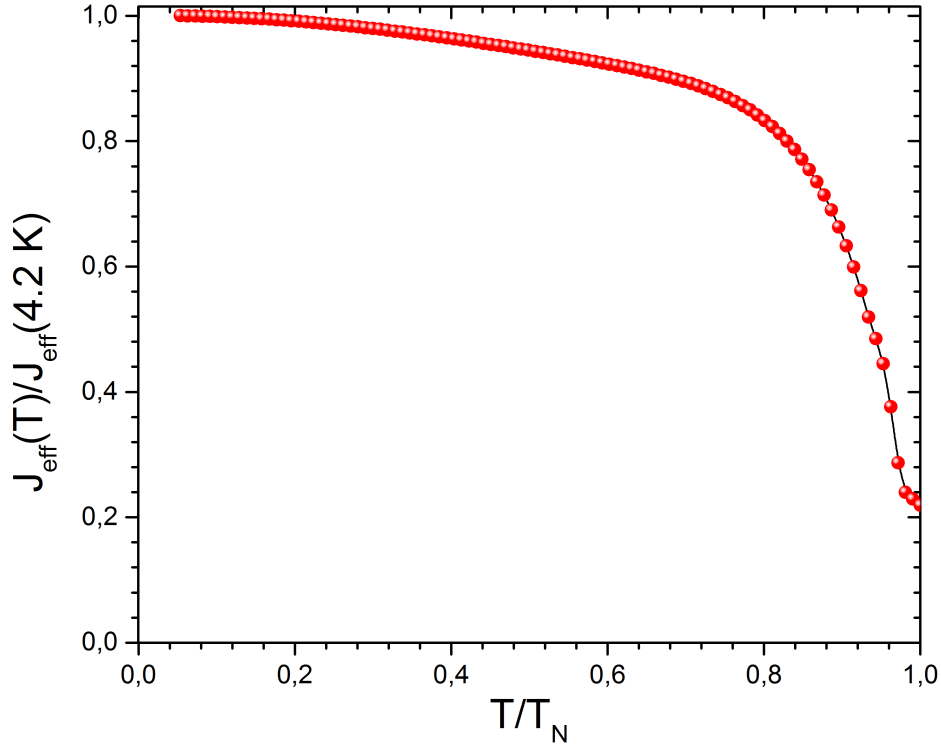


Figura 3.8: Variação da constante de exchange efetiva reduzida $J_{\text{eff}}(T)/J_{\text{eff}}(T_0)$, como uma função da temperatura, para temperaturas $T < T_N$.

3.2 Aplicação da aproximação RPA para renormalizar a energia de mágnons num sistema antiferromagnético de duas sub-redes com anisotropia uniaxial

A seguir, estaremos construindo o Hamiltoniano até ordem quarta com a teoria desenvolvida no capítulo 1. Basicamente, nosso sistema é um antiferromagneto simples de duas sub-redes de spins, ilustrado pela figura 1.11. Para isso, estaremos supondo que a interação de acoplamento mais forte que existe entre as duas sub-redes é a de exchange. Também, não sobra dizer que a condição de ordenamento antiparalelo dos spins das sub-redes é satisfeita só na ausência de campo magnético externo aplicado, um argumento que a primeira vista resulta obvio devido à geometria do sistema. Adicionalmente, há presente no antiferromagneto uma anisotropia uniaxial paralela ao

eixo de simetria z . Além disso, colocamos o sistema num campo magnético aplicado também paralelo à direção z e cuja magnitude é pequena comparada com o campo de transição de spin-flop. Assim quando juntamos todos os argumentos expostos até aqui, podemos garantir que um bom Hamiltoniano para descrever as propriedades de nosso sistema é igual a soma das expressões (1.65), (1.66) e (1.67).

Aproveitaremos as diferentes transformações de operadores que fizemos no primeiro capítulo, para isso precisamos voltar até o conjunto de equações (1.68). De acordo com os argumentos estabelecidos nesse capítulo as equações (1.68) podem ser aproximadas pelas expressões da tabela 1.2. Então ao substituir as equações que acabamos de mencionar nas expressões dos Hamiltonianos individuais: Zeeman, exchange e anisotropia uniaxial, conseguimos escrever o Hamiltoniano total como a soma $\mathcal{H} = \sum_n \mathcal{H}^{(n)}$, onde n é um numero par que toma os valores $n = 0, 2, 4, 6$. Os Hamiltonianos $\mathcal{H}^{(0)}$ e $\mathcal{H}^{(2)}$ foram dados no capítulo 1 na seção 1.4. O Hamiltoniano de nosso interesse agora é $\mathcal{H}^{(4)}$. Para obte-lo, separamos os termos de quarta ordem que depois simplificamos para assim chegar a que essa contribuição fica dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(4)} = & -\frac{1}{2} \sum'_{ij} J_{ij} (a_i b_j^\dagger b_j b_j + a_i^\dagger a_i a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger b_j^\dagger b_j + a_i^\dagger a_i^\dagger a_i b_j^\dagger + 4a_i^\dagger a_i b_j^\dagger b_j) \\ & - D \sum_i (a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i + b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i) \end{aligned} \quad (3.40)$$

A contribuição de ordem seis é desconsiderada porque ela contribui muito pouco para a renormalização da energia do antiferromagneto em temperatura não muito próximas de T_N . No propósito de determinar os modos multi-mágnons que são relaxados, o passo seguinte na tarefa consistiu em passar de operadores de desvios de spins a operadores de desvios coletivos, quer dizer, dos (a_i, b_i) para os $(a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}})$. Como no caso da contribuição de segunda ordem, as somas em j foram levadas aos primeiros vizinhos, especificamente aos de segunda classe que são aqueles onde o valor da integral de exchange numa célula unitária tem o maior valor, isto será mais evidente na seção 3.2 quando determinemos a constante de anisotropia de primeira ordem no FeF_2 . Assim o número de primeiros vizinhos considerados são denotados por z_2 . Com relação as

somas em i , estas são estendidas por todo o cristal. Como é normal, o procedimento seguinte é fazer a mudança de operadores de desvio de spins para operadores coletivos para cada uma das sub-redes, por meio das transformadas de Fourier de a_i e b_i , expressas pelas relações (1.70).

Em adição ao anterior, definimos as duas quantidades $Z_{JN} = (z_2 J/2N)$ e $Z_{DN} = (D/N)$, para simplificar o Hamiltoniano de quarta ordem em termos de operadores coletivos. Assim, chegamos à expressão dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(4)} = - \sum_{\mathbf{k}_1: \mathbf{k}_4} [& Z_{JN} (\gamma_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} + \gamma_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} + \gamma_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_3}^\dagger a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4} \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_3}^\dagger b_{\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\mathbf{k}_4} + 4\gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_3}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\mathbf{k}_4}) + Z_{DN} (a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \\ & + b_{\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4})] \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \end{aligned} \quad (3.41)$$

Na equação (3.41), os coeficientes γ_k continuam sendo definidos como no capítulo 1. Também, temos que $\mathbf{k}_1 : \mathbf{k}_4$ é uma abreviação de $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$. Uma vez encontrada a expressão para $\mathcal{H}^{(4)}$ em termos dos operadores $a_{\mathbf{k}}$ e $b_{\mathbf{k}}$, é preciso passar aos novos operadores de mágnons $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\beta_{\mathbf{k}}$ definidos pelas equações de transformação (1.73). Como é visto ali, o uso das transformações **Bogoliubov**, converte o Hamiltoniano dado em (3.41) numa nova expressão que contem um número muito grande de termos. Exatamente ha um total de 112 elementos, e esta é a razão principal de porque usar uma aproximação do tipo RPA, em lugar do formalismo desenvolvido para as funções de Green do capítulo 2, obviamente que a nova aproximação diminui a complexidade, isso sem perder a física que ha por trás no problema. Mas isso vai acompanhado de um fato com muita importância que é o principio de conservação do momento, ou seja $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$. Graças a este principio muitas expressões foram simplificadas, pois são levados em conta so aqueles termos do Hamiltoniano que conservam o momento e que são os de maior contribuição a energia renormalizada. Então, de acordo o anterior o passo que seguiu a todas as transformações consistiu em reajustar a expressão do Hamiltoniano $\mathcal{H}^{(4)}$ como uma soma de dois sub-Hamiltonianos, um onde estão os que conservam o momento e outro onde estão os restantes que não conservam o momento.

Esto significa que $\mathcal{H}^{(4)} = \mathcal{H}_{prin}^{(4)} + \mathcal{H}_{sec}^{(4)}$. A parte $\mathcal{H}_{prin}^{(4)}$ é chamado como parte principal do Hamiltoniano por conter fatores do tipo $\alpha_k^\dagger \alpha_l^\dagger \alpha_m \alpha_n$, $\alpha_k^\dagger \alpha_m \beta_l^\dagger \beta_n$ e $\beta_k^\dagger \beta_l^\dagger \beta_m \beta_n$ somente devido a que são estes termos os que garantem a conservação do momento. Como é bem sabido, o proposito de reajustar a $\mathcal{H}^{(4)}$ é aplicar à aproximação RPA, de tal forma que seja possível calcular os valores médios $\langle \alpha_k^\dagger \alpha_l^\dagger \alpha_m \alpha_n \rangle$, $\langle \alpha_k^\dagger \alpha_m \beta_l^\dagger \beta_n \rangle$ e $\langle \beta_k^\dagger \beta_l^\dagger \beta_m \beta_n \rangle$ que seriam as funções de correlação de quarta ordem do capítulo 2, calculados com (2.2). Por tanto a expressão que define a $\mathcal{H}_{prin}^{(4)}$ é dada por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{prin}^{(4)} = \sum_{\mathbf{k}_1: \mathbf{k}_4} & \left[Z_{JN} \gamma_{\mathbf{k}_1} (u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + \right. \\
& u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + \\
& u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + \\
& u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4} + \\
& u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger) + Z_{JN} \gamma_{\mathbf{k}_3} (u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger * \\
& \beta_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_3} * \\
& \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_2} * \\
& \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} * \\
& v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4}) - 4 Z_{JN} \gamma_{\mathbf{k}_{42}} (u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + \\
& u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + \\
& u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} + \\
& u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_2} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \\
& u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} + v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger) - Z_{DN} (u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger * \\
& \alpha_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1} * \\
& \alpha_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4}^\dagger + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} u_{\mathbf{k}_4} * \\
& \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_4} + u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_1} * \\
& v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1} \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_4} \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_3} \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger + v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \alpha_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_3}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_4}^\dagger) \left. \right]
\end{aligned}
\tag{3.42}$$

O coeficiente $\gamma_{\mathbf{k}_{42}}$ que aparece na equação (3.42) é definido como $\gamma_{\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2}$. Embora já te-

mos os produtos de operadores que precisamos no Hamiltoniano de maior contribuição à energia renormalizada, ainda é preciso fazer uma reorganização adicional na ordem dos operadores em ditos produtos, tal que fiquem nas seguintes formas $\alpha_k^\dagger \alpha_l^\dagger \alpha_m \alpha_n$, $\alpha_k^\dagger \alpha_l \beta_m^\dagger \beta_n$ e $\beta_k^\dagger \beta_l^\dagger \beta_m \beta_n$ respectivamente. Para conseguir isso se usam as regras de comutação entre bósons. Uma vez que isso é feito, o Hamiltoniano que chamamos de principal é decomposto como $\mathcal{H}_{prin}^{(4)} = \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(4)} + \mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(4)} + \mathcal{H}_{\beta\beta}^{(4)} + \mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(2)} + \mathcal{H}_{\beta\beta}^{(2)} + \mathcal{H}_{00}$. Nessas computações é preciso definir algumas quantidades adicionais resultado das simplificações, por exemplo entre as úteis temos:

$$\Lambda_1 := \sum_{\mathbf{p}} \gamma_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \quad \Lambda_2 := \sum_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}^2 \quad \Lambda_4(\mathbf{q}) := \sum_{\mathbf{p}} \gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \quad (3.43)$$

As expressões dadas em (3.43) são usadas para escrever as contribuições $\mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(2)}$ e $\mathcal{H}_{\beta\beta}^{(2)}$ que aparecem na reordenação de termos de $\mathcal{H}_{prin}^{(4)}$. Para facilitar as computações simbólicas e numéricas é preciso fazer algumas mudanças nos sub-índices em todas as quantidades, obedecendo a conservação do momento. Assim a delta de Krocneker passa a ser $\Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) = \Delta(\mathbf{m} - \mathbf{n} + \mathbf{p} - \mathbf{q}) = \Delta_{\mathbf{m}\mathbf{p}}^{n\mathbf{q}}$. Então, juntando todas as considerações anteriores, chegamos a que as diferentes contribuições em $\mathcal{H}_{prin}^{(4)}$ estão dadas por.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(4)} &= \sum_{\substack{\mathbf{m}\mathbf{n} \\ \mathbf{p}\mathbf{q}}} \mathcal{C}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{m}}^\dagger \alpha_{\mathbf{n}} \beta_{\mathbf{p}}^\dagger \beta_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{m}\mathbf{p}}^{n\mathbf{q}} \quad \text{onde o coeficiente } \mathcal{C}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} \text{ está dado por:} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} &= 2Z_{JN} (\gamma_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{m}} + \gamma_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}} + \gamma_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{p}} + \gamma_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}} \\ &\quad + \gamma_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{n}} + \gamma_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{q}} \\ &\quad - 2\gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{q}} - 2\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{n}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{n}} - 2\gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{m}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{m}} \\ &\quad - 2\gamma_{\mathbf{n}-\mathbf{m}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{m}}) - 4Z_{DN} (u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} + u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}}) \end{aligned} \quad (3.44)$$

A contribuição que descreve a interação do modo $\alpha - \alpha$ está dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(4)} &= \sum_{\substack{\mathbf{m}\mathbf{n} \\ \mathbf{p}\mathbf{q}}} \mathcal{A}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{\mathbf{m}}^\dagger \alpha_{\mathbf{n}} \alpha_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{m}\mathbf{p}}^{n\mathbf{q}} \quad \text{onde o coeficiente } \mathcal{A}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} \text{ está dado por:} \\ \mathcal{A}_{\mathbf{m}\mathbf{n}}^{p\mathbf{q}} &= Z_{JN} (\gamma_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{m}} + \gamma_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{n}} + \gamma_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}} \\ &\quad - 4\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}}) - Z_{DN} (u_{\mathbf{m}} u_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{n}} v_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (3.45)$$

Assim como é encontrada a contribuição para o modo descrito pela expressão (3.45), não resulta difícil ver que a contribuição para descrever a interação do modo $\beta - \beta$ vem dada por uma expressão muito semelhante que se observa com detalhe, fazendo uma troca nos coeficientes u e v que acompanham aos operadores mantendo fixos os índices. Além disso, os coeficientes u e v seguem sendo definidos pelas mesmas expressões (1.75). Assim em resumo, o Hamiltoniano de interação entre os modos β fica

$$\mathcal{H}_{\beta\beta}^{(4)} = \sum_{\substack{mn \\ pq}} \mathcal{B}_{mn}^{pq} \beta_p^\dagger \beta_m^\dagger \beta_n \beta_q \Delta_{mp}^{nq} \quad \text{onde o coeficiente } \mathcal{B}_{mn}^{pq} \text{ está dado por:} \quad (3.46)$$

$$\mathcal{B}_{mn}^{pq} = Z_{JN} (\gamma_m u_n u_p u_q v_m + \gamma_n u_n v_m v_p v_q + \gamma_m u_m v_n v_p v_q + \gamma_n u_m u_p u_q v_n \\ - 4\gamma_{p-q} u_p u_q v_m v_n) - Z_{DN} (u_m u_n u_p u_q + v_m v_n v_p v_q)$$

Por outro lado, para terminar com a construção do Hamiltoniano principal, as contribuições residuais da ordem quadrática são dadas por:

$$\mathcal{H}_\alpha^{(2)} = \sum_q [u_q v_q A_q + (u_q^2 + v_q^2) B_q] \alpha_q^\dagger \alpha_q, \quad \mathcal{H}_\beta^{(2)} = \sum_q [u_q v_q A_q + (u_q^2 + v_q^2) B_q] \beta_q^\dagger \beta_q \quad (3.47)$$

Onde os coeficientes A_q e B_q são dados pelas seguintes expressões

$$A_q := 8Z_{JN} (\Lambda_2 \gamma_q - \Lambda_4(q)), \quad B_q := 4Z_{JN} (\Lambda_1 - \Lambda_2) - 4Z_{DN} \Lambda_2 \quad (3.48)$$

3.2.1 Renormalização da energia de mágnons no antiferromagneto de duas sub-redes

O Hamiltoniano do sistema é aproximado pela expressão:

$$\mathcal{H} \approx \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(2)} + \mathcal{H}^{(4)} \quad (3.49)$$

Agora vamos designar os números médios de ocupação para os mágnons por $\bar{n}_{X_k}$ e definidos de acordo com a expressão $\bar{n}_{X_k} = (e^{E_{X_k}/K_B T} - 1)^{-1}$, onde denotamos por brevidade $X = \{\alpha, \beta\}$. Usando a aproximação RPA, conseguimos decompor os produtos

de quatro operadores de mágnons como:

$$\begin{aligned}
\alpha_p^\dagger \alpha_m^\dagger \alpha_n \alpha_q &\longrightarrow \alpha_p^\dagger \langle \alpha_m^\dagger \alpha_n \rangle \alpha_q \delta_{pq} \delta_{mn} + \alpha_p^\dagger \langle \alpha_m^\dagger \alpha_q \rangle \alpha_n \delta_{pn} \delta_{mq} + \\
&\quad \alpha_m^\dagger \langle \alpha_p^\dagger \alpha_n \rangle \alpha_q \delta_{mq} \delta_{pn} + \alpha_m^\dagger \langle \alpha_p^\dagger \alpha_q \rangle \alpha_n \delta_{mn} \delta_{pq} \\
\alpha_m^\dagger \alpha_n \beta_p^\dagger \beta_q &\longrightarrow \langle \alpha_m^\dagger \alpha_n \rangle \beta_p^\dagger \beta_q \delta_{pq} \delta_{mn} + \alpha_m^\dagger \alpha_n \langle \beta_p^\dagger \beta_q \rangle \delta_{pq} \delta_{mn}
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Como veremos, o uso das aproximações dadas pelas equações (3.50), convertem os Hamiltonianos de quarta ordem na forma de “segunda ordem”. Assim, a expressão para $\mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(4)}$ fica da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\alpha\alpha}^{(4)} &\rightarrow \sum_m \mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)} \alpha_m^\dagger \alpha_m \quad \text{onde o coeficiente } \mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)} \text{ é dado por:} \\
\mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)} &= \sum_p (\mathcal{A}_{pp}^{mm} + \mathcal{A}_{pm}^{mp} + \mathcal{A}_{mp}^{pm} + \mathcal{A}_{mm}^{pp}) \bar{n}_{\alpha_p}
\end{aligned} \tag{3.51}$$

De forma semelhante achamos uma expressão para os produtos de operadores β 's, de forma que $\mathcal{H}_{\beta\beta}^{(4)}$ ficará dado por.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\beta\beta}^{(4)} &\approx \sum_m \mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)} \beta_m^\dagger \beta_m \quad \text{onde o coeficiente } \mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)} \text{ é dado por:} \\
\mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)} &= \sum_p (\mathcal{B}_{pp}^{mm} + \mathcal{B}_{pm}^{mp} + \mathcal{B}_{mp}^{pm} + \mathcal{B}_{mm}^{pp}) \bar{n}_{\beta_p}
\end{aligned} \tag{3.52}$$

Finalmente para o caso de $\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(4)}$ depois de ter usado as aproximações (3.50) achamos simplesmente que ele é aproximado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(4)} &\approx \sum_m \mathcal{S}_{\alpha\beta}^{(m)} \alpha_m^\dagger \alpha_m + \sum_m \bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(m)} \beta_m^\dagger \beta_m \quad \text{onde temos que:} \\
\bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(m)} &= \sum_p \mathcal{C}_{pp}^{mm} \bar{n}_{\alpha_p} \quad \mathcal{S}_{\alpha\beta}^{(m)} = \sum_p \mathcal{C}_{mm}^{pp} \bar{n}_{\beta_p}
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Agora precisamos determinar duas coisas, uma delas são os coeficientes das expansões anteriores dadas em (3.51), (3.52) e (3.53). A segunda é a expressão completa do Hamiltoniano que contribui para a renormalização da energia total. Para conseguir o segundo precisamos definir $\mathcal{U}_\beta^{(m)} = \mathcal{U}_\alpha^{(m)} = \gamma_m u_m v_m A_m + (u_m^2 + v_m^2) B_m$. Então usando

todo estes argumentos, chegamos que a expressão para $\mathcal{H}$ fica muito bem aproximada por meio de:

$$\mathcal{H} := \sum_m (\mathcal{E}_\alpha^{(m)} \alpha_m^\dagger \alpha_m + \mathcal{E}_\beta^{(m)} \beta_m^\dagger \beta_m) \quad (3.54)$$

Na equação (3.54), $\mathcal{E}_\alpha^{(m)}$ e $\mathcal{E}_\beta^{(m)}$ representam as energias medias normalizadas para os dois modos de mágnons dados por.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\alpha^{(m)} &= \hbar\omega_{\alpha m} + \mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)} + \mathcal{S}_{\alpha\beta}^{(m)} + \mathcal{U}_\alpha^{(m)} \\ \mathcal{E}_\beta^{(m)} &= \hbar\omega_{\beta m} + \mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)} + \bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(m)} + \mathcal{U}_\beta^{(m)} \end{aligned} \quad (3.55)$$

Agora, usaremos as expressões antes definidas para os coeficientes $\mathcal{A}_{mn}^{pq}$, $\mathcal{B}_{mn}^{pq}$ e $\mathcal{C}_{mn}^{pq}$ achados nas equações (3.44), (3.45) e (3.46) para encontrar aos $\mathcal{S}_{\beta\beta}$, $\mathcal{S}_{\alpha\alpha}$, $\mathcal{S}_{\alpha\beta}$. Além disso, usamos o argumento que $\mathcal{A}_{pp}^{mm} = \mathcal{A}_{mn}^{pq} \rightarrow \mathcal{A}_{m \rightarrow p, n \rightarrow p}^{p \rightarrow m, q \rightarrow m}$ que é aplicado para os coeficientes restantes. Assim, levando em conta que $\mathcal{A}_{pm}^{mp} \equiv \mathcal{A}_{mp}^{pm}$, conseguimos para os $\mathcal{A}$'s os resultados seguintes:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{pp}^{mm} &= 2Z_{JN}(\gamma_p u_p v_p (u_m^2 + v_m^2) - 2u_p^2 v_m^2) - Z_{DN}(u_p^2 u_m^2 + v_p^2 v_m^2) \\ \mathcal{A}_{pm}^{mp} &= Z_{JN}(\gamma_m u_m v_m (u_p^2 + v_p^2) + \gamma_p u_p v_p (u_m^2 + v_m^2) - 4\gamma_{p-m} u_m v_m u_p v_p) \\ &\quad - Z_{DN}(u_p^2 u_m^2 + v_p^2 v_m^2) \end{aligned} \quad (3.56)$$

Agora somaremos os $\mathcal{A}$'s, para ter que: $\mathcal{A}_{mm}^{pp} + \mathcal{A}_{mp}^{pm} + \mathcal{A}_{pm}^{mp} + \mathcal{A}_{pp}^{mm} = \mathcal{A}_{mm}^{pp} + \mathcal{A}_{pp}^{mm} + 2\mathcal{A}_{mp}^{pm}$ e a expressão final fica como:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{mm}^{pp} + \mathcal{A}_{pp}^{mm} + 2\mathcal{A}_{mp}^{pm} &= 4Z_{JN}(\gamma_m u_m v_m (u_p^2 + v_p^2) + \gamma_p u_p v_p (u_m^2 + v_m^2)) \\ &\quad - 8Z_{JN}\gamma_{p-m} u_m v_m u_p v_p - 4(Z_{JN}u_m^2 + Z_{DN}v_m^2)v_p^2 - 4(Z_{JN}v_m^2 + Z_{DN}u_m^2)u_p^2 \end{aligned} \quad (3.57)$$

Em relação aos coeficientes $\mathcal{B}$'s e $\mathcal{C}$'s, é possível mostrar que: $(\mathcal{A}_{mm}^{pp} + \mathcal{A}_{pp}^{mm} + 2\mathcal{A}_{mp}^{pm}) = (\mathcal{B}_{mm}^{pp} + \mathcal{B}_{pp}^{mm} + 2\mathcal{B}_{mp}^{pm}) = \mathcal{C}_{mm}^{pp} = \mathcal{C}_{pp}^{mm}$. Para chegar ao resultado final, vamos tomar as seguintes definições adicionais, de tal forma que as energias medias $\mathcal{E}_\alpha^{(m)}$ e $\mathcal{E}_\beta^{(m)}$ fiquem expressadas em uma forma mais compacta. De acordo com isto, é preciso introduzir as quantidades $\mathcal{X}_m^{(i)}$ e $\mathcal{Y}_i^{(X)}$, tais que os coeficientes $\mathcal{S}$'s que aparecem nas equações (3.51), (3.52) e (3.53), que ao mesmo tempo são funções de $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ e $\mathcal{C}$, fiquem em forma

simplificada. Assim, temos para $\mathcal{X}_m^{(i)}$ que:

$$\begin{aligned}\mathcal{X}_m^{(1)} &= 4Z_{JN}\gamma_m u_m v_m & \mathcal{X}_m^{(2)} &= 4Z_{JN}(u_m^2 + v_m^2) \\ \mathcal{X}_m^{(3)} &= (2/\gamma_m)\mathcal{X}_m^{(1)} & \mathcal{X}_m^{(4)} &= 4(Z_{JN}u_m^2 + Z_{DN}v_m^2) \\ \mathcal{X}_m^{(5)} &= 4(Z_{DN}u_m^2 + Z_{JN}v_m^2)\end{aligned}\quad (3.58)$$

O outro conjunto de relações é dado pelas expressões:

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_1^{(X)} &= \sum_p (u_p^2 + v_p^2) \bar{n}_{Xp} & \mathcal{Y}_2^{(X)} &= \sum_p \gamma_p u_p v_p \bar{n}_{Xp} \\ \mathcal{Y}_3^{(X)} &= \sum_p \gamma_{p-m} u_p v_p \bar{n}_{Xp} & \mathcal{Y}_4^{(X)} &= \sum_p v_p^2 \bar{n}_{Xp} \\ \mathcal{Y}_5^{(X)} &= \sum_p u_p^2 \bar{n}_{Xp}\end{aligned}\quad (3.59)$$

Com esta notação temos que os coeficientes $\mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)}$, $\mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)}$, $\mathcal{S}_{\alpha\beta}^{(m)}$ e $\bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(m)}$ são bastantes simplificados. Assim, com $X = \{\alpha, \beta\}$ finalmente chegamos a:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{\alpha\alpha}^{(m)} &= \mathcal{Y}_1^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(1)} + \mathcal{Y}_2^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(2)} - \mathcal{Y}_3^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(3)} - \mathcal{Y}_4^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(4)} - \mathcal{Y}_5^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(5)} \\ \mathcal{S}_{\beta\beta}^{(m)} &= \mathcal{Y}_1^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(1)} + \mathcal{Y}_2^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(2)} - \mathcal{Y}_3^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(3)} - \mathcal{Y}_4^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(4)} - \mathcal{Y}_5^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(5)} \\ \mathcal{S}_{\alpha\beta}^{(m)} &= \mathcal{Y}_1^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(1)} + \mathcal{Y}_2^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(2)} - \mathcal{Y}_3^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(3)} - \mathcal{Y}_5^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(4)} - \mathcal{Y}_4^{(\beta)} \mathcal{X}_m^{(5)} \\ \bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(m)} &= \mathcal{Y}_1^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(1)} + \mathcal{Y}_2^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(2)} - \mathcal{Y}_3^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(3)} - \mathcal{Y}_5^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(4)} - \mathcal{Y}_4^{(\alpha)} \mathcal{X}_m^{(5)}\end{aligned}\quad (3.60)$$

Usaremos o conjunto de equações dado em (3.60) para calcular as energias renormalizadas dos mágnons no antiferromagneto FeF₂ como será visto a seguir.

3.2.2 Procedimentos para avaliação numérica da energia renormalizada de mágnons em FeF₂.

Finalizaremos o presente capítulo com esta seção, e usaremos os procedimentos desenvolvidos na seção 1.5 para calcular as energias renormalizadas dos mágnons no antiferromagneto FeF₂. Para isso, será necessário tomar algumas considerações preliminares. O primeiro a fazer, consiste em limitar a magnitude do vetor de onda $\mathbf{k}$ até um

valor máximo alcançado no interior da primeira zona de Brillouin que vamos denotar por $k_0 = |\mathbf{k}|$. Então, aproveitando a forma encontrada para as componentes k_x , k_y e k_z do vetor de onda $\mathbf{k}$ na seção 1.5.2, obtemos que a magnitude de $\mathbf{k}$ pode ser escrita como $k = (\lambda_0\pi/c)\zeta(h\boldsymbol{\lambda})t$, onde é tomado $h = (c/a)$ sendo c e a os parâmetros da rede cristalina e $\boldsymbol{\lambda}$ é uma abreviação de $\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}$. Também, de acordo ao feito na seção 1.5.2, observamos que os valores permitidos de t são tais que $t \in [0, 1]$, assim vemos que o máximo valor alcançado por k é justamente quando $t = 1$, isto significa que k_0 fica definido por $k_0 = (\lambda_0\pi/c)\zeta(h\boldsymbol{\lambda})$, ou seja que podemos escrever a k como $k = k_0t$. Adicionalmente, a expressão que define a quantidade $\zeta(h\boldsymbol{\lambda})$ é dada pela equação:

$$\zeta(h\boldsymbol{\lambda}) = \left[1 + \left(\frac{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}{\lambda_0^2} \right) h^2 \right]^{1/2} \quad (3.61)$$

Outro passo importante para calcular a renormalização da energia dos mágnons é transformar todas as somas que estão no índice de soma $\mathbf{p}$, das expressões (3.59), como relações que tenham uma forma integral. Adicionalmente, essas integrais serão estendidas até o limite superior permitido para $\mathbf{k}$ da primeira zona de Brillouin. Então ao realizar as transformações de somas para integrais, resulta útil mudar da variável k para t , isto significa que todos nossos integrandos serão funções de t em lugar de k . Portanto, como já é costume, todas as somas do tipo $N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}$ são transformadas como em (2.33).

Por outra parte, para fazer todas as conversões a integrais, estaremos tomando simetria azimutal, o qual resulta evidente devido a que as relações de dispersão que usamos não dependem explicitamente da variável angular φ , assim ao fazer a integração nesta variável aparece um fator de 2π em todas as expressões integrais. Além disso, a integração na variável angular polar θ é feita tomando a mudança $w = \cos \theta$, com isto vemos que $|w| \leq 1$. Também, para a integração em $\mathbf{k}$ usamos o fato que sua magnitude é $k = k_0t$, com isto obtemos que $k^2 dk = k_0^3 t^2 dt$. Adicional ao anterior, levamos em conta que todas as somas são estendidas por todo o cristal. Neste caso, Ω corresponderá ao volume de N -células unitárias cada uma de volume a^3 . Também, se usamos

a forma que define à quantidade k_0 , encontramos de maneira muito geral que a forma que terão as somas de uma função quaisquer $f_{\mathbf{k}}$ no índice $\mathbf{k}$ em nossas computações é:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\pi}{4} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\boldsymbol{\lambda}) \int_{-1}^1 dw \int_0^1 dt t^2 f(k_0 t, w) \quad (3.62)$$

Iniciamos aplicando a transformação dada em (3.62) as equações que definem Λ_1 , Λ_2 e $\Lambda_4(\mathbf{k})$. Como pode ser visto de suas definições dadas em (3.43), tanto Λ_1 como Λ_2 , não dependem explicitamente de $\mathbf{k}$. Assim a mudança para t , destes coeficientes é imediata, e no caso de Λ_4 precisamos expressar a $\gamma_{\mathbf{k}}$ em termos de t , mas lembre-se que sua expressão como função de t foi obtida no capítulo 1. Assim para Λ_1 e Λ_2 encontramos que:

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\boldsymbol{\lambda}) \int_0^1 dt t^2 \gamma_t u_t v_t \\ \Lambda_2 &= \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\boldsymbol{\lambda}) \int_0^1 dt t^2 v_t^2 \end{aligned} \quad (3.63)$$

Para transformar $\Lambda_4(\mathbf{k})$ primeiro precisamos fazê-lo com $\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$, mas podemos observar agora que há uma dependência em $\mathbf{k}$, de forma que o tratamento é um pouco diferente. Lembremos primeiro que a diferença dos vetores de onda não é igual à que temos no capítulo 2, pois a geometria da estrutura cristalina muda, não entanto, existe em comum a presença da função $W(s, t, w)$. Portanto, de acordo com nossa mudança de variável, teremos que $k = k_0 t$ e $q = k_0 s$ onde $0 \leq s, t \leq 1$, assim chegamos até $|\mathbf{k} - \mathbf{q}| = k_0 W(s, t, w)$, onde temos considerado que $w = \cos \theta$. Juntando todos os argumentos anteriores encontramos que $\Lambda_4(\mathbf{k})$ se transforma como:

$$\Lambda_4(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \longrightarrow \Lambda_4(t) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\boldsymbol{\lambda}) \int_{-1}^1 dw \int_0^1 ds s^2 \gamma_{st} u_s v_s \quad (3.64)$$

Um dos últimos passos para terminar de preparar os cálculos que vai nos permitir as avaliações numéricas, consiste em transformar as quantidades $\mathcal{Y}_m^{(X)}$, esclarecendo que

só $\mathcal{Y}_3^{(X)}$ depende explicitamente de $\mathbf{k}$. Portanto, teremos que:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_1^{(X)} &= \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}^2 + v_{\mathbf{q}}^2) \bar{n}_{X_{\mathbf{q}}} \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\lambda) \int_0^1 t^2 (u_t^2 + v_t^2) \bar{n}_{X_t} dt \\
\mathcal{Y}_2^{(X)} &= \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \bar{n}_{X_{\mathbf{q}}} \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\lambda) \int_0^1 t^2 \gamma_t u_t v_t \bar{n}_{X_t} dt \\
\mathcal{Y}_3^{(X)}(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \bar{n}_{X_{\mathbf{q}}} \longrightarrow \frac{\pi}{4} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\lambda) \int_{-1}^1 dw \int_0^1 s^2 \gamma_{st} u_s v_s \bar{n}_{X_s} ds \quad (3.65) \\
\mathcal{Y}_4^{(X)} &= \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}^2 \bar{n}_{X_{\mathbf{q}}} \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\lambda) \int_0^1 t^2 v_t^2 \bar{n}_{X_t} dt \\
\mathcal{Y}_5^{(X)} &= \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^2 \bar{n}_{X_{\mathbf{q}}} \longrightarrow \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3}{h^2} \right) \zeta^3(h\lambda) \int_0^1 t^2 u_t^2 \bar{n}_{X_t} dt
\end{aligned}$$

Vamos usar os resultados dados nos conjuntos de equações (3.57)-(3.65), e os resultados obtidos anteriores a estes para determinar o valor de campo crítico H_c de spin-flop como uma função da temperatura. Para isto, examinaremos o modo β -mágnon quando $k = 0$. Neste caso, a energia renormalizada derivada na equação (3.55) é reduzida até $\mathcal{E}_{\beta}^{(0)} = \hbar\omega_{\beta_0} + \mathcal{S}_{\beta\beta}^{(0)} + \bar{\mathcal{S}}_{\alpha\beta}^{(0)} + \mathcal{U}_{\beta}^{(0)}$, como foi visto na seção 3.1 a anisotropia depende da temperatura e esta sofre uma queda muito pronunciada perto de T_N , então ao incluir a anisotropia magneto cristalina em $\mathcal{E}_{\beta}^{(0)}$ seu efeito serão apreciável.

Para determinar a expressão explícita de $\mathcal{E}_{\beta}^{(0)}$, lembre-se que se $k = 0$ então $t = 0$, neste caso pela definição de $\gamma_{\mathbf{k}}$, encontramos que $\gamma_0 = 1$. Assim as equações (3.58) são escritas como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{X}_0^{(1)} &= 4Z_{JN}u_0v_0 & \mathcal{X}_0^{(2)} &= 4Z_{JN}(u_0^2 + v_0^2) \\
\mathcal{X}_0^{(3)} &= 8Z_{JN}u_0v_0 & \mathcal{X}_0^{(4)} &= 4(Z_{JN}u_0^2 + Z_{DN}v_0^2) \\
\mathcal{X}_0^{(5)} &= 4(Z_{DN}u_0^2 + Z_{JN}v_0^2)
\end{aligned} \quad (3.66)$$

Para obter as expressões explícitas de u_0 e v_0 que aparecem em (3.66) usamos as definições dadas de $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ em 1.75. Além disso, precisamos de f_{AE} e $f_{\mathbf{k}}$, mas como estas quantidades estão definidas em termos de H_C , H_E e H_A cujos valores são muito grandes,

simplicaremos as expressões introduzindo mudanças de variáveis adicionais para os campos, deste modo tomamos $h_0 = (H_0/H_0^{(M)})$, $h_c = (H_C/H_0^{(M)})$, $h_e = (H_E/H_0^{(M)})$ e $h_a = (H_A/H_0^{(M)})$ que são quantidades sem dimensão e $H_0^{(M)}$ corresponde ao valor de campo magnético externo fixo que se considera aplicado ao sistema, em consequência obtemos $f_{AE} = \gamma_{FeF_2} H_0^{(M)} (h_a + h_e) = \gamma_{FeF_2} H_0^{(M)} h_{ae}$, sendo γ_{FeF_2} o fator giromagnético do FeF_2 e $h_{ae} = h_a + h_e$, da mesma forma encontramos para $k \neq 0$ que $f_k \rightarrow f_t = \gamma_{FeF_2} H_0^{(M)} (h_c^2 + h_e^2(1 - \gamma_t^2))^{1/2}$, mas se $t = 0$ encontramos que $f_0 = \gamma_{FeF_2} H_0^{(M)} h_c$, daqui encontramos as expressões para u_0 e v_0 , as quais são:

$$u_0 = \left(\frac{h_{ae} + h_c}{2h_c} \right)^{1/2} \quad v_0 = \left(\frac{h_{ae} - h_c}{2h_c} \right)^{1/2} \quad (3.67)$$

Se usamos os argumentos anteriores respeito das mudanças para os campos, vemos que a frequência própria do modo β fica expressa como $\omega_{\beta 0} = \gamma_{FeF_2} H_0^{(M)} (h_c - h_0)$. Se consideramos o caso quando $k \neq 0$ que equivale tomar $t \neq 0$, os coeficientes u_t e v_t são transformados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} u_t &= \left(\frac{h_{ae}/2}{\sqrt{h_c^2 + h_e^2(1 - |\gamma_t|^2)}} + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \\ |v_t| &= \left(\frac{h_{ae}/2}{\sqrt{h_c^2 + h_e^2(1 - |\gamma_t|^2)}} - \frac{1}{2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.68)$$

Por outra parte precisamos determinar os fatores de Bose-Einstein, mas suas expressões são dadas usando a mudança de variável $k \rightarrow t$. Estes, são denotados por $\bar{n}_{\alpha t}$ e $\bar{n}_{\beta t}$ respectivamente. Portanto, necessitamos calcular o quociente $(\hbar\omega_{Xk}/K_B T)$, onde $X = \alpha, \beta$ e tomaremos como já é costume a temperatura absoluta em termos de T_N , é dizer, $T = \tau T_N$, usando a forma de f_t nos modos próprios de frequências obtemos:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\alpha t} &= \left(\exp \left(\frac{\delta_a}{\tau} \sqrt{h_c^2 + h_e^2(1 - |\gamma_t|^2)} + \frac{\delta_a h_0}{\tau} \right) - 1 \right)^{-1} \\ \bar{n}_{\beta t} &= \left(\exp \left(\frac{\delta_a}{\tau} \sqrt{h_c^2 + h_e^2(1 - |\gamma_t|^2)} - \frac{\delta_a h_0}{\tau} \right) - 1 \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Aqui o símbolo δ_a é usado para representar a quantidade $\delta_a = (\hbar\gamma_{FeF_2} H_0^{(M)})/K_B T_N$.

Outro elemento importante e derivado das considerações da seção passada, é assumir que o parâmetro de exchange efetivo J_{eff} como a contribuição da anisotropia magneto cristalina κ_1 dependentes da temperatura, podem ser substituídas nas expressões que definem as quantidades Z_{JN} e Z_{DN} as quais vamos supor que serão representadas muito bem pelas expressões seguintes:

$$Z_{JN} \rightarrow Z_{JN} = \left(\frac{|J_{eff}(T)|}{2N} \right) \quad Z_{DN} \rightarrow Z_{DN} = \left(\frac{|\kappa_1(T)|}{N} \right) \quad (3.70)$$

Também na seção passada foram obtidas as relações $H_E/H_{E0} = b/b_0 = J_{eff}/J_{eff}(T_0)$, assim como $H_A/H_{A0} = \kappa_1/\kappa_1(T_0)$, e para facilitar mais os procedimentos denotaremos os quocientes (b/b_0) e $(\kappa_1/\kappa_1(T_0))$ como $g_1(\tau)$ e $g_2(\tau)$ respectivamente e $\tau = T/T_N$. Com estas considerações podemos escrever os termos $|J_{eff}|/\hbar\gamma_{FeF_2}$ e $|\kappa_1|/\hbar\gamma_{FeF_2}$ da seguinte maneira:

$$\frac{|J_{eff}|}{\hbar\gamma_{FeF_2}H_0^{(M)}} = \frac{|b_0|}{\delta_a}g_1(\tau), \quad \frac{|\kappa_1|}{\hbar\gamma_{FeF_2}H_0^{(M)}} = \frac{|b_0|}{\delta_a\lambda_{EA}}g_2(\tau) \quad (3.71)$$

Para usar as relações $H_E/H_{E0} = b/b_0$ e $H_A/H_{A0} = \kappa_1/\kappa_0$, é conveniente de definir dois quantidades adicionais que denotaremos por ϱ_1 e ϱ_2 , que estão definidas de acordo com: $\varrho_1 = (H_{E0}/H_0^{(M)})$ e $\varrho_2 = (H_{A0}/H_0^{(M)})$. Com isto, podemos escrever as expressões para h_a , h_e , e h_{ae} que aparecem em algumas das quantidades definidas anteriormente como $h_e = \varrho_1g_1(T)$, $h_a = \varrho_2g_2(T)$ e $h_{ae} = \varrho_1g_1(T) + \varrho_2g_2(\tau)$. Lembre-se que os valores de H_{E0} e H_{A0} foram determinados no capítulo 1, que o valor de $H_0^{(M)}$ é dado e que as funções $g_1(\tau)$, $g_2(\tau)$ são calculadas com os procedimentos da seção anterior, portanto todas as quantidades e parâmetros ficam completamente definidos. Antes de concluir os procedimentos analíticos vamos definir outras quantidade úteis. Assim por exemplo, usando a expressão de $\mathcal{E}_\beta^{(m)}$ na equação (3.55) quando $k = 0$, podemos definir a $\Gamma(h_0, h_c, \tau)$ como:

$$\Gamma(h_0, h_c, \tau) \equiv \left(\frac{\mathcal{E}_\beta^{(0)}}{H_0^{(M)}\hbar\gamma_{FeF_2}} \right) \quad (3.72)$$

Determinar os pontos onde $\mathcal{E}_\beta^{(0)}$ é zero, equivale a determinar os pontos onde $\Gamma(h_0, h_c, \tau)$ se anula, graças a isto podemos determinar quais são os valores de h_c , para τ e h_0 dados.

Então para escrever a expressão explicita de (3.72) usamos desde a equação (3.61) até (3.71) junto com todas as mudanças e transformações envolvidas.

$$\begin{aligned}
\Gamma(h_0, h_c, \tau) = & h_c + 2u_0v_0g_1(\tau) \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) \Gamma_{\alpha\beta}^{(1)} + 2g_1(\tau)(u_0 - v_0)^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)} \\
& - h_0 - 2 \left[g_1(\tau)u_0^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) + 2g_2(\tau)v_0^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a\lambda_{EA}} \right) \right] \Gamma_{\alpha\beta}^{(3)} - 2 \left[g_1(\tau)v_0^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) \right. \\
& + 2g_2(\tau)u_0^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a\lambda_{EA}} \right) \left. \right] \Gamma_{\alpha\beta}^{(4)} + 2g_1(\tau)(u_0 - v_0)^2 \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) (\Lambda_1 - \Lambda_2) \\
& - 4g_2(\tau)(u_0^2 + v_0^2) \left(\frac{|b_0|}{\delta_a} \right) \Lambda_2
\end{aligned} \tag{3.73}$$

onde as quantidades $\Gamma_{\alpha\beta}^{(i)}$, com $i = 1, 2, 3, 4$ que aparecem em (3.73) são definidas de acordo com:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\alpha\beta}^{(1)} &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3 \zeta^3(h\lambda)}{h^2} \right) \int_0^1 dt t^2 (u_t^2 + v_t^2) (\bar{n}_{\alpha t} + \bar{n}_{\beta t}) \\
\Gamma_{\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3 \zeta^3(h\lambda)}{h^2} \right) \int_0^1 dt t^2 \gamma_t u_t v_t (\bar{n}_{\alpha t} + \bar{n}_{\beta t}) \\
\Gamma_{\alpha\beta}^{(3)} &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3 \zeta^3(h\lambda)}{h^2} \right) \int_0^1 dt t^2 (u_t^2 \bar{n}_{\alpha t} + v_t^2 \bar{n}_{\beta t}) \\
\Gamma_{\alpha\beta}^{(4)} &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{\lambda_0^3 \zeta^3(h\lambda)}{h^2} \right) \int_0^1 dt t^2 (v_t^2 \bar{n}_{\alpha t} + u_t^2 \bar{n}_{\beta t})
\end{aligned} \tag{3.74}$$

As outras quantidades Λ_1 e Λ_2 de (3.73) estão definidas pelas expressões (3.63).

Todos os desenvolvimentos obtidos até aqui nesta seção, foram feitas com o proposito de encontrar uma equação que permiti-se determinar o campo critico de transição de spin-flop $H_{csf}(T)$ como uma função da temperatura. Então, isto é possível empregando a equação (3.73) obtida ao considerar a renormalização da energia do mágnon com vetor de onda $\mathbf{k} = 0$, que inclui os efeitos da anisotropia magneto cristalina dependente da temperatura junto com a variação de uma constante de exchange efetiva que também depende da temperatura mesma.

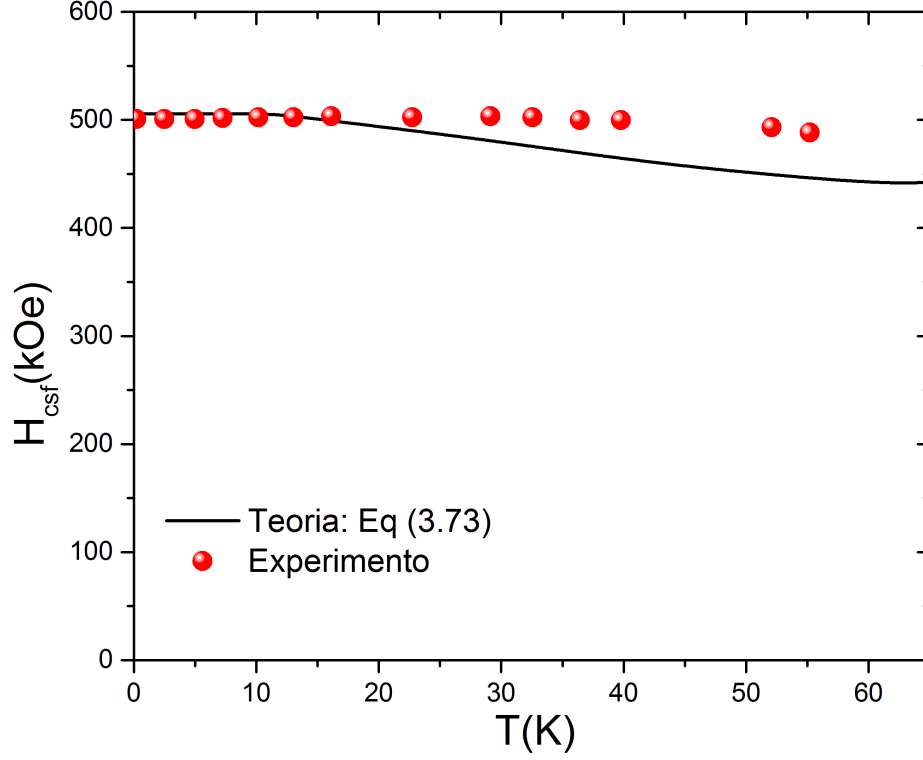


Figura 3.9: Comparação do campo critico no limite de estabilidade da fase antiferromagnética calculado usando a equação (3.73), com o resultado experimental [48].

Para realizar as estimações numéricas usando a equação (3.73) e obter a curva contínua da figura 3.9 que representa nossos resultados, utilizamos para os valores de H_{E0} e H_{A0} os encontrados ao ajustar as medidas das relações de dispersão do capítulo 1 para o FeF_2 . Com esses valores, determinamos o valor do parâmetro λ_{EA} . Além disso, assumimos que os valores encontrados para $J_{eff}(T)$ e $\kappa_1(T)$ obtidos na seção anterior continuam sendo razoavelmente aplicáveis ao caso em que exista um campo magnético externo no sistema bastante intenso. Com isto em mente, usamos um valor de campo magnético externo $H_0^{(M)}$ máximo de 500.00 kOe e $T_N = 78.394$ K, para determinar os valores dos parâmetros ϱ_1 , ϱ_2 e δ_a , logo após substituímos os valores obtidos na equação (3.73). Com o anterior, construímos uma equação não linear em h_a , h_c e τ . Então, o procedimento numérico consistiu em fixar um valor da temperatura absoluta e fazer uma varredura nos valores atribuídos de h_a de forma que se buscara o ponto cujo valor de h_c conduzissem a um zero da função expressada pela equação (3.73). Assim

criamos uma tabela de valores de $H_0^{(M)}h_c$ em função da temperatura e os resultados obtidos são mostrados pela curva da figura 3.9. Ali, comparamos os valores obtidos na referência [48], com nosso valor calculado. Podemos observar que os resultados obtidos na faixa de temperatura considerada de 0.00 K até 65.00 K, estão em acordo somente para temperaturas compreendidas entre 4.20 K e 30.0 K respectivamente.

Apesar que a curva teórica para o campo de transição de spin-flop pode ser calculada na faixa de temperatura $0 < T \leq T_N$, os resultados calculados são confiáveis somente para $4.20 \text{ K} \leq T \leq 65.00 \text{ K}$, isto é devido a que estas últimas estimações numéricas estão baseadas nas medidas de magnetização espontânea feitas por J. Strempfer *et. al.* [71, 72] e limitadas à faixa de temperaturas $4.20 \text{ K} \leq T \leq 78.40 \text{ K}$ e as respectivas medidas de ressonância antiferromagnética de R. C. Ohlmann [45] para temperaturas compreendidas em $1.50 \text{ K} \leq T \leq 65.00 \text{ K}$, mas apesar disso, há um bom acordo entre dados teóricos e experimentais para temperaturas $T \leq 4.20 \text{ K}$, isto é atribuído ao fato de assumir que o valor encontrado para $b(T = 4.20 \text{ K})$ aproxima muito bem o valor $b(T = 0.0 \text{ K})$, lembre-se que κ_1 e J_{eff} dependem de b como foi visto na seção anterior. Outro aspecto importante, é que este resultado teórico surge como uma correção que melhora um pouco as estimações teóricas feitas S. M. Rezende [47], que também emprega um modelo semelhante, mas não leva em conta a dependência com a temperatura da contribuição da anisotropia magneto cristalina.

CAPÍTULO 4

ANISOTROPIA MAGNÉTICA DO COMPOSTO ANTIFERROMAGNÉTICO RbMnF_3

Introdução

Iniciamos este capítulo como os anteriores, fazendo alguns comentários gerais acerca das propriedades do material de trabalho, neste caso a substância antiferromagnética RbMnF_3 . De uma maneira geral, este tipo de material já foi estudado bastante e há um certo conhecimento de suas propriedades magnéticas. Entretanto, ele chama novamente a atenção justamente pelo surgimento da spintrônica em materiais antiferromagnéticos [75]-[81]. Uma aplicação comum deste composto, consiste em fixar a magnetização de uma camada ferromagnética adjacente em dispositivos de válvulas de spins através da interface de exchange-bias [82, 83, 84]. Além disso, outros desenvolvimentos recentes mostraram a possibilidade de aplicação dos materiais antiferromagnéticos na detecção de correntes de spins por meio do efeito de spin Hall [85, 86].

Entre os materiais antiferromagnéticos que têm chamado a atenção e que já foram bastante estudados em décadas passadas estão os fluoretos isolantes FeF_2 , MnF_2 e também o RbMnF_3 . Cada um destes compostos apresenta uma estrutura cristalina tridimensional simples e também um ordenamento antiferromagnético de duas sub-redes abaixo

de suas temperaturas de Néel T_N . Em quanto os dois primeiros cristalizam numa estrutura tetragonal tipo rutila, o RbMnF_3 é caracterizado por uma estrutura cristalina cúbica do tipo perovskita. Para esses materiais, suas interações magnéticas principais são as interações de exchange entre os vizinhos mais próximos, onde às intensidades efetivas dos campos de exchange são da mesma ordem de grandeza e cujas magnitudes têm os valores: $H_{ex} = 540$ kOe para o FeF_2 , 515 kOe para o MnF_2 , e 830 kOe para o RbMnF_3 , com temperaturas de Néel também muito parecidas iguais a $T_N \approx 78, 67$, e 83 K [87] respectivamente.

Por outro lado, os campos de anisotropia magnética dos compostos FeF_2 , MnF_2 e RbMnF_3 , possuem magnitudes que são diferentes em vários ordens de magnitude, contrastando com os campos de exchange. Para o caso do FeF_2 seu íons magnéticos Fe^{2+} no estado base têm uma configuração $3d^6(^5D_4)$, possuindo um momento magnético orbital finito e conseqüentemente um campo de anisotropia magnética efetivo muito alto cujo valor é $H_{an} = 190$ kOe [45, 69] originado do acoplamento spin-órbita de um íon. O valor muito grande da anisotropia uniaxial do FeF_2 faz com que seja um bom modelo de sistema Ising 3D com seu comportamento característico crítico na transição AF-paramagnética à temperatura $T = T_N$ [88, 89]. Em MnF_2 e RbMnF_3 , a configuração do estado fundamental do íon magnéticos Mn^{2+} é $3d^5(^6S_{5/2})$, que não possui momento angular orbital, de forma que sua anisotropia magnética cristalina é pequena.

Em relação ao anterior, é sabido que os íons magnéticos do MnF_2 estão distribuídos numa célula tetragonal, produzindo uma anisotropia magnética cristalina de valor considerável devido à interação dipolar com um valor igual a $H_{an} \approx 10$ kOe [90, 91]. Entretanto para o caso do RbMnF_3 que tem uma estrutura cristalina tipo perovskita sem distorção mensurável da simetria cúbica [92], sua anisotropia magnética dipolar é nula. Por esta razão, o RbMnF_3 tem uma anisotropia magnética muito pequena, com valor $H_{an} = 4.50$ Oe, e portanto é considerado como um modelo de antiferromagneto tipo Heisenberg 3D quase ideal [92]-[99].

O produto dos campos efetivos de exchange e anisotropia desempenha um papel importante para determinar as propriedades dos materiais antiferromagnéticos. Por exemplo, o campo critico no qual o sistema sofre uma transição de fase do estado anti-ferro à fase de spin-flop é $H_{sf} \approx \sqrt{2H_{ex}H_{an}}$ para $H_{ex} \ll H_{an}$. Quando não há campo magnético externo aplicado, os modos de ressonância magnética são os mesmos e dados por $\omega_0 = \gamma\sqrt{2H_{ex}H_{an}}$ para $H_{ex} \ll H_{an}$, onde $\gamma = g\mu_B/\hbar$ é o fator giromagnético, g o fator espectroscópico e μ_B é o momento magnético fundamental. Agora, dado que FeF_2 , MnF_2 e RbMnF_3 têm campos de exchange bastantes similares e como seus campos de anisotropia são muito diferentes, isto provoca um comportamento discrepante em vários fenômenos. Por exemplo, em FeF_2 a frequência de ressonância antiferromagnética (AFMR) é da ordem de alguns THz, e seu estudo detalhado requiere o uso de laser no infravermelho distante [100]. Além disso, no caso de sua transição spin-flop ($H_{sf} \approx 500$ kOe) os estudos feitos até agora utilizam campos magnéticos pulsados com intensidades muito altas [48], isto impõe limitações no estudo pelo inconveniente de usar tais intensidades de campos aplicados.

Para o caso do composto MnF_2 , a frequência AFMR em campos baixos se encontra num intervalo de frequências de algumas centenas de GHz [101], mas a frequência de um dos modos pode se baixar até dezenas dos GHz pela aplicação de campos em ímãs supercondutores [102]. Pelo fato de ter uma anisotropia muito baixa, a dinâmica da magnetização no RbMnF_3 , fica numa faixa de fácil acesso, para ser exatos, nas micro-ondas 1-10 GHz, e seu campo de transição de spin-flop ($H_{sf} \approx 2.4$ kOe) pode ser estudado facilmente [92, 94]. Embora as linhas AFMR sejam alargadas de forma inhomogênea, o amortecimento dos mágnons com números de onda na faixa de 10^3 a 10^4 cm^{-1} em RbMnF_3 é pequeno, permitindo observar sua excitação paramétrica [103], deixando aberta a possibilidade de criar dinâmica não linear de ondas de spin e caos como se observa no YIG [104]. Talvez devido ao pequeno valor da anisotropia magnética do RbMnF_3 , sua origem não foi estudada com detalhe como acontece em outros fluoretos antiferromagnéticos.

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos nos experimentos e que suportam os desenvolvimentos teóricos da anisotropia magnética de RbMnF_3 que são o elemento principal do capítulo. A dependência na temperatura da anisotropia foi obtida a partir das medições do campo de spin-flop, que é derivado a partir do comportamento da susceptibilidade magnética. Ressaltamos aqui que isto foi feito faz varias décadas, mas as técnicas de medidas da magnetização naquela época eram pouco sensíveis para proporcionar informação precisa do valor da temperatura crítica para a transição AF-Spin-Flop [105]. Para terminar nossa introdução, adicionamos que as medidas da anisotropia magnética obtidas a partir da dependência na temperatura da frequência AFMR [94] não são exatas devido à variação em parte pela renormalização da energia dos mágnons [50, 106]. Estaremos basicamente apresentando um modelo teórico para a anisotropia do RbMnF_3 baseado nas interações de campo cristalino e spin-órbita, seguindo o método de cálculo empregado por Tachiki [107] para uma ferrita de Co^{2+} . Neste capítulo conseguimos mostrar que a variação na temperatura da constante de anisotropia magnética medida experimentalmente pode ser explicada pelo modelo teórico de maneira satisfatória.

4.1 Resultados experimentais

Os experimentos descritos nesta seção foram realizados usando uma amostra de RbMnF_3 , que tinha a forma de um prisma retangular com dimensões de $3 \times 4 \times 6 \text{ mm}^3$ com todas as faces nos planos $\langle 100 \rangle$. A magnetização M e a susceptibilidade χ_{ac} foram medidas empregando o módulo de magnetometria ac/dc (ACMS) do Quantum Design Physical Property Measurement System (PPMS). As medições experimentais usadas, foram realizadas pelo estudante de mestrado Gabriel Fonseca Guerra sob a orientação do professor Fernando de Araujo Machado, do grupo de Magnetismo e Materiais Magnético do departamento de física da Universidade Federal de Pernambuco (DF/UFPE). Em todas as medidas a amostra de RbMnF_3 foi cortada de um cristal crescido pelo método Czochralski no Laboratório de Física de cristais no Instituto Tecnológico de Massachusetts MIT.

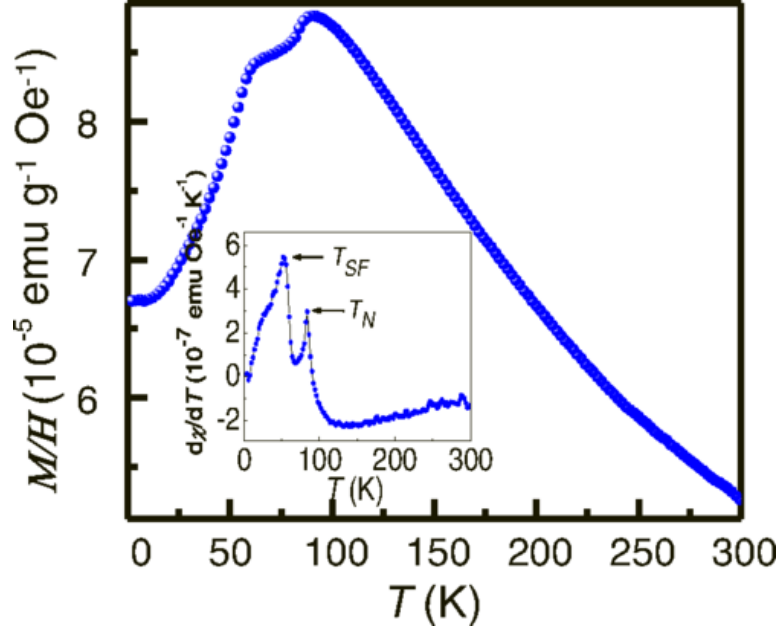


Figura 4.1: Variação com a temperatura da magnetização do RbMnF_3 medida num campo magnético estático de magnitude 1.0 kOe aplicado na direção [100]. A figura interior, mostra a derivada da susceptibilidade magnética com a temperatura e calculada numericamente [108].

A sensibilidade do ACMS para medir os momentos magnéticos com as configurações ac e dc são 1.0×10^{-8} e 2.0×10^{-5} emu respectivamente. Estes valores são de três a quatro ordens de magnitude menores que o nível do sinal detetado nas medições feitas. Os dois campos magnético ac e dc foram aplicados paralelos ao eixo [100]. A temperatura T da amostra foi variada no intervalo de 2 K até 300 K em passos de 0.2 e 2.0 K respectivamente, para as medições de χ_{ac} e M . Nas duas medições T foi estabilizada em ± 0.01 K. O campo magnético aplicado foi variado de -85 kOe a 85 kOe. Na figura 4.1 é mostrada a variação da magnetização M com a temperatura, medida com campo fixo $H = 1.0$ kOe, onde a escala no eixo vertical está em unidades de susceptibilidade $\chi = M/H$ dc. A temperatura foi variada desde 2 até 300 K, de forma que o extremo da faixa considerado de temperaturas é bem superior à temperatura de Néel $T_N \approx 83$ K, o que permite fazer uma análise da fase paramagnética (PM). A lombada entre 60 K e 70 K é o indicativo da transição spin-flop, e a pequena curva ao redor dos 80 K resulta da transição da fase PM. As temperaturas críticas podem ser medidas com

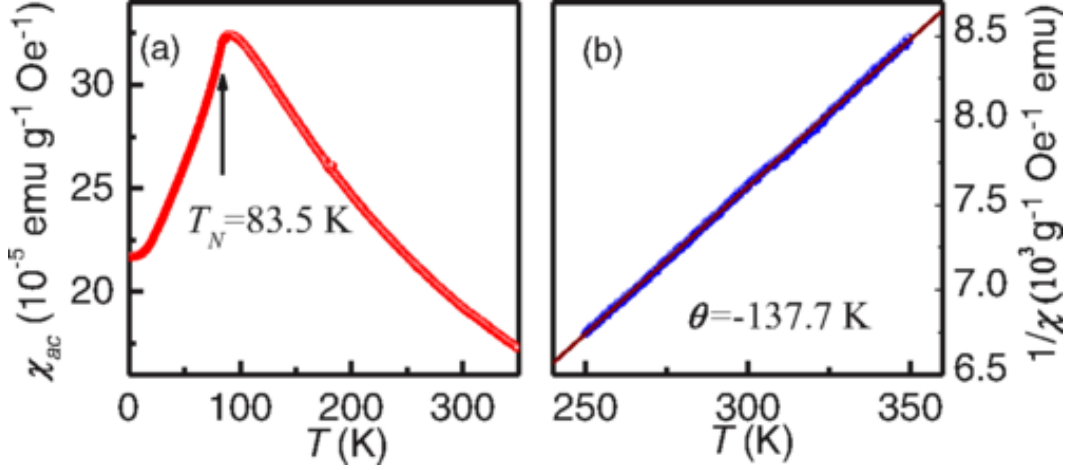


Figura 4.2: (a) Variação com a temperatura da susceptibilidade magnética χ_{ac} no RbMnF_3 medida com $H = 0 \text{ kOe}$, $h_{ac} = 4.0 \text{ Oe}$ e $f = 87 \text{ Hz}$. Inverso da susceptibilidade na região paramagnética [108].

precisão calculando numericamente a derivada de susceptibilidade com a temperatura justamente como é mostrado na figura 4.1. Os dois picos correspondem às transições de fases AF-SF e SF-PM com temperaturas críticas de $T_{sf} = 54.5 \text{ K}$ e $T_N = 83.6 \text{ K}$, respectivamente. Também, foi medida a susceptibilidade ac sem campo magnético aplicado. A frequência f e a magnitude de h_{ac} do campo magnético ac foram de 87 Hz e 4.0 Oe , respectivamente. A figura 4.2 (a) mostra a susceptibilidade ac do RbMnF_3 medida como uma função da temperatura. Devido a que o campo é muito menor do que H_{sf} a única transição de fase apreciável é a AF-PM com temperatura crítica $T_N \approx 83.5 \text{ K}$ indicada pela seta. Esse valor medido com $H = 0$, é um pouco menor do que aparece na figura 4.1 e está muito perto da medida feita por outros autores [95]. A Figura 4.2 (b) mostra a variação do inverso da susceptibilidade $1/\chi_{ac}$ na região paramagnética e também o ajuste linear com a lei de Curie-Weiss $\chi_{ac} = C/(T + \theta)$. A partir do ajuste, obtemos para a temperatura de Curie-Weiss que $\theta = -137.7 \text{ K}$ e para constante de Curie $C = 0.058 \text{ emu Kg}^{-1}\text{Oe}^{-1}$. O quociente $T_N/\theta = -0.61$ que fica perto do valor esperado [87]. Um método muito conveniente e preciso para determinar a fronteira de fase AF-SF, consiste varrer o campo e medir a magnetização dc a temperatura constante. A figura 4.3 (a) mostra a magnetização a $T = 2 \text{ K}$ com campo magnético variando desde -85 kOe até 85 kOe . Posto que a fase anti-ferro é restrin-

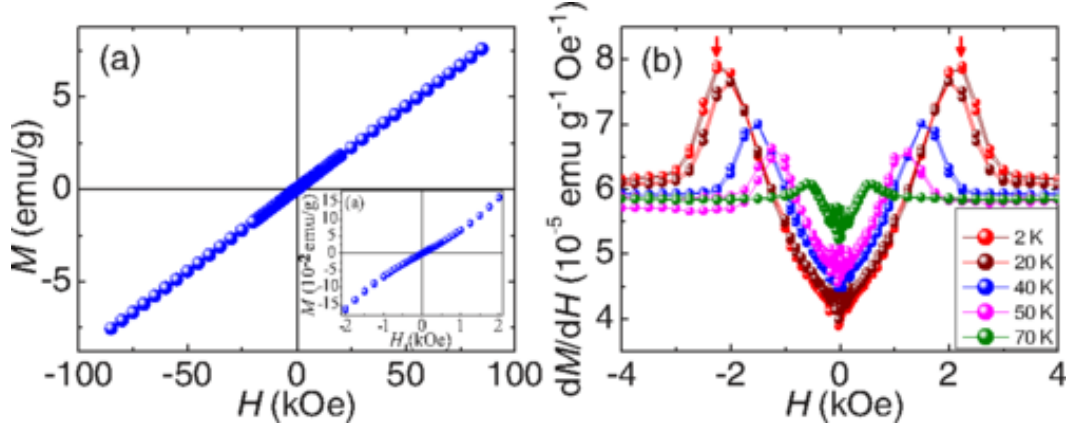


Figura 4.3: (a) Variação com o campo aplicado na direção [100] da magnetização em RbMnF_3 medida a $T = 2$ K. (b) Derivada da magnetização respeito campo magnético para diferentes valores da temperatura.

gida a uma pequena faixa de campo perto da origem, a forma geral da curva H vs M é uma linha reta característica da fase de spin-flop. O quadro interno na figura 4.3 (a) mostra uma ampliação exagerada perto da origem exibindo um deslocamento do comportamento linear. O valor do campo crítico para a transição de fases AF-SF em cada temperatura pode se determinar com boa precisão através do cálculo numérico da derivada da magnetização com respeito ao campo. Os picos em dM/dH , mostrados na figura 4.3 (b), correspondem à transição AF-SF como é indicado pelas setas para o valor de temperatura $T = 2$ K.

A Figura 4.4 (a) mostra a medida da fronteira de fases AF-SF obtida a partir dos dados da figura 4.3 tomando para cada temperatura as médias dos valores absolutos dos campos magnéticos correspondentes a dois máximos. Em $T = 2$ K, o campo crítico é $H_{sf} = 2.15$ kOe, que é um pouco menor que os valores medidos anteriormente [92, 97, 105]. Como pode ser visto, o valor $H_{sf} = 1,0$ kOe correspondente à temperatura $T = 54.7$ K, fica muito perto do valor obtido com o procedimento indicado na figura 4.1. A partir dos dados da figura 4.4 (a), conseguimos obter a variação com a temperatura da constante de anisotropia K_1 , empregando o campo da transição de spin-flop e dado pela relação funcional $H_{sf} \approx \sqrt{1.5H_{an}H_{ex}}$, válido para a anisotropia cúbica do material RbMnF_3 [94, 105], onde $H_{ani} = 2K_1/g\mu_B$ [8] e levando em conta que a variação de

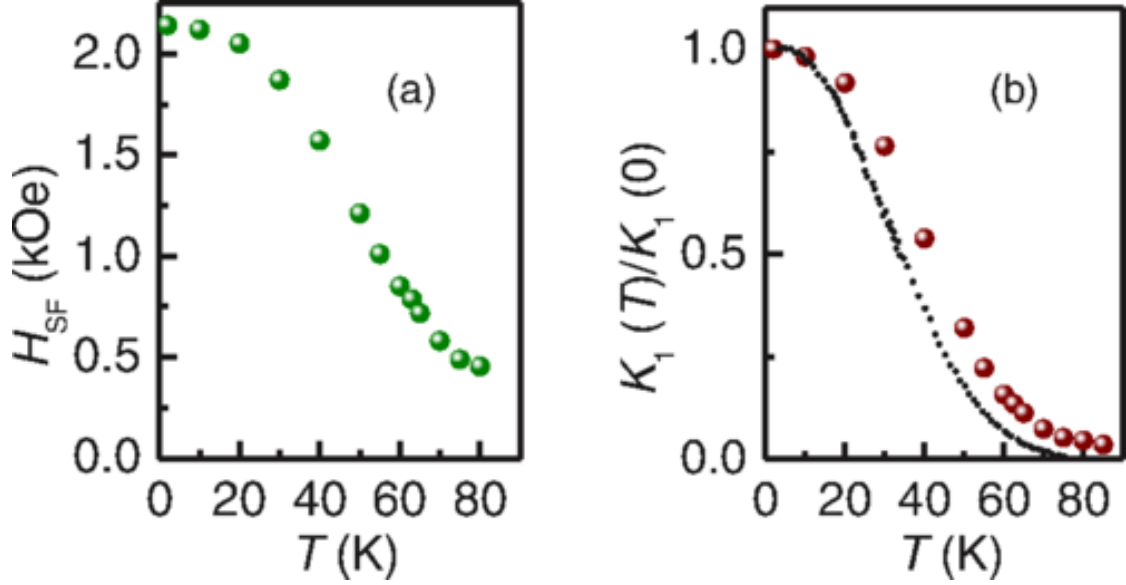


Figura 4.4: (a) Variação com a temperatura do campo de spin-flop em RbMnF_3 medido com o campo aplicado na direção $[100]$. (b) Variação com a temperatura da constante anisotropia magnética, os círculos vermelhos são os valores obtidos pelas medidas do campo de spin-flop e a linha tracejada são as medidas obtidas por Ince [94] por meio da frequência AFMR.

H_{ex} no intervalo de temperaturas de 2 K a 84 K é pequeno [96, 97]. A variação de $K_1(T)$ com a temperatura é mostrada na figura 4.4 (b) junto com os dados de Ince [94] obtidos a partir de medições de AFMR. Como já foi dito, a variação em K_1 medida pelo deslocamento na frequência AFMR com a temperatura não é precisa porque parte da mudança é devida à renormalização na energia dos mágnons que é onde surgem as interações de exchange.

4.2 Formulação do modelo teórico para calcular a anisotropia magnética no RbMnF_3

Nesta seção, desenvolveremos a teoria que permite determinar a anisotropia magnética para o RbMnF_3 e comparar com os resultados experimentais comentados na seção anterior. Inicialmente lembramos que para muitos monocristais, as propriedades magnéticas dependem das orientações espaciais em que elas sejam medidas. Por exemplo, para cristais de simetria cristalina cúbica, como é o caso da perovskita RbMnF_3 , a energia de

anisotropia magneto-cristalina pode ser escrita em termos dos cossenos diretores α_1 , α_2 e α_3 da magnetização com relação as orientações $\langle 100 \rangle$. Assim, se denotamos tal energia como E , a forma que ela adquire é:

$$E = E_0 + K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) + K_2(\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2) + \dots \quad (4.1)$$

onde as constantes $K_1, K_2, K_3, \dots$, são conhecidas como constantes de anisotropia de primeira ordem, segunda ordem, terceira ordem, etc [8]. Como veremos a seguir, nosso principal propósito consiste em achar a constante de anisotropia de primeira ordem em função dos parâmetros microscópicos das interações envolvidas. Para isso, o primeiro passo é construir o Hamiltoniano onde temos presentes varias interações mas nem todas são levadas em conta, assim entre elas temos: $\mathcal{H}_F$ que é o Hamiltoniano do íon livre desconsiderando o spin, $\mathcal{H}_C$ que representa o campo cristalino cúbico, $\mathcal{H}_T$ que corresponde ao campo cristalino tetragonal, $\mathcal{H}_{ex}$ que é a interação de exchange, $\mathcal{H}_{LS}$ que é o acoplamento de spin-órbita e finalmente a contribuição não menos importante de campo cristalino de baixa simetria $\mathcal{H}_{LSym}$. Portanto ao juntar todas as contribuições teremos $\mathcal{H} = \mathcal{H}_F + \mathcal{H}_C + \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{LS} + \mathcal{H}_{LSym}$.

Neste Hamiltoniano, se $\mathcal{H}_C$ não é muito grande, S permanecerá sem modificação nenhuma, mas a consideração feita, é que $\mathcal{H}_F$ e $\mathcal{H}_C$ são muito grandes comparados aos termos restantes do Hamiltoniano. Assim, nossas considerações que estão baseadas principalmente nos argumentos desenvolvidos por Tachiki [107], indicam então que estaremos trabalhando nos três níveis mais baixos nos quais o campo cúbico é degenerado triplamente. Abragam e Pryce [109] mostram que esses três estados, são os auto-estados da componente z de um momento angular fictício $\mathbf{l}$ que tem uma magnitude igual a 1. Para simplificar as contas, tomaremos o eixo z de tal forma que ele está na direção do eixo trigonal de simetria do sistema cristalino. Portanto, nós usaremos aqui uma base onde l_z e S_z sejam diagonais. Além disso, como funções de base usaremos os estados $|\varphi_m\rangle$, que satisfazem a equação de auto-valores $l_z|\varphi_m\rangle = m|\varphi_m\rangle$, onde os possíveis valores de m são $-1, 0$ e 1 respectivamente. Aqui $|\varphi_1\rangle, |\varphi_{-1}\rangle$ y $|\varphi_0\rangle$ serão construídos

usando os estados F do íon Mn^{2+} , algo que faremos mais para frente. Resulta que os primeiros dois estados formam um dubleto, mas o último é um singleto. Outro fato importante, é que mediante a teoria do campo cristalino pode ser mostrado que a parte do potencial trigonal no Hamiltoniano $\mathcal{H}_T$ se escreve como $\mathcal{H}_T = \Delta(1 - l_z^2)$, onde Δ é a separação entre os dubletos.

Por outra parte, a energia de exchange é basicamente a soma de duas contribuições, uma devido ao singleto e outra ao dubleto. Assim, de acordo com a teoria do campo molecular de Weiss, a contribuição total de exchange é simplesmente igual a $\mathcal{H}_{ex} = 2\mu_B l_z^2 S_\zeta H_e + 2\mu_B(1 - l_z^2) S_\zeta H'_e$. Onde, ζ representa um eixo que é paralelo à magnetização, H_e e H'_e são os campos de exchange para o dubleto e singleto respectivamente. Para continuar, usamos os argumentos empregados por Abragam e Pryce [109], que escrevem as matrizes de momento angular verdadeiras em termos de matrizes de um momento angular que é considerado fictício, é dizer, que se L_x , L_y e L_z representam as matrizes propriamente reais, estas podem ser escritas como $L_{x,y} = -\alpha' l_{x,y}$ e $L_z = -\alpha l_z$, onde l_x , l_y e l_z denotam as matrizes fictícias. A outra interação muito importante na formulação de nosso modelo é interação de acoplamento spin-órbita. Esta pode ser escrita como $\mathcal{H}_{LS} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, onde $\mathbf{L}$ é o operador de momento angular orbital e $\mathbf{S}$ é o momento angular de spin e λ é o parâmetro que fornece a intensidade do acoplamento. Neste ponto é importante introduzir os operadores de escada para o spin se queremos diagonalizar, pois o Hamiltoniano se torna mais fácil. Para isto, tomamos a definição $S^{(\pm)} = S_x \pm iS_y$ e também definimos os operadores de escada para o momento angular fictício de maneira semelhante ao caso do spin, isto é, $l^{(\pm)} = l_x \pm il_y$. De acordo com os resultados anteriores, o operador Hamiltoniano de acoplamento spin-órbita toma a seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{LS} = -\alpha \lambda l_z S_z - \frac{\alpha' \lambda}{2} \left(l^{(-)} S^{(+)} + l^{(+)} S^{(-)} \right) \quad (4.2)$$

Na base de estados $\{|\varphi_m\rangle\}$, a matriz associada à componente z do momento angular fictício é uma matriz diagonal, cujos elementos de sua diagonal principal são os autovalores de l_z . Além disso, podemos empregar a teoria do momento angular da mecânica

quântica, para calcular as matrizes associadas aos operadores de escada $l^{(\pm)}$. Então, aproveitando a relação entre os auto-estados de l_z e os operadores de escada do momento angular fictício, temos que $l^{(\pm)}|\varphi_m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|\varphi_{m\pm 1}\rangle$, daqui conseguimos as representações matriciais desses operadores que são simplesmente:

$$l_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad l^{(+)} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad l^{(-)} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Os resultados prévios permitem re-expressar a interação spin-órbita numa forma matricial que é mais cómoda para trabalhar, pois como já temos dito vamos buscar a maneira mais fácil de diagonalizar o Hamiltoniano. Com as equações dadas em (4.3) chegamos ao seguinte:

$$\mathcal{H}_{LS} = \begin{pmatrix} -\alpha\lambda S_z & 0 & -\frac{\alpha'\lambda}{\sqrt{2}}S^{(-)} \\ 0 & \alpha\lambda S_z & -\frac{\alpha'\lambda}{\sqrt{2}}S^{(+)} \\ -\frac{\alpha'\lambda}{\sqrt{2}}S^{(+)} & -\frac{\alpha'\lambda}{\sqrt{2}}S^{(-)} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Por outra parte, lembrando que temos para o momento angular fictício $\mathbf{l}$ três componentes independentes ligadas pela relação $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = 1$, resulta natural para alcançar nossos propósitos, re-expressar a contribuição de campo cristalino de baixa simetria ao Hamiltoniano total por médio de uma expressão que contem somente as componentes de $\mathbf{l}$, isto significa então que a forma mais geral que podemos obter para a expressão de $\mathcal{H}_{LSym}$ que é representada por uma combinação de termos linearmente independentes das componentes de $\mathbf{l}$ é simplesmente:

$$\mathcal{H}_{LSym} = E(l_x^2 - l_y^2) + F(l_x l_y + l_y l_x) + G(l_y l_z + l_z l_y) + H(l_z l_x + l_x l_z) \quad (4.5)$$

Na equação (4.4) achamos uma representação matricial para $\mathcal{H}_{LS}$ usando as matrizes associadas as componentes de $\mathbf{l}$ dadas pelo conjunto de expressões (4.3). Também usando as mesmas representações matriciais, nós podemos achar a matriz que repre-

senta a $\mathcal{H}_{LSym}$, a qual resulta também ser imediata. Então para ter uma expressão mais compacta, definimos a seguir um par quantidades que denotam em forma simplificada as componentes da matriz que queremos, isto é, $a = E - iF$ e $b = (G - iH)/\sqrt{2}$. Por conseguinte, a matriz vem dada por.

$$\mathcal{H}_{LSym} = \begin{pmatrix} 0 & a & b \\ a^* & 0 & -b^* \\ b^* & -b & 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Mais para frente, faremos um cálculo explícito das quantidades a e b dadas em (4.6). Mas antes disso, vamos fazer alguns comentários importantes, por exemplo as matrizes (4.4) e (4.6) podem se expressar como matrizes particionadas em blocos, tais que suas componentes serão formadas por submatrizes. Basicamente neste caso teremos três tipos de matrizes uma que tem dimensão 2×2 , outra de dimensão 2×1 e por última uma de dimensão 1×1 (ou seja um elemento escalar). Para as duas matrizes principais $\mathcal{H}_{LS}$ e $\mathcal{H}_{LSym}$ em suas formas particionadas, o primeiro elemento da diagonal principal corresponde à matriz de dimensão 2×2 que com certeza não é a mesma para cada uma de elas. O segundo elemento da diagonal principal é o termo escalar e os elementos restantes que ficam fora da diagonal principal são a matrizes de dimensão 2×1 e sua respectiva transposta conjugada, mantendo a $\mathcal{H}_{LS}$ e $\mathcal{H}_{LSym}$ hermitianas. O comentário que acabamos de fazer é para indicar que concentraremos nosso trabalho principal no espaço de dimensão 2. Assim, podemos então expressar a matriz $\mathcal{H}_{LSym}$ no espaço reduzido como uma combinação linear das matrizes de Pauli σ_x e σ_y , em decorrência teremos algo como: $\mathcal{H}_{LSym} := \gamma_1 \sigma_x + \gamma_2 \sigma_y$, onde resulta evidente que os coeficientes da expansão são dados por $\gamma_1 = (a + a^*)/2$ e $\gamma_2 = (a^* - a)/2i$ respectivamente.

Nossos comentários agora são estendidos à interação de exchange, em primeiro lugar observemos que esta depende do quadrado da componente z do momento angular fictício. Portanto, as matrizes associadas aos operadores l_z^2 e $(1 - l_z^2)$ podem também se particionar em blocos da mesma forma que nos casos anteriores. Especificamente vamos restringir nossas considerações da nova situação também a um subespaço de dimensão

2 que é expandido pela base $\{|\phi_1\rangle, |\phi_{-1}\rangle\}$. Com estes argumentos chegamos a concluir que a interação de exchange para o caso do singlete não contribui ao Hamiltoniano total. Desta maneira chegamos a obter que contribuição da interação de exchange é devida exclusivamente ao dubleto e dada simplesmente por $\mathcal{H}_{ex}^{(doub)} := \mathcal{H}_{ex} = 2\mu_B S_\zeta H_e \mathbf{I}$, onde $\mathbf{I}$ representa a matriz identidade de ordem 2×2 . Agora se juntamos todos os argumentos anteriores, o Hamiltoniano de interesse principal no subespaço expandido pela base $\{|\phi_1\rangle, |\phi_{-1}\rangle\}$ é escrito como:

$$\mathcal{H} = 2\mu_B S_\zeta H_e \mathbf{I} - \alpha \lambda S_z \sigma_z + \left(\frac{a + a^*}{2}\right) \sigma_x + i \left(\frac{a - a^*}{2}\right) \sigma_y \quad (4.7)$$

O problema de diagonalização pode ser melhor estudado se fazemos uso da interpretação geométrica da situação, mas para isso vamos definir os vetores: $\zeta' = 2\mu_B H_e \mathbf{e}_\zeta + \alpha|\lambda|\mathbf{e}_z$ e $\zeta'' = 2\mu_B H_e \mathbf{e}_\zeta - \alpha|\lambda|\mathbf{e}_z$, onde $\mathbf{e}_\zeta$ e $\mathbf{e}_z$ são vetores unitários que apontam ao longo dos eixos ζ e z respectivamente. Além disso, as componentes do vetor de spin são projetadas nos eixos ζ' e ζ'' , e denotamos elas por $S_{\zeta'}$ e $S_{\zeta''}$ respectivamente. Podemos usar a figura 4.5 para ilustra melhor a situação tratada, no qual os operadores de spin são projetados no subespaço de dimensão 2. Então se agora aplicamos o teorema do cosseno podemos obter os dois vetores ζ' e ζ'' , no nosso sistema de eixos e que vai nos permitir escrever a matriz Hamiltoniana associada em termos dos elementos de uma matriz de rotação, mas para fazê-lo note primeiro que o ângulo entre $\mathbf{e}_\zeta$ e $\mathbf{e}_z$ é justamente θ . Também como os vetores são unitários, resulta que $\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_\zeta \cdot \mathbf{e}_\zeta = 1$ e $\mathbf{e}_\zeta \cdot \mathbf{e}_z = \cos \theta$ respectivamente, assim para aclarar as expressões nos faremos so por estas vez $\zeta^{(+)} := \zeta'$ e também $\zeta^{(-)} := \zeta''$. Por tanto os comprimentos dos vetores ζ' e ζ'' ficarão dados por:

$$\zeta^{(\pm)} = \left(4\mu_B^2 H_e^2 \pm 4\alpha|\lambda|\mu_B H_e \cos \theta + \alpha^2|\lambda|^2\right)^{1/2} \quad (4.8)$$

Para completar nossa descrição, temos que levar em conta as operações de rotação no potencial de campo cristalino de baixa simetria. Com isto, a matriz Hamiltoniana no

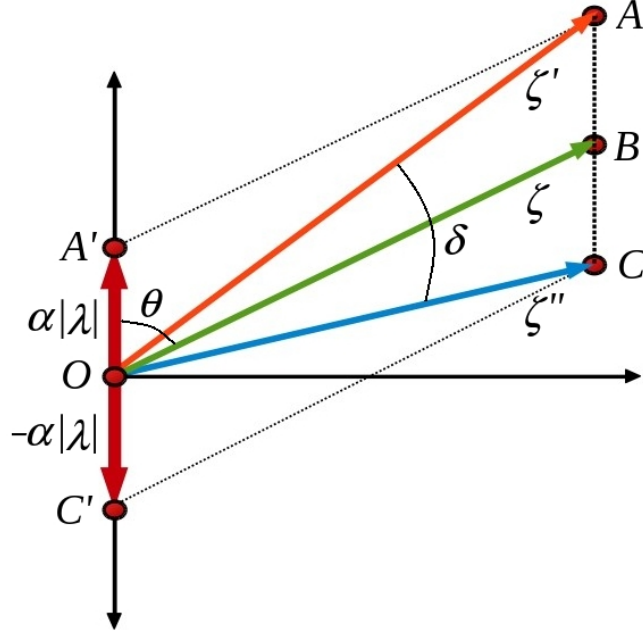


Figura 4.5: Definições das direções ζ' e ζ'' , como também os ângulos θ e δ . Mas as direções do eixo trigonal e da magnetização são indicadas por z e ζ respectivamente.

sub espaço considerado fica dada pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H} := \begin{pmatrix} \zeta' S_{\zeta'} & aR \\ a^* R & \zeta'' S_{\zeta'} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Agora vamos supor que $\mathcal{H}$ atua nos estados $|\Psi_M\rangle$ de nosso sistema os quais são assumidos ortogonais. Então o passo seguinte é resolver a equação de Schrödinger $\mathcal{H}|\Psi_M\rangle = E_M|\Psi_M\rangle$, daqui vemos que até este ponto o problema acaba sendo reduzido a determinar os auto-valores do sistema algébrico $(\mathcal{H}_{M'M} - E_M\delta_{M'M}) = 0$. Portanto, no espaço de dimensão reduzida, o problema matricial conduz a achar as soluções de uma equação polinomial de grau dois. Essas soluções das que estamos falando estão dadas na expressão seguinte:

$$E_M = \frac{M}{2} \left((\zeta' + \zeta'') \pm \sqrt{(\zeta' - \zeta'')^2 + \frac{4|aR_{MM}|^2}{M^2}} \right) \quad (4.10)$$

Resulta evidente da equação (4.10) a dependência explícita que possuem os níveis de energia E_M com os elementos R da matriz de rotação. Então, a seguir nossa

tarefa consiste em determinar como são os elementos R para o caso quando o spin é $5/2$. Um fato muito bem conhecido da mecânica quântica é que em forma geral existe uma expressão para a matriz de rotação que pode ser obtida mediante o cálculo explícito dos elementos matriciais de um operador de rotação usando a formulação de Wigner [4, 110]. Nesta situação tal operador de rotação é definido por médio da relação $D_{m'm}^j(\alpha, \delta, \gamma) = e^{-im'\alpha} d_{m'm}^j(\delta) e^{-im\gamma}$ onde los elemento de matriz $d_{m'm}^j$ são definidos de acordo com:

$$d_{m'm}^j(\delta) = \sqrt{\frac{(j+m)! (j-m)!}{(j+m')! (j-m')!}} \left(\cos \frac{\delta}{2} \right)^{m+m'} \left(\sin \frac{\delta}{2} \right)^{m-m'} P_{j-m}^{m-m', m+m'}(\cos \delta) \quad (4.11)$$

onde as funções $P_{j-m}^{m-m', m+m'}(\cos \delta)$ são os polinômios de Jacobi definidos por médio da expressão [111, 112, 113, 114]:

$$P_n^{n_1, n_2}(\cos \delta) = \sum_k \frac{(n+n_1)! (n+n_2)!}{(n+n_1-k)! (n_2+k)! (n-k)! k!} \left(\cos^2 \frac{\delta}{2} \right)^k \left(-\sin^2 \frac{\delta}{2} \right)^{n-k} \quad (4.12)$$

onde n_1 , n_2 e n são inteiros e o índice da soma percorre todos os inteiros para os quais o argumento dos fatoriais são definidos positivos. Aproveitaremos os resultados estabelecidos nas equações (4.11) e (4.12) para achar a matriz de rotação. Agora, o momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ de nosso sistema, é justamente o spin, pois para o caso dos íons Mn^{2+} que estão sendo considerados em seu estado base, temos que $\mathbf{L}$ é nulo. Além, a rotação é feita num plano de tal forma que em esta situação temos o caso em que $\alpha = \gamma = 0$. Portanto, todo é reduzido ao cálculo dos elementos $d_{m'm}^j(\delta)$ só. Então, teremos que $R_{M'M} = D_{M'M}^j(0, \delta, 0) = d_{M'M}^j(\delta)$. Para simplificar ainda mais a situação definimos as quantidades $t = t(\delta) = \cos \delta$ e $s = s(\delta) = \sin \delta$. Agora bem, como o valor do spin é $S = 5/2$ então a matriz de rotação será de dimensão 6×6 , mas de todos os elementos de matriz só aqueles que fiquem na diagonal principal serão os que maior contribuição farão ao espectro energético. A seguir expressamos os elementos que estão na diagonal para os valores positivos de M , é dizer $M = \{1/2, 3/2, 5/2\}$, as

mesmas expressões são válidas quando o valor de M é negativo portanto:

$$R_{1/2,1/2} = \frac{t}{2}(5t^4 - 10t^2s^2 + 5s^4 - 3t^2 + s^2), \quad R_{3/2,3/2} = t^3(t^2 - 3s^2), \quad R_{5/2,5/2} = t^5 \quad (4.13)$$

Pode ser observado da equação (4.13) que os elementos matriciais $R_{M'M}$ dependem do ângulo entre os spins ao longo dos eixos ζ' e ζ'' , isto é, dependem da quantidade δ . Portanto, o jeito para determinar o δ é simples, é suficiente voltar novamente à figura 4.5 e dali usar a trigonometria elementar. Especificamente, usamos o teorema do cosseno no triângulo $\triangle OCA$. Assim de acordo com os argumentos anteriores nós conseguimos chegar à seguinte expressão:

$$\cos \delta = \left(\frac{1 - d^2/4}{1 + d^2/4} \right) \frac{1}{\sqrt{1 - \chi^2}} \quad (4.14)$$

As quantidades d e χ que aparecem na equação (4.14) são definidas por $d = \alpha|\lambda|/\mu_B H_e$ e $\chi = y \cos \theta$ respectivamente. Se substituirmos a expressão encontrada para $\cos \delta$ em (4.14) o resultado que aparece será uma expressão algebraica extremadamente longa e complicada, mas mesmo assim não é preciso porque nossas considerações futuras estarão baseadas na suposição que a magnetização vai se deslocar muito pouco do eixo de simetria z . Além disso temos que adicionar a expressão que define a y para que $\cos \delta$ este definido por completo. Isto último significa então que depois de fazer as manipulações algebraicas necessárias é conseguido que $y = (4\alpha\mu_B H_e |\lambda|)/(4\mu_B^2 H_e^2 + \alpha^2 |\lambda|^2)$. Pelo dito, aproximaremos o valor de δ , ao expandir as expressões que dependem de δ e χ numa serie de potencias e pegamos os termos da ordem mais baixa até conseguir:

$$\delta = \left(\frac{\alpha|\lambda|}{\mu_B H_e} \right) \sin \theta \quad (4.15)$$

O passo seguinte é expandir os níveis de energia para calcular a função de partição e assim obter finalmente as constantes de anisotropia, ou melhor a constante de anisotropia de primeira ordem que é nosso principal objetivo. Isto é conseguido de forma mais fácil se primeiro reescrevemos a ζ' e ζ'' como funções de θ , d e χ . Portanto, depois

de simplificar é obtido as seguintes relações:

$$\begin{aligned}\zeta' &= (2\mu_B H_e)\sqrt{1 + d^2/4}\sqrt{1 + \chi} \\ \zeta'' &= (2\mu_B H_e)\sqrt{1 + d^2/4}\sqrt{1 - \chi}\end{aligned}\tag{4.16}$$

Se as expressões que temos conseguido para ζ' e ζ'' são substituídas na expressão (4.10), esses níveis de energia são transformados da seguinte maneira:

$$E_M = \gamma_M(d) \left(\sqrt{1 + \chi} + \sqrt{1 - \chi} \pm \sqrt{2}(1 - \sqrt{1 - \chi^2})^{1/2} \sqrt{1 + \frac{|aR|^2}{2\gamma_M^2(d)(1 - \sqrt{1 - \chi^2})}} \right)\tag{4.17}$$

Com o propósito de escrever o mais simples possível a expressão que define os níveis de energia, temos definido a quantidade $\gamma_M(d)$ convenientemente por médio da expressão $\gamma_M(d) = \mu_B H_e M(1 + d^2/4)^{1/2}$. Mas pelo visto em (4.17), a expressão que define a energia é complicada demais. Então, um passo fundamental é expandir os E_M numa serie de potencias em χ e considerar os primeiros termos da expansão. As duas razões principais de isto são, primeiro o complicado que é empregar a expressão completa para E_M e em segundo lugar que é o argumento mais importante é que o deslocamento da magnetização em relação ao seu eixo de equilíbrio é bastantes pequeno. Seguindo com nossas considerações acerca da serie de potências, quando dizemos que tomaremos as ordem mais baixas, especificamente estamos indicando que a aproximação tomada vai até segunda ordem em $|aR_{MM}|$ e χ somente. Além disso, levamos muito em conta a dependência linear que possui γ_M com M . O anterior significa que a energia na aproximação considerada dependerá da primeira potencia de M , como também de seu inverso. Isto significa então que $E_M = -E_{-M}$. Também é importante lembrar que os valores de M são iguais a $\pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2$. Então, por razões de conveniência agora definimos um $M_{min} = 1/2$ e também $M_{max} = 5/2$, e assim quando tomemos somas estendidas em M para todos seus valores, istas serão tomadas no intervalo positivo só. Na expansão em serie da equação (4.17), tomamos o sinal superior em $\pm$ para definir

$E_M^{(1)}$ e o sinal inferior para definir $E_M^{(2)}$ respectivamente, ficando então que:

$$\begin{aligned} E_M^{(1)} &= 2\gamma_M - \frac{1}{4}\gamma_M\chi^2 + \gamma_M\chi + \frac{|aR_{MM}|^2}{2\gamma_M\chi} \\ E_M^{(2)} &= 2\gamma_M - \frac{1}{4}\gamma_M\chi^2 - \gamma_M\chi - \frac{|aR_{MM}|^2}{2\gamma_M\chi} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Com os auto-valores de energia aproximados pela forma dada em (4.18), agora passamos a calcular à função de partição. Antes disso, é importante ressaltar E_M e E_{-M} dependem dos ângulos entre a magnetização e o sistema de eixos trigonais, isto significa que se θ_j é um de tais eixos, então $Z_j \equiv Z(\theta_j)$, além disso, tomando o fato que $E_M = -E_{-M}$ achamos que a forma da função de partição é dada por:

$$Z_j = 2 \sum_{M=M_{min}}^{+M_{max}} \sum_r \cosh \left[\frac{E_M^{(r)}}{K_B T} \right] \quad (4.19)$$

Na equação (4.19), $r = 1, 2$ posto que existem dois auto-valores de energia, K_B a constante de Boltzmann e obviamente T representa a temperatura. Antes de determinar a constante de anisotropia, precisamos calcular a energia livre de Helmholtz, que é definida por $F = -N K_B T \sum_j \ln Z_j$, então se jogamos (4.19) na definição de F , a energia livre ficará dada por:

$$F = F_0 - \frac{N K_B T}{N_I} \sum_j \ln \left(\sum_{M=M_{min}}^{+M_{max}} \sum_r \cosh \left[\frac{E_M^{(r)}(\theta_j)}{K_B T} \right] \right) \quad (4.20)$$

onde N_I é o número de íons magnéticos que há numa cela e F_0 será uma energia que possuirá o sistema no equilíbrio. Assim, F contem a contribuição que faz um íon devido a que implicitamente estamos usando a aproximação de um íon mesmo. Para avançar um pouco mais, precisamos supor que a magnetização no cristal está inicialmente orientada paralela ao eixo $[001]$. Logo após de aplicar um campo magnético no plano (011) , ela é desviada um ângulo ψ de sua orientação original. Portanto ao tomar como referencia o conjunto de eixos de simetria $\langle 111 \rangle$, estabeleceremos a relação entre as orientações da magnetização e esses eixo, assim calcularemos a função de partição explicitamente e daí expandir-la em termos de ψ com o que podemos achar a K_1 .

Então, para determinar o ângulo, lembre-se que para dois vetores quaisquer, $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$, com coordenadas esféricas angulares (θ_1, ϕ_1) e (θ_2, ϕ_2) respectivamente, o ângulo γ entre eles é dado pela relação $\cos \gamma = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)$. Se tomamos um sistema de eixos ortogonais num cubo unidade, os ângulos entre a magnetização e o conjunto de eixos $\langle 111 \rangle$ ficam dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\cos \theta_1 &= \frac{1}{2} \left(\sin \psi + \sqrt{2} \cos \psi \right), & \text{para } [111]. \\ \cos \theta_3 &= \frac{1}{2} \left(\sin \psi - \sqrt{2} \cos \psi \right), & \text{para } [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]. \\ \cos \theta_2 &= -\frac{1}{2} \left(\sin \psi + \sqrt{2} \cos \psi \right), & \text{para } [1\bar{1}\bar{1}]. \\ \cos \theta_4 &= -\frac{1}{2} \left(\sin \psi - \sqrt{2} \cos \psi \right), & \text{para } [\bar{1}\bar{1}1].\end{aligned}\tag{4.21}$$

Agora usamos as relações dadas em (4.21), nas expressões dos níveis de energia (4.18). Com isto, conseguimos que a energia livre dependa de uma variável angular só em lugar quatro. Voltando para uma de nossas principais suposições de pouco deslocamento da magnetização de seu estado de equilíbrio, podemos expandir a $F(\psi)$ numa serie de Taylor ao redor do ponto $\psi = 0$. Daqui, o termo que é proporcional a ψ^2 será a constante de anisotropia K_1 que tanto temos procurando, isto é:

$$F(\psi) = F(0) + \left[\frac{dF(\psi)}{d\psi} \right]_{\psi=0} \psi + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F(\psi)}{d\psi^2} \right]_{\psi=0} \psi^2 + O(\psi^3)\tag{4.22}$$

O termo proporcional a ψ é nulo, pois é de esperar que a energia alcance um mínimo ao longo do eixo $[001]$. Concluimos então que $K_1 = F''(0)/2$, assim para expressar em forma simplificada a K_1 empregamos os argumento seguintes: primeiro que d é pequeno demais de forma que $\cos(d/2\sqrt{2})$ e $\sin(d/2\sqrt{2})$ podem-se expressar de forma aproximada, para o caso do cosseno como 1 e para o caso do seno como $(d/2\sqrt{2})$, o segundo argumento é que para y tomamos à aproximação $y \approx d$. Ista duas aproximações são justificadas pelo alto valor que tem a energia de exchange sobre a intensidade do acoplamento de spin-órbita. Também, precisamos definir algumas quantidades adicionais

com o propósito de ter uma expressão mais compacta, isto é:

$$\begin{aligned}
U_m &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(2m+1)\alpha|\lambda| + \frac{\sqrt{2}|a|^2}{(2m+1)\alpha|\lambda|} \\
T_m &= \frac{1}{4}(2m+1)\alpha|\lambda| - \frac{|a|^2}{(2m+1)\alpha|\lambda|} \\
W_m &= \frac{2\sqrt{2}|a|^2}{(2m+1)\alpha|\lambda|} - \frac{1}{2\sqrt{2}}(2m+1)\alpha|\lambda|
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Nas expressões anteriores, os valores tomados por m são, $m = 0, 1, 2$ e elas são quantidades auxiliares que permitem definir os polinômios trigonométricos hiperbólicos seguintes:

$$\begin{aligned}
P_0(T) &= \sum_m \cosh \left[(2m+1) \frac{\alpha|\lambda|}{K_B T} \right] \cosh \left(\frac{U_m}{K_B T} \right) \\
P_1(T) &= \sum_m T_m^2 \cosh \left[(2m+1) \frac{\alpha|\lambda|}{K_B T} \right] \cosh \left(\frac{U_m}{K_B T} \right) \\
P_2(T) &= \sum_m W_m \cosh \left[(2m+1) \frac{\alpha|\lambda|}{K_B T} \right] \sinh \left(\frac{U_m}{K_B T} \right) \\
P_3(T) &= \sum_m T_m \cosh \left[(2m+1) \frac{\alpha|\lambda|}{K_B T} \right] \sinh \left(\frac{U_m}{K_B T} \right)
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Finalmente, chegamos à expressão para a constante de anisotropia $K_1(T)$ que é simplesmente dada por:

$$K_1(T) = \left(\frac{2NK_B T}{N_I} \right) \left(\left[\frac{P_3(T)}{K_B T P_0(T)} \right]^2 - \left[\frac{P_1(T)}{K_B^2 T^2 P_0(T)} + \frac{P_2(T)}{K_B T P_0(T)} \right] \right) \tag{4.25}$$

O conjunto de equações (4.23), (4.24) e (4.25) é usado para interpretar os resultados expostos na seção 4.1. Na figura 4.6 são apresentados os dados experimentais representados pelos pontos verdes e a linha sólida representa o melhor ajuste desses dados conseguido com a equação (4.25). Com nosso modelo, foi conseguido que o melhor ajuste fornece os valores de dois parâmetros independentes que surgem no desenvolvimento da teoria, isto é, $a = 19.5 \text{ cm}^{-1}$ e também $\alpha|\lambda| = 20.4 \text{ cm}^{-1}$. Na figura 4.6 também são apresentadas três curvas adicionais para testar a sensibilidade do modelo

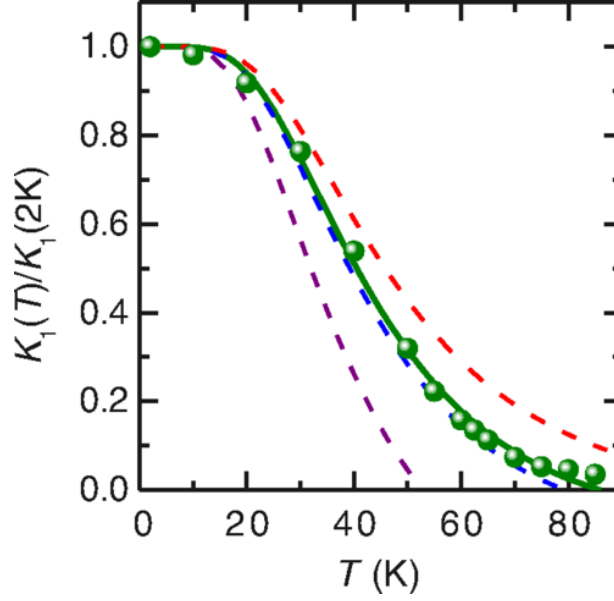


Figura 4.6: Variação da constante de anisotropia magnética relativa como uma função da temperatura no RbMnF_3 . Os pontos verdes representam os valores dos dados experimentais da figura 4.4 e a curva sólida corresponde ao melhor ajuste com o modelo desenvolvido para os valores dos parâmetros $a = 19.5$ e $\alpha\lambda = 20.4 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente. As três curvas tracejadas adicionais, vermelha, azul e roxa são para os valores de $\alpha\lambda = 22.0$, $\alpha\lambda = 18.0$ e $\alpha\lambda = 20.0 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente.

em relação à variação do produto $\alpha|\lambda|$. Embora os resultados teóricos encontrados para explicar a forma da curva de anisotropia são muito bons e que além do mais são muito diferentes a aqueles apresentados nas referências [45, 115], ele não permite a determinação única dos parâmetros α e λ . Mas isso não é um problema porque de acordo com as medidas feitas das energias Jahn-Teller para os íons de Mn^{2+} em RbMnF_3 por meio de medidas da largura de linha de fônons, é possível determinar que o valor da constante de acoplamento spin-órbita é igual a $\lambda = 29.0 \text{ cm}^{-1}$ [116, 117]. Combinando este valor com o resultado conseguido no melhor ajuste dos dados experimentais, se conclui que o valor do coeficiente α para o momento angular dos íons Mn^{2+} é igual a $\alpha = 0.7$ que é menor que 1, justamente como era esperado.

CAPÍTULO 5

CÁLCULO DAS TAXAS DE RELAXAÇÃO EM PROCESSOS DE ESPALHAMENTO DE 3-MÁGNONS E 4-MÁGNONS NO YIG

Introdução

Para compreender a dinâmica da propagação de ondas de spins num sistema ferromagnético é necessário conhecer a maneira como acontecem as interações entre os mágnons, mas a discussão da relaxação de ondas de spins que faremos neste capítulo será baseada em YIG levando em conta os comentários que foram feitos deste material na seção 1.3.2.

O cálculo das taxas de relaxação em YIG empeçou há muito tempo. As contribuições teóricas e experimentais pioneiras foram feitas em princípios da década dos anos sessenta do século passado[118]-[128]. Apesar disso, retomaremos o cálculo porque precisamos determinar os tempos de vida para descrever as propriedades de transporte em YIG. As taxas de relaxação foram investigadas para vetores de onda com comprimentos pequenos teórica e experimentalmente. Mediante técnicas de bombeamento paramétrico de micro-ondas foi possível fazer medições detalhadas das taxas de re-

laxação para mágnons de vetores de onda com comprimentos da ordem $k < 10^6 \text{ cm}^{-1}$ [129]. Em monocristais de YIG, as taxas de relaxação variam linearmente com k e estão compreendidas na faixa $\eta_k \approx 1 - 100 \text{ MHz}$ a temperatura ambiente. Os resultados obtidos experimentalmente são explicados satisfatoriamente por meio de processos de relaxação de 3-mágnons, conseguindo-se prever o comportamento linear com k e a temperatura. Em contraste, a maior contribuição dos mágnons que aparecem nas equações integrais que descrevem as propriedades de transporte são devido a mágnons com números de onda muito grande, e estes não tem sido investigados com muito detalhe. Experimentos de micro-ondas de frequência muito alta, indicam que os processos de 4-mágnons são predominantes para números de onda $k > 10^6 \text{ cm}^{-1}$ [130, 131].

Por outro lado, a relaxação de ondas de spins devido a processos de 4-mágnons foi investigada para antiferromagnetos [50, 106], e as medidas experimentais foram feitas usando técnicas de espalhamento inelástico de nêutrons. Apesar disso, até o momento não existem medições experimentais e tampouco cálculos teóricos para ferromagnetos. Então, neste capítulo estudaremos teoricamente o amortecimento de ondas de spin através do cálculo das taxas de relaxação, quando elas se propagam no interior de um filme de YIG. Em todos os caso a seguir, os processos de interação entre mágnons serão baseados exclusivamente em dois princípios fundamentais da física: a conservação do momento, e a conservação da energia. Assim, vamos primeiro a determinar as expressões das taxas de relaxação para os processos de espalhamento de 3-mágnons e logo após para o caso de espalhamento de 4-mágnons.

5.1 Cálculo das taxas de relaxação em processos de espalhamento de 3-mágnons em YIG

A seguir, vamos calcular as taxas de relaxação num processo de espalhamento de 3-mágnons. Então, em forma geral os processos onde interagem três mágnons são subdivididos em duas categorias: espalhamento de 3-mágnons por confluência e processos

espalhamento de 3-mágnons por splitting. Como pode ser observado da figura 1.14 (a), em um processo de confluência convergem dois mágnons num mesmo ponto com vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$, para formar um novo mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_3$ igual a soma dos dois mágnons interagentes. Em contraste, num processo de splitting um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_1$ decai em dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$, ilustrado na figura 1.14 (b). Portanto, o Hamiltoniano mais geral para descrever a interação de três bósons, onde o momento é conservado está dado por:

$$\mathcal{H}^{(3M)} = \sum_{lmn} C_{lmn}^{(3M)} a_n^\dagger a_m^\dagger a_l \Delta(\mathbf{k}_l - \mathbf{k}_m - \mathbf{k}_n) + c.c \quad (5.1)$$

onde $a^\dagger$ e a são os operadores de criação e destruição de bósons, $c.c$ significa complexo conjugado e $C_{lmn}^{(3M)}$ os coeficientes que fornecem a intensidade da interação de 3-bósons. A forma de $\mathcal{H}^{(3M)}$, indica que teremos elementos de matriz para os dois processos, confluência e splitting. Assim, para formular o Hamiltoniano completo $\mathcal{H}$ do sistema, levamos em conta todas as interações dadas em (1.42). Então, ao expandir $\mathcal{H}$ em operadores de mágnons, encontramos que tanto a interação de exchange como a Zeeman não contribui ao Hamiltoniano de terceira ordem. Isto significa que a $\mathcal{H}^{(3M)}$ contribui somente a interação dipolar. Além do mais, a equação (5.1) é uma maneira conveniente de escrever a equação (1.82). Substituindo as equações (1.57) na contribuição $\mathcal{H}_{Dip}^{(3)}$ dada em (1.56) e usando a simetria de inversão espacial, encontramos que o Hamiltoniano dipolar de terceira ordem fica.

$$\mathcal{H}^{(3M)} = \pi\mu^2 \left(\frac{2SN}{V^2} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c \quad (5.2)$$

onde $(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi})$ é uma abreviação de $(\theta_1, \theta_2, \varphi_1, \varphi_2)$ e $f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi})$ é a função definida pela expressão seguinte:

$$f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}) = e^{i\varphi_{\mathbf{k}_1} \sin\theta_{\mathbf{k}_1} \cos\theta_{\mathbf{k}_1}} + e^{i\varphi_{\mathbf{k}_2} \sin\theta_{\mathbf{k}_2} \cos\theta_{\mathbf{k}_2}} \quad (5.3)$$

Se comparamos as equações (5.1) e (5.2), encontramos que os coeficientes que fornecem a intensidade da interação de 3-mágnons é dado por:

$$C_{lmn}^{(3M)} \equiv C^{(3M)} = \pi\mu^2 \left(\frac{2SN}{V^2} \right)^{1/2} f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}) \quad (5.4)$$

5.1.1 Elementos matriciais do Hamiltoniano de 3-mágnons para os processos de confluência e splitting

Processos de confluência

Para calcular a taxa de relaxação num processo de confluência, vamos supor que temos dois estados, um inicial denotado abreviadamente por $|i\rangle$ e outro final denotado por $|f\rangle$. O estado final é produto da criação de um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_3$, devido à aniquilação de dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente. Definimos os dois estados, como $|i\rangle = |n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, n_{\mathbf{k}_3}\rangle$ e $|f\rangle = |n_{\mathbf{k}_1}-1, n_{\mathbf{k}_2}-1, n_{\mathbf{k}_3}+1\rangle$ respectivamente. Portanto, os elementos matriciais do Hamiltoniano $\mathcal{H}^{(3M)}$, usando os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ os quais denotamos por $\mathcal{H}_{if} = \langle f | \mathcal{H}^{(3M)} | i \rangle$, são iguais a:

$$\mathcal{H}_{if}^{(c)} = \sum_{lmn} C_{lmn}^{(3M)} \langle n_{\mathbf{k}_1}-1, n_{\mathbf{k}_2}-1, n_{\mathbf{k}_3}+1 | a_n^\dagger a_m^\dagger a_l | n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, n_{\mathbf{k}_3} \rangle \Delta(\mathbf{k}_l - \mathbf{k}_m - \mathbf{k}_n) + c.c \quad (5.5)$$

Se observa da equação (5.5) que para todos os valores possíveis de l , m e n , a primeira soma é nula, isto é devido à forma como foi definido o estado final. Para o segundo termo que corresponde à parte *c.c*, temos duas contribuições diferente de zero. Uma para os valores de $l = 3$, $n = 1$ e $m = 2$, ou seja o termo proporcional a $a_3^\dagger a_1 a_2$, e outra para os valores de $l = 3$, $n = 2$ e $m = 1$, correspondente ao termo proporcional a $a_3^\dagger a_2 a_1$. Assim, usando estes argumentos obtemos que o elemento matriciais não nulo fica.

$$\mathcal{H}_{if}^{(c)} = (C_{312}^* + C_{321}^*) \sqrt{n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2} (n_{\mathbf{k}_3} + 1)} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (5.6)$$

Processos de splitting

Ao considerar o caso de um processo de espalhamento de 3-mágnons de splitting, observamos que existe uma semelhança entre as estruturas algébrica das equações, e também da geometria das interações. Portanto, definimos os estados inicial $|i\rangle$ e final $|f\rangle$, para esta nova situação como: $|i\rangle = |n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, n_{\mathbf{k}_3}\rangle$ e $|f\rangle = |n_{\mathbf{k}_1}-1, n_{\mathbf{k}_2}+1, n_{\mathbf{k}_3}+1\rangle$. Assim, os elementos matriciais do Hamiltoniano são dados pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_{if}^{(s)} = \sum_{lmn} C_{lmn} \langle n_{\mathbf{k}_1}-1, n_{\mathbf{k}_2}+1, n_{\mathbf{k}_3}+1 | a_n^\dagger a_m^\dagger a_l | n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, n_{\mathbf{k}_3} \rangle \Delta(\mathbf{k}_l - \mathbf{k}_m - \mathbf{k}_n) + c.c \quad (5.7)$$

Também observamos que para todos os valores possíveis l , m e n , haverá contribuições diferentes de zero somente quando os valores para os índices sejam: $l = 1$, $n = 3$ e $m = 2$ para o termo proporcional a $a_1 a_2^\dagger a_3^\dagger$ ou quando $l = 1$, $n = 2$ e $m = 3$, que corresponde ao termo proporcional a $a_1 a_3^\dagger a_2^\dagger$. Portanto a contribuição não nula num processo de splitting, conduz aos elementos matriciais seguintes.

$$\mathcal{H}_{if}^{(s)} = (C_{132} + C_{123}) \sqrt{n_{\mathbf{k}_1}(n_{\mathbf{k}_2}+1)(n_{\mathbf{k}_3}+1)} \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \quad (5.8)$$

Por outro lado, os processos inversos nos quais as direções das setas são invertidas e fazem contribuição aos elementos de matriz, são obtidos de forma similar como se obtive as expressões (5.7) e (5.8). A representação pictórica desses processos são ilustrados pela figura 5.1.

5.1.2 Dinâmica da relaxação de 3-mágnons

Para calcular as taxas de relaxação de 3-mágnons, vamos supor que as populações de mágnons caracterizadas por vetores de onda $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$ são denotadas por $n_{\mathbf{k}_1}$, $n_{\mathbf{k}_2}$ e $n_{\mathbf{k}_3}$ respectivamente. Também, $\bar{n}_{\mathbf{k}_1}$, $\bar{n}_{\mathbf{k}_2}$ e $\bar{n}_{\mathbf{k}_3}$ representaram as mesmas populações quando elas alcançam o equilíbrio térmico. Portanto, toda a dinâmica de uma das populações é obtida a partir de somar sobre todas as transições possíveis entre os estados inicial $|i\rangle$ e final $|f\rangle$ em cada um dos dois processos. Assim, precisamos aplicar as regras da mecânica quântica para calcular as probabilidades de transição PT . Então definimos a

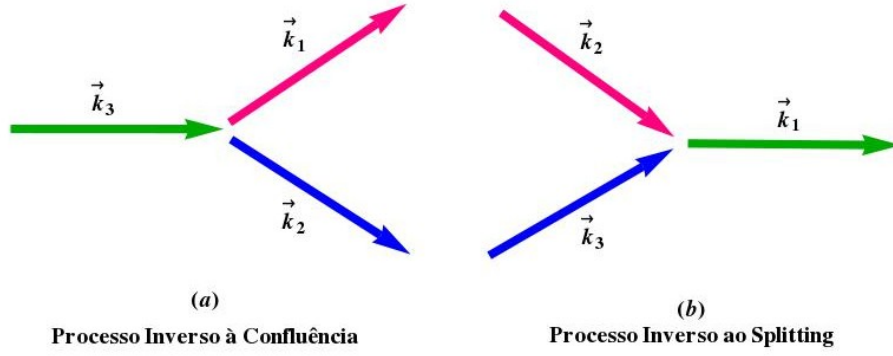


Figura 5.1: Ilustração geométrica dos processos de espalhamento de 3-mágnons inversos aos processo de confluência e splitting ilustrados na figura 1.14.

taxa de deslocamento no tempo de uma das populações de mágnons, digamos de $n_{\mathbf{k}_1}$, de seu estado de equilíbrio térmico como:

$$\frac{dn_{\mathbf{k}_1}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \left(PT_{n_{\mathbf{k}_1}+1} - PT_{n_{\mathbf{k}_1}-1} \right) \quad (5.9)$$

onde $PT_{n_{\mathbf{k}_1}+1}$ representa a probabilidade de transição de que a população de mágnons $n_{\mathbf{k}_1}$ aumente em um pela criação de um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_1$ ao acontecer uma transição entre os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ respectivamente. $PT_{n_{\mathbf{k}_1}-1}$ representa o contrario. Assim, de acordo com a teoria de perturbações do tempo, em um processo de transição entre os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ onde a energia é conservada, ocorre com uma probabilidade igual a:

$$PT_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \mathcal{H}^{(int)} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (5.10)$$

As equações (5.9) e (5.10) são válidas para qualquer número de partículas interagentes e serão aplicadas para os casos de interação de 3-mágnons e 4-mágnons. Usando as equações (5.6), (5.8) em (5.10) e substituindo o resultado na equação (5.9), obtemos que a taxa de deslocamento no tempo da população de mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ é dada por:

$$\frac{dn_1}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} |C_{(c,s)}^{(3M)}|^2 n_{(c,s)} \delta(\hbar\omega_{(c,s)}) \Delta(\mathbf{k}_{(c,s)}) \quad (5.11)$$

onde os índices (c, s) se referem a processos de confluência e splitting respectivamente. Assim, ao considerar os processos inversos, encontramos para o caso de confluência que $n_c = n_{\mathbf{k}_3}(n_{\mathbf{k}_2} + 1)(n_{\mathbf{k}_1} + 1) - n_{\mathbf{k}_1}n_{\mathbf{k}_2}(n_{\mathbf{k}_3} + 1)$. Supondo que as populações de mágnons $n_{\mathbf{k}_2}$ e $n_{\mathbf{k}_3}$ mantêm seus valores do equilíbrio térmico $\bar{n}_{\mathbf{k}_2}$ e $\bar{n}_{\mathbf{k}_3}$ respectivamente, obtemos que $n_c = -(n_{\mathbf{k}_2} - \bar{n}_{\mathbf{k}_2})(n_{\mathbf{k}_1} - \bar{n}_{\mathbf{k}_1})$. A conservação da energia que é argumento da função delta de Dirac na equação (5.11) é abreviada por, $\hbar\omega_c := \hbar\omega_{\mathbf{k}_3} - \hbar\omega_{\mathbf{k}_1} - \hbar\omega_{\mathbf{k}_2}$. Da mesma maneira, a conservação do momento é representada por meio de $\mathbf{k}_c := \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$. Estes argumentos são igualmente aplicados para o caso de splitting. Além do mais, para as duas situações encontramos que o módulo ao quadrado dos coeficientes da interação são iguais, isto é, $|C_c^{(3M)}|^2 = |C_s^{(3M)}|^2 = |C_{321} + C_{312}|^2 \equiv |C^{(3M)}|^2$. De acordo a isto, a equação que governa a dinâmica populacional de estados de mágnons com vetores de onda $\mathbf{k}_1$, para processos de confluência e splitting é dada por:

$$\frac{dn_{\mathbf{k}_1}}{dt} = -\frac{1}{\tau_{c,s}}(n_{\mathbf{k}_1} - \bar{n}_{\mathbf{k}_1}) \quad (5.12)$$

Os valores de $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ no equilíbrio térmico correspondem à função de distribuição de Bose-Einstein, $\bar{n}_{\mathbf{k}} = (\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}) - 1)^{-1}$. Então usando os argumentos expostos anteriormente, e depois de fazer as simplificações respectivas, encontramos que as expressões para $\tau_{c,s}^{-1}$ são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_c} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} |C^{(3M)}|^2 (\bar{n}_2 - \bar{n}_3) \delta(\hbar\omega_c) \Delta(\mathbf{k}_c) \\ \frac{1}{\tau_s} &= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} |C^{(3M)}|^2 (\bar{n}_3 + \bar{n}_2 + 1) \delta(\hbar\omega_s) \Delta(\mathbf{k}_s) \end{aligned} \quad (5.13)$$

Usando a conservação do momento simplificamos as somas dadas em (5.13):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_c} &= \frac{2\pi}{\hbar} (e^{\hbar\beta\omega_1} - 1) \sum_{\mathbf{k}_2} \frac{|C^{(3M)}|^2 e^{\hbar\beta\omega_2}}{(e^{\hbar\beta\omega_2} - 1)(e^{\hbar\beta\omega_{1+2}} - 1)} \delta(\hbar\omega_{1+2} - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2) \\ \frac{1}{\tau_s} &= \frac{\pi}{\hbar} (e^{\hbar\beta\omega_1} - 1) \sum_{\mathbf{k}_2} \frac{|C^{(3M)}|^2}{(e^{\hbar\beta\omega_2} - 1)(e^{\hbar\beta\omega_{1-2}} - 1)} \delta(\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_{1-2}) \end{aligned} \quad (5.14)$$

Transformamos as somas dadas em (5.14) em integrais, e a integração em k é estendida até o limite da primeira zona de Brillouin. Em consequência, a representação integral das taxas de relaxação para os dois processos de espalhamento de 3-mágnons considerados, são expressadas como:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_c} &= \frac{V}{4\pi^2\hbar}(e^{\hbar\beta\omega_1} - 1) \int d^3\mathbf{k}_2 \frac{|C^{(3M)}|^2 e^{\hbar\beta\omega_2}}{(e^{\hbar\beta\omega_2} - 1)(e^{\hbar\beta\omega_{1+2}} - 1)} \delta(\hbar\omega_{1+2} - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2) \\ \frac{1}{\tau_s} &= \frac{V}{8\pi^2\hbar}(e^{\hbar\beta\omega_1} - 1) \int d^3\mathbf{k}_2 \frac{|C^{(3M)}|^2}{(e^{\hbar\beta\omega_2} - 1)(e^{\hbar\beta\omega_{1-2}} - 1)} \delta(\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_{1-2})\end{aligned}\quad (5.15)$$

As integrais dadas em (5.15) são simplificadas ainda mais usando o princípio de conservação da energia, isto permite expressar os integrandos em termos de funções mais simples. Assim depois de alguns procedimentos adicionais essas expressões ficam:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_c} &= \frac{V}{8\pi^2\hbar^2} \sinh\left[\frac{\hbar\beta\omega_1}{2}\right] \int d^3k_2 |C^{(3M)}|^2 \operatorname{csch}\left[\frac{\beta\hbar\omega_2}{2}\right] \operatorname{csch}\left[\frac{\beta\hbar\omega_{1+2}}{2}\right] \delta(\omega_{1+2} - \omega_1 - \omega_2) \\ \frac{1}{\tau_s} &= \frac{V}{(4\pi\hbar)^2} \sinh\left[\frac{\hbar\beta\omega_1}{2}\right] \int d^3k_2 |C^{(3M)}|^2 \operatorname{csch}\left[\frac{\beta\hbar\omega_2}{2}\right] \operatorname{csch}\left[\frac{\beta\hbar\omega_{1-2}}{2}\right] \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_{1-2})\end{aligned}\quad (5.16)$$

O passo seguinte é obter as expressões que aproximem as integrais dadas em (5.16).

5.1.3 Reaproximando as expressões das taxas de relaxação de 3-mágnons para os processos de confluência e splitting

Retomando as expressões integrais das taxas de relaxação dadas em (5.16), vemos que obter uma solução simples é imediata resulta uma tarefa complicada. Podemos observar, que a principal dificuldade vem da função delta que garante a conservação da energia nos processos de espalhamentos. Para resolver esse problema vamos aproximar o argumento da função delta de tal forma que obteremos uma expressão simplificada que facilita as estimações numéricas de τ_c^{-1} e τ_s^{-1} . Especificamente, as duas complicações maiores estão nos argumentos das frequências ω_{1+2} e ω_{1-2} , posto que seus subíndices estão indicando que devemos tomar as magnitudes da soma dos vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ dos mágnons interagentes, como também a diferença desses vetores. De

acordo com o anterior, tomaremos uma aproximação da frequência $\omega_{\mathbf{k}}$ dada na equação (1.63). Por simplicidade, vamos fazer $\omega_0 = \gamma H_0$ e $\omega_A = 2zSJ/\hbar$, onde o valor empregado para ω_A corresponde ao obtido do ajuste da seção (1.3.2).

A seguir, reescreveremos a equação (1.63) supondo que o valor de campo magnético aplicado H_0 é diferente de zero e também que $\gamma_{\mathbf{k}} \neq 1$. Portanto, podemos escrever a relação de dispersão $\omega_{\mathbf{k}}$ da seguinte maneira.

$$\omega_{\mathbf{k}} = [\omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})] \left(1 + \frac{\omega_M \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}}}{\omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})} \right)^{1/2} \quad (5.17)$$

De acordo com a condição para escrever à equação (5.17), a faixa de valores de frequência na qual $\omega_M \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}} > \omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})$ é muito estreita. Assim, tomaremos a situação contrária, de forma que ficarmos fora dessa faixa de valores. Em acordo com isto, o fator da raiz quadrada em (5.17) pode ser aproximado como:

$$\left(1 + \frac{\omega_M \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}}}{\omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})} \right)^{1/2} \approx 1 + \frac{(\omega_M/2)}{\omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})} \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (5.18)$$

Tomando a aproximação (5.18) e substituindo em (5.17), a frequência aproximada que denotaremos por $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ é dada pela equação:

$$\omega_{\mathbf{k}} \approx \omega_{\mathbf{k}}^{(a)} := \omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \omega_M \text{sen}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (5.19)$$

A fim de reafirmar nossa aproximação, vamos comparar à relação de dispersão original e aproximada. Então, faremos quatro gráficos como função do vetor de onda $\mathbf{k}$ de $\omega_{\mathbf{k}}$ com $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ respectivamente.

Na figura 5.2 apresentamos quatro gráficos, em cada um deles desenhamos a $\omega_{\mathbf{k}}$ e $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ para quatro faixas diferentes de valores de $\mathbf{k}$. Em relação a $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ ha oito curvas, cada uma de las para um valor fixo de campo magnético aplicado H_0 . No gráfico 5.2 (a), as relações de dispersão exatas e aproximadas são desenhadas na faixa de valores de $\mathbf{k}$ igual a $0 \leq x \leq 0.03$. As curvas vermelhas que correspondem a $\omega_{\mathbf{k}}$ são tais que a

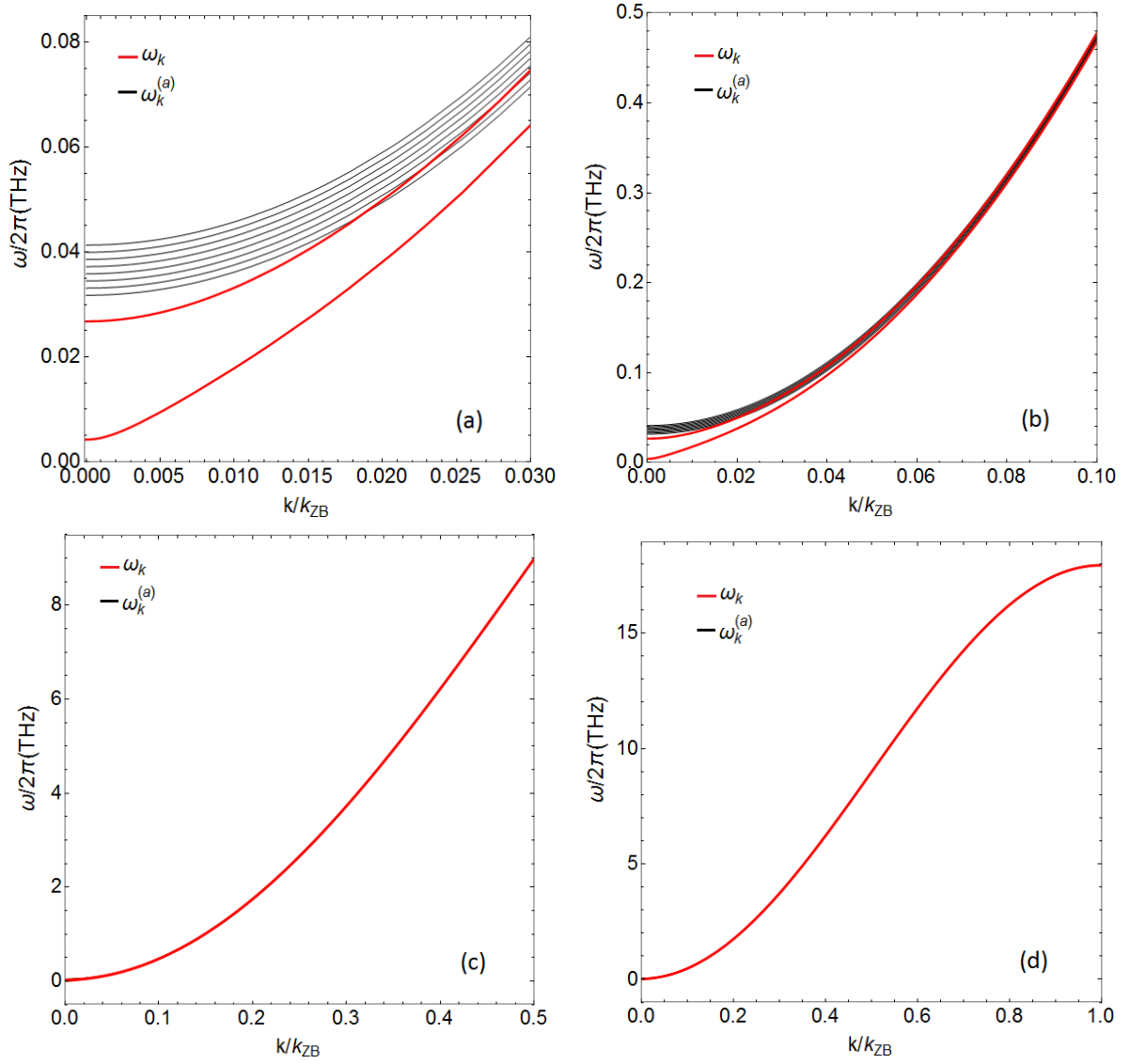


Figura 5.2: Comparação das relações de dispersão $\omega_{\mathbf{k}}$ e $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ definidas pelas equações (5.17) e (5.19). Se assume que as duas expressões são aplicáveis ao YIG na primeira zona de Brillouin. Para realizar as estimativas numéricas das taxas de relaxação, é necessário fazer uma comparação entre estas relações. Por esta razão, são desenhadas como uma função do vetor de onda reduzido k/k_{ZB} , e assim poder observar seus comportamentos em função de k .

primeira curva subindo ao longo do eixo vertical é para um valor de campo magnético aplicado de 0.10 kOe. A segunda curva é para um valor de campo magnético de 3.50 kOe. As curvas pretas correspondem a $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$, e ha oito em total, a primeira é para um valor de campo magnético aplicado de 0.10 kOe, para as curvas seguintes, o valor de campo magnético aumenta em passos de 0.49 kOe aproximadamente até alcançar a curva superior onde o campo aplicado é 3.50 kOe. Nos gráficos 5.2 (b)-(d) apresentamos também as curvas de $\omega_{\mathbf{k}}$ e $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ para os mesmos valores de campo magnético aplicado, mas as faixas de valores de $\mathbf{k}$ são iguais a $0 \leq x \leq 0.1$, $0 \leq x \leq 0.5$ e $0 \leq x \leq 1.0$ respectivamente. Então, para estes últimos três gráficos podemos observar que somente em 5.2 (b), na faixa de valores $0 \leq x \leq 0.1$ existe uma diferença clara nas relações de dispersão $\omega_{\mathbf{k}}$ e $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$. Para as curvas restantes dos gráficos 5.2 (c)-(d), a diferença já não é perceptível e só aparece uma curva, ou seja a vermelha. Todas as curvas da figura 5.2 foram feitas para o ângulo de dispersão $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$. Com isto podemos concluir que para $x > 0.05$ e qualquer valor de campo magnético aplicado podemos tomar a $\omega_{\mathbf{k}}^{(a)}$ em lugar de $\omega_{\mathbf{k}}$.

Processos de confluência

Com as considerações feitas anteriormente, podemos reescrever de forma aproximada os argumentos das funções delta das taxas de relaxação. A aparição de $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ e $|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$ nas expressões que definem a ω_{1+2} e ω_{1-2} respectivamente em (5.16) requer calcular outras quantidades adicionais, como por exemplo os ângulos de espalhamentos dos mágnons resultantes na interação. Naturalmente, isto também exige fazer algumas aproximações além das consideradas. Então para começar, consideremos primeiro o caso de confluência, mas antes disso, vamos determinar o ângulo que faz um mágnon de vetor de onda igual $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ em relação ao eixo z . Portanto, imagine que dois mágnons com momentos bem definidos e caracterizados pelos vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ convergem num mesmo ponto O , formando um mágnon cujo momento é igual a soma dos interagentes e seu vetor de onda resultante é $\mathbf{k}_s \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$. A situação geométrica que descreve esta interação é ilustrada na figura 5.3. Denotamos por $(k_i, \theta_i, \varphi_i)$ as coordenadas polares esféricas associadas ao mágnon i -ésimo onde $i = 1, 2$. Também,

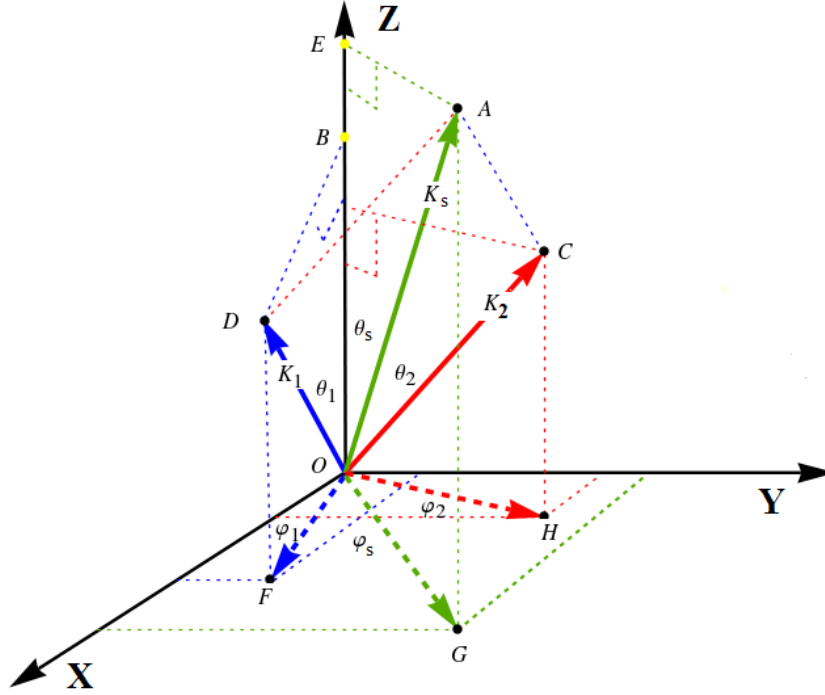


Figura 5.3: Ilustração geométrica da interação de dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ no espaço 3-dimensional para formar um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_s$. O processo em consideração é sujeito ao princípio conservação do um momento linear.

denotamos a magnitude do vetor de onda do mágnon resultante na interação como k_s e o ângulo que existe entre $\mathbf{k}_s$ e o eixo z é denotado por θ_s . Além disso, o ângulo que existe entre os vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ dos mágnons interagentes é denotado por σ . Adicionalmente, a magnitude do vetor de onda $\mathbf{k}_s$ em termos de $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ é dada por $k_s = (k_1^2 + 2k_1k_2 \cos \sigma + k_2^2)^{1/2}$. O passo a seguir, consiste em calcular o seno de θ_s , para depois escrever de forma aproximada a conservação da energia.

Remetendo-nos à figura 5.3, se observa que o seno do ângulo θ_s pode ser determinado dividendo o comprimento do segmento de reta $|\overline{EA}|$ pelo comprimento do segmento de reta $|\overline{OA}|$. Assim, temos que $\sin \theta_s = |\overline{EA}|/|\overline{OA}|$. Também pode ser deduzido com facilidade da figura 5.3 que os comprimentos dos segmentos retas $|\overline{EA}|$ e $|\overline{OG}|$ são os mesmos. Usando o teorema do cosseno podemos determinar o comprimento de $|\overline{OG}|$,

pois empregando os segmentos de retas $|\overline{OF}|$ e $|\overline{OH}|$ encontramos que:

$$|\overline{OG}|^2 = |\overline{OF}|^2 + 2|\overline{OF}||\overline{OH}| \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + |\overline{OH}|^2 \quad (5.20)$$

Projetando os vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ no plano XY obtemos que $|\overline{OF}| = k_1 \sin \theta_1$ e $|\overline{OH}| = k_2 \sin \theta_2$. Então substituindo na expressão (5.20) encontramos que:

$$|\overline{OG}|^2 = k_1^2 \sin^2 \theta_1 + 2k_1 k_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \sin^2 \theta_2 \quad (5.21)$$

Usando as equações (5.20) e (5.21) na definição $\sin \theta_s$ obtemos que:

$$\sin^2 \theta_s = \left(\frac{k_1^2 \sin^2 \theta_1 + 2k_1 k_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \sin^2 \theta_2}{k_1^2 + 2k_1 k_2 \cos \sigma + k_2^2} \right) \quad (5.22)$$

Na equação (5.22) aparece $\cos \sigma$, esta quantidade depende de todos os ângulos polares e está definida como $\cos \sigma = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ e será usada para escrever a aproximação da conservação da energia para os dois processos de espalhamento de 3-mágnons. Podemos observar que nos integrandos das taxas de relaxação aparece $\cos \theta_2$, esta é uma das variáveis de integração e aproveitaremos essa variável para eliminar as funções delta de Dirac. Então, para fazer as integrações numéricas e simplificações adicionais, usaremos u em lugar de $\cos \theta_2$.

Por outro lado, a expressão que define a $\sin \theta_s$ é relativamente complicada e aparece no argumento de uma das deltas de Dirac da conservação da energia, então para eliminá-las, é necessário aproximar seu quadrado, por uma expressão mais simples. Para fazer isso, vamos primeiro aproximar o denominador da expressão (5.22). Note então que se $k_1 \neq 0$ e $k_2 \neq 0$, sempre será possível expandir o denominador como:

$$\frac{1}{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos \sigma} = \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^4} \sin^2 \sigma / 2 + \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1 + k_2)^6} \sin^4 \sigma / 2 + \dots \quad (5.23)$$

A pesar que a convergência da expressão (5.23) está garantida sempre que $k_1 \neq 0$ e $k_2 \neq 0$, ela convergirá muito devagar se $k_1 = k_2$ e $\sigma = \pi$. Então, se assumimos que

essas condições não correspondem a nosso caso, podemos em boa aproximação tomar:

$$\frac{1}{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1k_2 \cos \sigma} \approx \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^4} \sin^2 \sigma / 2 + \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^6} \sin^4 \sigma / 2 \quad (5.24)$$

Usando a relação $\sin^2 \sigma / 2 = (1 - \cos \sigma) / 2$, podemos escrever sem perda de generalidade a equação 5.24 como:

$$\left(k_1^2 + k_2^2 + 2k_1k_2 \cos \sigma \right)^{-1} \approx \Lambda_0^{(c)}(k_1, k_2) - 2\Lambda_1^{(c)}(k_1, k_2) \cos \sigma + \Lambda_2^{(c)}(k_1, k_2) \cos^2 \sigma \quad (5.25)$$

onde as funções $\Lambda_i^{(c)}(k_1, k_2)$ com $i = 0, 1, 2$ que aparecem em (5.25) são definidas pelas expressões seguintes:

$$\begin{aligned} \Lambda_0^{(c)}(k_1, k_2) &= \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{2k_1k_2}{(k_1 + k_2)^4} + \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^6} \\ \Lambda_1^{(c)}(k_1, k_2) &= \frac{k_1k_2}{(k_1 + k_2)^4} + \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^6} \\ \Lambda_2^{(c)}(k_1, k_2) &= \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^6} \end{aligned} \quad (5.26)$$

Substituindo a expressão (5.25) em (5.22) obtemos o seguinte:

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta_s \approx & \left(k_1^2 \sin^2 \theta_1 + 2k_1k_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \sin^2 \theta_2 \right) \left(\Lambda_0^{(c)}(k_1, k_2) \right. \\ & \left. - 2\Lambda_1^{(c)}(k_1, k_2) \cos \sigma + \Lambda_2^{(c)}(k_1, k_2) \cos^2 \sigma \right) \end{aligned} \quad (5.27)$$

Lembremos que $\cos \sigma$ depende de $\cos \theta_2$ e também de $\sin \theta_2$. Além do mais, vamos usar a $u = \cos \theta_2$ como variável de integração para eliminar a função delta de Dirac que aparece nos integrandos de τ_c^{-1} e τ_s^{-1} . Também, resulta obvio que $\sin \theta_2$ é uma função de u e pode ser escrita como uma serie infinita de potencias em u , mas é impossível tomar todos esses termos. Para resolver essa dificuldade, o que podemos fazer é uma aproximação de $\sin \theta_2$ por meio de um polinômio de segundo grau em $u = \cos \theta_2$, é dizer:

$$\sin \theta_2 = \sqrt{1 - \cos^2 \theta_2} \approx a + b \cos \theta_2 + c \cos^2 \theta_2 := p(\cos \theta_2) \quad (5.28)$$

Em forma muito geral, o polinômio aproximante $p(u) \equiv P_a(\cos \theta_2)$, é um artifício pen-

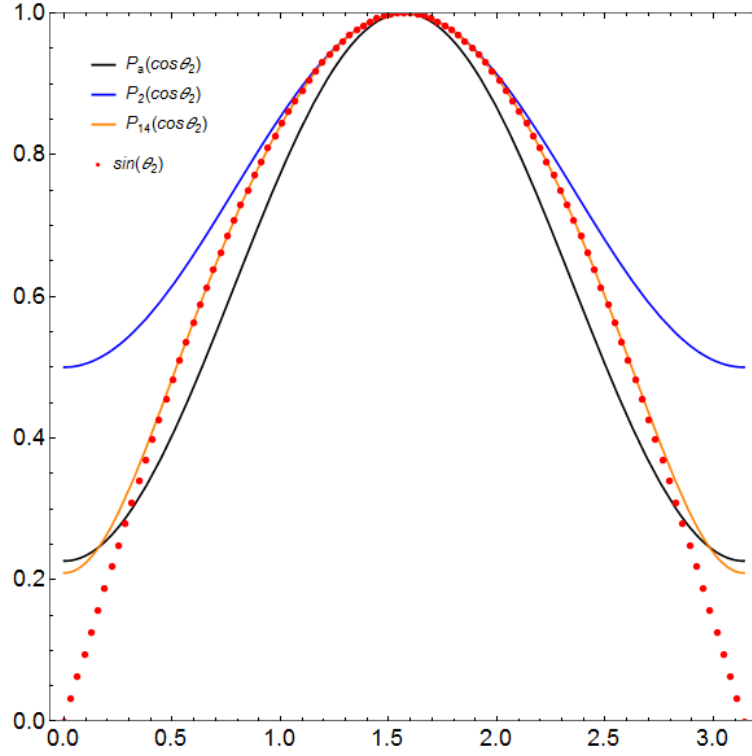


Figura 5.4: Comparação da função $\sin\theta_2$ e os polinômios de Taylor $P_2(\cos\theta_2)$ e $P_{14}(\cos\theta_2)$ e também com o polinômio de aproximação $P_a(\cos\theta_2)$ no intervalo $[0, \pi]$.

sado com o propósito de ter uma expressão simples que aproxime à função $\sin\theta_2 = \sqrt{1 - \cos^2\theta_2}$ em $[0, \pi]$, tal que a conservação da energia e todas as expressões relacionadas fiquem aproximadas o melhor possíveis. Portanto, ajustaremos os coeficientes a , b e c da equação (5.28) no intervalo dito. De acordo com isto, podemos criar uma expressão aproximada e além disso tratável para $\sin^2\theta_s$. Uma razão adicional, é que vamos também a limitar a interação dos mágnons para ângulos tais que $0 < \sigma \lesssim \pi$. Então com a aproximação tomada vamos ter que $\cos\sigma$ e $\cos^2\sigma$ ficam:

$$\begin{aligned} \cos\sigma &\approx u \cos\theta_1 + p(u) \sin\theta_1 \cos(\Delta\varphi) \\ \cos^2\sigma &\approx u^2 \cos^2\theta_1 + up(u) \sin(2\theta_1) \cos(\Delta\varphi) + (1 - u^2) \sin^2\theta_1 \cos^2(\Delta\varphi) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Consideremos agora a expansão da função $\sin\theta_2 = \sqrt{1 - \cos^2\theta_2}$ numa serie de potencias em $\cos\theta_2$, ao redor do ponto $\cos\theta_2 = 0$. Denotamos os polinomios de Taylor de grau dois e catorze da expansão como $P_2(\cos\theta_2)$ e $P_{14}(\cos\theta_2)$ respectivamente. Esses

polinômios estão definidos pelas expressões seguintes:

$$\begin{aligned}
P_2(\cos \theta_2) &= 1 - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_2 \\
P_{14}(\cos \theta_2) &= 1 - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_2 - \frac{1}{8} \cos^4 \theta_2 - \frac{1}{16} \cos^6 \theta_2 - \frac{5}{128} \cos^8 \theta_2 \\
&\quad - \frac{7}{256} \cos^{10} \theta_2 - \frac{21}{1024} \cos^{12} \theta_2 - \frac{33}{2048} \cos^{14} \theta_2
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Empregando o método de mínimos quadrados, o melhor ajuste dos parâmetros a , b e c da expressão (5.28) à função $\sin \theta_2$ em $[0, \pi]$ é: $a = 1.000000$, $b = 6.572300 \times 10^{-9}$ e $c = -0.773625$, os valores obtidos estão numa precisão numérica simples. Os gráficos da figura 5.4, compara as funções $\sin \theta_2$, $P_2(\cos \theta_2)$, $P_{14}(\cos \theta_2)$ e $P_a(\cos \theta_2)$ respectivamente. Dali, observamos que nosso polinômio aproximante $p(u)$ resulta ser uma aproximação melhor do que os primeiros polinômios de Taylor na serie de potencias em $\cos \theta_2$. Portanto, voltando a nossa discussão inicial da aproximação de $\sin^2 \theta_s$, agora usaremos as aproximações para $\cos \sigma$ e $\cos^2 \sigma$ dadas em (5.29) e substituído-as na equação (5.28), obtemos um polinômio em u que é igual a:

$$k_1^2 \sin^2 \theta_1 + 2k_1 k_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \sin^2 \theta_2 \approx J_0^{(c)} + J_1^{(c)} u + J_2^{(c)} u^2 \tag{5.31}$$

onde as funções $J_0^{(c)}$, $J_1^{(c)}$ e $J_2^{(c)}$ são definidas por:

$$\begin{aligned}
J_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= k_2^2 + k_1^2 \sin^2 \theta_1 + 2a k_1 k_2 \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\
J_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= 2b k_1 k_2 \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\
J_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= 2c k_1 k_2 \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - k_2^2
\end{aligned} \tag{5.32}$$

Para abreviar um pouco a notação, representamos o conjunto de variáveis angulares polares como $\boldsymbol{\lambda} = (k_1, k_2, \theta_1, \varphi_1, \varphi_2)$. Adicionalmente, o lado direito da equação (5.25) pode ser simplificado e expressar-se como função de u , ficando:

$$A_0^{(c)} - 2A_1^{(c)} \cos \sigma + A_2^{(c)} \cos^2 \sigma = L_0^{(c)} + L_1^{(c)} u + L_2^{(c)} u^2 + L_3^{(c)} u^3 \tag{5.33}$$

onde as funções $L_0^{(c)}$, $L_1^{(c)}$, e $L_2^{(c)}$ e $L_3^{(c)}$ são definidas por:

$$\begin{aligned}
L_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= \Lambda_0^{(c)} - 2a\Lambda_1^{(c)}\sin\theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \Lambda_2^{(c)}\sin^2\theta_1 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2) \\
L_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= a\Lambda_2^{(c)}\sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - 2\Lambda_1^{(c)}(\cos\theta_1 + b\sin\theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)) \\
L_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= \Lambda_2^{(c)}(\cos^2\theta_1 + b\sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - \sin^2\theta_1 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2)) \\
&\quad - 2c\Lambda_1^{(c)}\sin\theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\
L_3^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= c\Lambda_2^{(c)}\sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Agora vamos escrever a $\sin^2\theta_s$ como um polinômio em u , para isso voltamos até a equação (5.27). Então, de acordo com os procedimentos anteriores obtemos:

$$\sin^2\theta_s \approx N_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + N_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})u + N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})u^2 + O(u^3) \tag{5.35}$$

onde as novas funções $N_i^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})$ são definidas por:

$$\begin{aligned}
N_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) \\
N_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) \\
N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})
\end{aligned} \tag{5.36}$$

Agora falta fazer uma última aproximação para inciar as avaliações numéricas das taxas de relaxação no processo de confluência. Especificamente vamos procurar uma expressão aproximada para $\gamma_{\mathbf{k}_s}$. Então, note primeiro que a magnitude do vetor de onda $\mathbf{k}_s$ pode ser escrita como:

$$k_s = (k_1 + k_2) \left(1 - \kappa_c^2 \sin^2\sigma/2\right)^{1/2} \tag{5.37}$$

onde o fator κ_c está definido por $\kappa_c = 2\sqrt{k_1 k_2}/(k_1 + k_2)$. Podemos novamente fazer uma aproximação, esta vez para a raiz quadrada dada em (5.37). Pode ser inferido que sem importar os valores de k_1 , k_2 e σ o lado direito de (5.37) está bem definido sempre que $k_1 \neq 0$ e $k_2 \neq 0$, pois todas as quantidades são reais. Então expandindo a raiz quadrada em série e tomando os primeiros três termos da expansão, podemos em

boa aproximação tomar k_s como.

$$k_s \approx (k_1 + k_2) - \frac{2k_1k_2}{(k_1 + k_2)}\sin^2\sigma/2 - \frac{2k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^3}\sin^4\sigma/2 \quad (5.38)$$

Usando a relação $\sin^2\sigma/2 = (1 - \cos\sigma)/2$ a aproximação (5.38) é transformada em:

$$k_s \approx X_0^{(c)}(k_1, k_2) + X_1^{(c)}(k_1, k_2) \cos\sigma - X_2^{(c)}(k_1, k_2) \cos^2\sigma \quad (5.39)$$

onde as funções $X_i^{(c)}(k_1, k_2)$ para $i = 0, 1, 2$ são definidas pelo conjunto de expressões seguintes:

$$\begin{aligned} X_0^{(c)}(k_1, k_2) &= (k_1 + k_2) - \frac{k_1k_2}{(k_1 + k_2)} - \frac{k_1^2k_2^2}{2(k_1 + k_2)^3} \\ X_1^{(c)}(k_1, k_2) &= \frac{k_1k_2}{(k_1 + k_2)} \left(1 + \frac{k_1k_2}{2(k_1 + k_2)^2} \right) \\ X_2^{(c)}(k_1, k_2) &= \frac{k_1^2k_2^2}{2(k_1 + k_2)^3} \end{aligned} \quad (5.40)$$

Usando as definições de $\cos\sigma$ e $\cos^2\sigma$ dadas em (5.29), podemos escrever (5.39) com ajudas da expressões (5.40) como:

$$k_s \approx Y_c(\boldsymbol{\lambda}) + O(u) \quad (5.41)$$

onde $O(u)$ contem as potencias de u e pode ser desprezado porque $|u| \leq 1$ e além disso os termos que aparecem ali todos são menores que um. Também, a função $Y_c(\boldsymbol{\lambda})$ está definida como:

$$Y_c(\boldsymbol{\lambda}) = X_0^{(c)} + aX_1^{(c)}\sin\theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - X_2^{(c)}\sin^2\theta_1 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (5.42)$$

Lembrando que $\gamma_{k_s} = \cos(k_s a)$, podemos usar (5.42) para escrever como uma boa aproximação: $\gamma_{k_s} \approx \cos(Y^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})a)$. Agora temos os elementos suficientes para calcular aproximadamente as taxas de relaxação num processo de espalhamentos de três mágnons para o caso de confluência. O primeiro que faremos é reescrever o argumento da função delta de Dirac que corresponde à conservação da energia. As-

sim usando a expressão (5.19), podemos reescrever a conservação da energia como $\omega_{\mathbf{k}_s} - \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} \approx \omega_{\mathbf{k}_s}^{(a)} - \omega_{\mathbf{k}_1}^{(a)} - \omega_{\mathbf{k}_2}^{(a)}$. Em termos da variável de integração u temos:

$$\omega_{\mathbf{k}_s} - \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} \approx \frac{\omega_M}{2} \left\{ \bar{N}_0(\boldsymbol{\lambda}) + N_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})u + (1 + N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}))u^2 \right\} \quad (5.43)$$

onde a nova função $\bar{N}_0(\boldsymbol{\lambda})$ está definida como:

$$\bar{N}_0(\boldsymbol{\lambda}) := \frac{2\omega_A}{\omega_M}(\gamma_{\mathbf{k}_2} - \gamma_{\mathbf{k}_s}) + N_0^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) - \left(\frac{2\omega_1^{(a)}}{\omega_M} \right) - 1 \quad (5.44)$$

De acordo com o anterior, a delta original da conservação da energia é trocada por outra onde seu argumento é aproximado, isto significa que:

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}_s} - \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2}) \rightarrow \frac{2}{\omega_M |N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + 1|} \delta_a^{(c)}(u^2 - 2B(\boldsymbol{\lambda})u + C(\boldsymbol{\lambda})) \quad (5.45)$$

Resulta obvio que as soluções do polinômio quadrático em u do argumento $\delta_a^{(c)}$ são dadas por:

$$u_0^{(c)} = B(\boldsymbol{\lambda}) + (B^2(\boldsymbol{\lambda}) - C(\boldsymbol{\lambda}))^{1/2}, \quad u_1^{(c)} = B(\boldsymbol{\lambda}) - (B^2(\boldsymbol{\lambda}) - C(\boldsymbol{\lambda}))^{1/2} \quad (5.46)$$

onde as funções $B(\boldsymbol{\lambda})$ e $C(\boldsymbol{\lambda})$ são definidas por:

$$B(\boldsymbol{\lambda}) = -\frac{1}{2} \frac{N_1^{(c)}(\boldsymbol{\lambda})}{N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + 1}, \quad C(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\bar{N}_0(\boldsymbol{\lambda})}{N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + 1} \quad (5.47)$$

De acordo com o procedimento anterior chegamos até:

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}_s} - \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2}) \rightarrow \frac{2}{\omega_M |N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + 1|} \delta_a^{(c)}\left((u - u_0^{(c)})(u - u_1^{(c)})\right) \quad (5.48)$$

Substituindo a expressão (5.48), na taxa de relaxação de 3-Mágnons para o processo

de confluência, τ_c^{-1} ficará aproximada de acordo com:

$$\frac{1}{\tau_c} \approx \frac{V}{4\omega_M \pi^2 \hbar^2} \sinh\left(\frac{\hbar\beta\omega_1}{2}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^{k_{ZB}} dk_2 k_2^2 \int_{-1}^1 du \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2^{(a)}}{2}\right) \times \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_s^{(a)}}{2}\right) \frac{|C^{(3M)}|^2}{|N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}) + 1|} \delta_a^{(c)}\left((u - u_0^{(c)})(u - u_1^{(c)})\right) \quad (5.49)$$

Usando a equação (5.4) junto com a mudança $u = \cos\theta_2$, o termo $|C^{(3M)}|^2$ é transformado da seguinte maneira: $|C^{(3M)}|^2 = (2SN\pi^2\mu^4/V^2)Z(\boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u)$, onde a função $Z(\boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u)$ está definida por:

$$Z(\boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u) = \frac{1}{4} \sin^2 2\theta_1 + u\sqrt{1-u^2} \sin 2\theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + u^2(1-u^2) \quad (5.50)$$

Para simplificar novamente a notação dos argumentos das funções no integrando tomaremos a seguinte abreviação: $(\boldsymbol{\lambda}, u) = (k_1, k_2, \varphi_1, \varphi_2, \theta_1, u) = (\mathbf{k}, \boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u)$. Adicionalmente, lembremos que $\mu = g\mu_B = \hbar\gamma$ e que a magnetização de saturação é definida por meio de $M_s = (g\mu_B SN)/V$. Além disso, usaremos variáveis sem dimensão na integração em k_2 , fazendo $k_2 = xk_{ZB}$ para $0 \leq x \leq 1$, isto último indica que $dk_2 k_2^2 \rightarrow k_{ZB}^3 dx x^2$ e o intervalo de integração $[0, k_{ZB}]$ muda para $[0, 1]$. Em nossa notação de variáveis, fazemos $\mathbf{k} = (k_1, k_2) \rightarrow \mathbf{x} := (\pi y/a, \pi x/a)$. Com istas mudanças percebemos então que $\mu^4/(2\omega_M \hbar^2) \cdot (SN/V) \cdot (\pi^3/a^3) = (\hbar\pi^2\gamma^2/8a^3)$. As mudanças anteriores também serão aplicadas para o caso de splitting. Assim, a taxa de relaxação de 3-mágnons para um processo de confluência é transformada em:

$$\tau_c^{-1} = \frac{\hbar\pi^2\gamma^2}{8a^3} \sinh\left(\frac{\hbar\beta\omega_1}{2}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^1 dx x^2 \left(\frac{\mathcal{E}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_0^{(c)}) + \mathcal{E}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_1^{(c)})}{|u_1^{(c)} - u_0^{(c)}|} \right) \quad (5.51)$$

Onde definimos a $\boldsymbol{\lambda}_x := (\mathbf{x}, \boldsymbol{\varphi}, \theta_1)$ e a função $\mathcal{E}$ por meio da expressão

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\lambda}, u) = \frac{Z(\boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u)}{|N_2^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}_x) + 1|} \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2^{(a)}}{2}\right) \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_s^{(a)}}{2}\right) \quad (5.52)$$

A taxa de relaxação para confluência pode ser escrita em forma mais simples definindo

a integral $I_{conf}(\mathbf{k}_1)$ por meio da expressão:

$$I_{conf}(\mathbf{k}_1) = \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^1 dx x^2 \left(\frac{\mathcal{E}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_0^{(c)}) + \mathcal{E}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_1^{(c)})}{|\sqrt{[B^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}_x)]^2 - C^{(c)}(\boldsymbol{\lambda}_x)}|} \right) \quad (5.53)$$

Depois de usar (5.53) chegamos finalmente ao resultado seguinte:

$$\tau_c^{-1} = \frac{\hbar\pi^2\gamma^2}{16a^3} \sinh\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}_1}}{2K_B T}\right) I_{conf}(\mathbf{k}_1) \quad (5.54)$$

Processos de splitting

Agora faremos o tratamento correspondente ao caso de splitting. Então vamos primeiro a considerar o caso de um mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_1$ que decai em dois mágnons com vetores de onda $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$ respectivamente, como é ilustrado na figura 1.14 (b). Denotamos as coordenadas polares esféricas dos mágnons interagentes no sistema de coordenadas retangulares XYZ da figura 5.5 por $(k_i, \theta_i, \varphi_i)$, onde $i = 1, 2, 3$. O ângulo formado entre o eixo z com o mágnon de vetor de onda $\mathbf{k}_3$ vamos denotá-lo por θ_d em lugar de θ_3 . Para determinar a expressão que define θ_d , projetamos os vetores de onda dos três mágnons no plano xy . A partir da figura 5.5 se observa que $\sin^2\theta_3 \equiv \sin^2\theta_d = |\overline{OC}|^2/|\overline{OD}|^2$. Podemos relacionar os comprimentos dos vetores de onda dos mágnons, com os comprimentos dos segmentos de retas da figura 5.5 de acordo com: $k_3 \equiv k_d = |\overline{OD}|$, $k_2 \sin\theta_2 = |\overline{OA}|$ e $k_1 \sin\theta_1 = |\overline{OB}|$. De acordo com o princípio da conservação do momento temos que $k_3 = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$. Usamos o teorema do cosseno para determinar o comprimento do segmento de reta $|\overline{AB}| = |\overline{OC}|$. Portanto, encontramos que a expressão para $\sin^2\theta_d$ é dada por:

$$\sin^2\theta_d = \left(\frac{k_1^2 \sin^2\theta_1^2 - 2k_1 k_2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \sin^2\theta_2^2}{k_1^2 - 2k_1 k_2 \cos\sigma + k_2^2} \right) \quad (5.55)$$

Na equação (5.55), σ representa o ângulo que existe entre os vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente. Similar ao caso de um processo de confluência, calcular exatamente a taxa de relaxação é uma tarefa impossível pela complexidade envolvida no argumento da função delta de Dirac que garante a conservação da energia. Então o passo seguinte

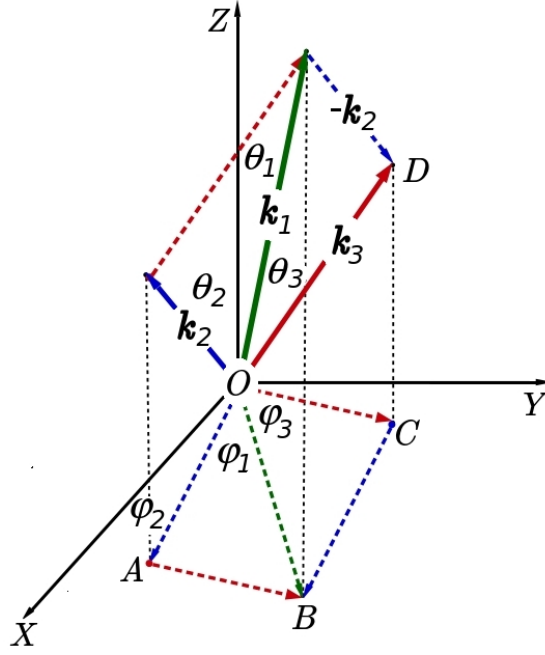


Figura 5.5: Representação pictórica da interação de três mágns num processo de splitting.

consiste em substituir a expressão do argumento da Delta de Dirac da taxa de relaxação do processo de splitting por uma que aproxime a conservação da energia. Para isso aproximamos primeiro o quadrado do seno de θ_d . Primeiro note que o denominador de (5.55) existe para todos os valores de k_1 , k_2 e σ , sempre $k_1 \neq 0$ e $k_2 \neq 0$, também é obvio que o caso $k_1 = k_2 \neq 0$ e $\sigma = 0$ fica completamente excluído, de forma que a existência da expressão é garantida. Usando $\cos \sigma = 1 - 2\sin^2 \sigma/2$, o denominador pode ser escrito como:

$$\frac{1}{k_1^2 - 2k_1k_2 \cos \sigma + k_2^2} = \frac{1}{(k_1 - k_2)^2 + 4k_1k_2 \sin^2 \sigma/2} \quad (5.56)$$

A expressão (5.56) também pode ser escrita como:

$$\frac{1}{k_1^2 - 2k_1k_2 \cos \sigma + k_2^2} = \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} - \frac{4k_1k_2 \sin^2 \sigma/2}{(k_1 - k_2)^4} + \frac{16k_1^2k_2^2 \sin^4 \sigma/2}{(k_1 - k_2)^6} + \dots \quad (5.57)$$

De acordo com as condições estabelecidas acima, a convergência da serie dada pela equação (5.57) está garantida sem importar os valores que tomem as quantidades k_1 ,

k_2 e σ . Usando manipulações algébricas, podemos expressar a equação (5.57) como:

$$\left(k_1^2 - 2k_1k_2 \cos \sigma + k_2^2\right)^{-1} = \Lambda_0^{(s)}(k_1, k_2) + 2\Lambda_1^{(s)}(k_1, k_2) \cos \sigma + \Lambda_2^{(s)}(k_1, k_2) \cos^2 \sigma + \dots \quad (5.58)$$

onde definimos de maneira semelhante ao caso de confluência, às funções $\Lambda_i^{(s)}(k_1, k_2)$ com $i = 0, 1, 2$ como:

$$\begin{aligned} \Lambda_0^{(s)}(k_1, k_2) &= \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} - \frac{2k_1k_2}{(k_1 - k_2)^4} + \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 - k_2)^6} \\ \Lambda_1^{(s)}(k_1, k_2) &= \frac{k_1k_2}{(k_1 - k_2)^4} - \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 - k_2)^6} \\ \Lambda_2^{(s)}(k_1, k_2) &= \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1 - k_2)^6} \end{aligned} \quad (5.59)$$

Restringindo os valores de σ ao intervalo $0 \leq \sigma < \pi$, e levando em consideração que os termos proporcionais a $O(\cos^n \sigma)$ para $n \geq 3$ decaem rápido, podemos tomar como boa aproximação a seguinte expressão:

$$\frac{1}{k_1^2 - 2k_1k_2 \cos \sigma + k_2^2} \approx \Lambda_0^{(s)}(k_1, k_2) + 2\Lambda_1^{(s)}(k_1, k_2) \cos \sigma + \Lambda_2^{(s)}(k_1, k_2) \cos^2 \sigma \quad (5.60)$$

Como σ agora também representa o ângulo relativo entre os vetores $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$, as expressões dadas em (5.29) continuam sendo válidas nesta situação. Então, usando-as podemos reescrever o lado direito da equação (5.60) da seguinte forma:

$$\Lambda_0^{(s)} + 2\Lambda_1^{(s)} \cos \sigma + \Lambda_2^{(s)} \cos^2 \sigma = L_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + L_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u + L_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u^2 + L_3^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u^3 \quad (5.61)$$

onde as funções $L_0^{(s)}$, $L_1^{(s)}$, e $L_2^{(s)}$ e $L_3^{(s)}$ são definidas por:

$$\begin{aligned} L_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= \Lambda_0^{(s)} + 2a\Lambda_1^{(s)} \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \Lambda_2^{(s)} \sin^2 \theta_1 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2) \\ L_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= a\Lambda_2^{(s)} \sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + 2\Lambda_1^{(s)} \left(\cos \theta_1 + b \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \right) \\ L_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= \Lambda_2^{(s)} \left(\cos^2 \theta_1 + b \sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - \sin^2 \theta_1 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2) \right) \\ &\quad + 2c\Lambda_1^{(s)} \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\ L_3^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= c\Lambda_2^{(s)} \sin(2\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned} \quad (5.62)$$

Podemos reescrever de forma aproximada o numerador da expressão (5.55), usando as aproximações dadas em (5.28) e (5.29), assim encontrarmos que:

$$k_1^2 \text{sen}^2 \theta_1 - 2k_1 k_2 \text{sen} \theta_1 \text{sen} \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + k_2^2 \text{sen}^2 \theta_2 = J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u + J_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u^2 \quad (5.63)$$

onde as funções $J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$, $J_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$ e $J_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$ são definidas por:

$$\begin{aligned} J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= k_2^2 + k_1^2 \text{sen}^2 \theta_1 - 2ak_1 k_2 \text{sen} \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\ J_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= - \left(2bk_1 k_2 \text{sen} \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \right) \\ J_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= - \left(k_2^2 + 2ck_1 k_2 \text{sen} \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \right) \end{aligned} \quad (5.64)$$

usando as equações (5.62) e (5.64), encontramos que $\text{sen}^2 \theta_d$ é aproximado pela expressão:

$$\text{sen}^2 \theta_d \approx N_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + N_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u + N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u^2 + O(u^3) \quad (5.65)$$

onde as funções $N_i^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$, para $i = 0, 1, 2$ são definidas por:

$$\begin{aligned} N_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) \\ N_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) \\ N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) &= J_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + J_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})L_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) \end{aligned} \quad (5.66)$$

Para aproximar a expressão da conservação da energia $\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_d$, é necessário aproximar a quantidade $\gamma_{\mathbf{k}_d}$, onde $\mathbf{k}_d = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$. Neste caso podemos escrever k_d como:

$$k_d = (k_1 - k_2) \left(1 - \kappa_d^2 \text{sen}^2 \frac{\sigma}{2} \right)^{1/2} \quad (5.67)$$

onde definimos a quantidade κ_d como $\kappa_d = 2\sqrt{k_1 k_2} / (k_1 - k_2) e^{i\pi/2}$. Os valores mínimos de k_1 e k_2 são zero e seus valores máximos são k_{ZB} respectivamente. Podemos expandir a raiz quadrada em k_d , sempre que $k_1 \neq k_2$, e também que não sejam alcançados simultaneamente seus valores máximos quando $\sigma = \pi$. Se os valores de k_1 e k_2 estão muito perto mas $k_1 \neq k_2$, a convergência está garantida so que é muito devagar. Então supondo que não estamos em nenhum dos casos problemáticos, a expansão em serie de

Taylor para k_d fica:

$$k_d = Z^{(s)}(k_1, k_2) + Q^{(s)}(k_1, k_2) \cos \sigma + \dots \quad (5.68)$$

Com as considerações feitas, os termos que sejam proporcionais a $O(\cos^n \sigma)$ para $n \geq 2$ em (5.68) podem ser desprezados sem dificuldade. Portanto, vamos ter que nossa aproximação é boa e podemos tomar $k_d \approx Z^{(s)}(k_1, k_2) + Q^{(s)}(k_1, k_2) \cos \sigma$. Além disso, se observamos a equação que define a $\cos \sigma$, aparece uma dependência em u que também pode ser desprezada pelo fato que esses termos serão produtos de outros que também são menores do que um. Em adição, as funções que aparecem na aproximação de k_d : $Z^{(s)}(k_1, k_2)$ e $Q^{(s)}(k_1, k_2)$ são definidas por:

$$\begin{aligned} Z^{(s)}(k_1, k_2) &= (k_1 - k_2) + \frac{k_1 k_2}{(k_1 - k_2)} - \frac{k_1^2 k_2^2}{2(k_1 - k_2)^3} + \frac{k_1^3 k_2^3}{2(k_1 - k_2)^5} \\ Q^{(s)}(k_1, k_2) &= \frac{k_1^2 k_2^2}{(k_1 - k_2)^3} - \frac{k_1 k_2}{(k_1 - k_2)} - \frac{3k_1^3 k_2^3}{2(k_1 - k_2)^5} \end{aligned} \quad (5.69)$$

Juntando todos os argumentos anteriores, a aproximação para k_d pode ser escrita como:

$$k_d \approx Z^{(s)}(k_1, k_2) + Q^{(s)}(k_1, k_2) \sin \theta_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (5.70)$$

Um aspecto importante de k_d é que não depende explicitamente de $u = \cos \theta_2$, o qual facilita aproximar melhor a conservação da energia. Vamos usar a equação (5.19) para aproximar a conservação da energia, assim depois de aplica-la obtemos:

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_d} &\approx \omega_{\mathbf{k}_1}^{(a)} - \omega_{\mathbf{k}_2}^{(a)} - \omega_{\mathbf{k}_d}^{(a)} = \frac{\omega_M}{2} \left(\sin^2 \theta_{k_1} - \frac{2\omega_0}{\omega_M} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2\omega_A}{\omega_M} (\gamma_{\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_d} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - 1) - (\sin^2 \theta_{k_2} + \sin^2 \theta_{k_d}) \right) \end{aligned} \quad (5.71)$$

Usando a equação (5.65) e a mudança de variáveis $u = \cos \theta_2$, podemos escrever $\sin^2 \theta_{k_2} + \sin^2 \theta_{k_d}$ como:

$$\sin^2 \theta_{k_2} + \sin^2 \theta_{k_d} = (1 + N_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})) + N_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u + (N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1)u^2 + O(u^3) \quad (5.72)$$

O resultado anterior permite escrever em forma aproximada a conservação da energia como:

$$\omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_d} \approx -\frac{\omega_M}{2} \left\{ (N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1)u^2 + N_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u - \bar{N}_0^{(s)} \right\} \quad (5.73)$$

onde $\bar{N}_0^{(s)}$ está definida pela expressão:

$$\bar{N}_0^{(s)} = \sin^2 \theta_{k_1} + \frac{2\omega_A}{\omega_M} (\gamma_{\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_d} - \gamma_{\mathbf{k}_1}) - \frac{2}{\omega_M} (\omega_0 + \omega_A) - N_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - \frac{2\omega_0}{\omega_M} - 1 \quad (5.74)$$

De acordo com a expressão dada em (5.73), a função delta de Dirac da taxa de relaxação num processo de espalhamento de três mágnons no caso de splitting e dada na equação (5.16) para definir τ_s^{-1} , pode ser reescrita como:

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_d}) \rightarrow \frac{2}{\omega_M |N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1|} \delta_a^{(s)}(u^2 - 2B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u - C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})) \quad (5.75)$$

onde as funções $B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$ e $C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})$ são definidas por:

$$B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) = -\frac{1}{2} \frac{N_1^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})}{N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1}, \quad C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\bar{N}_0^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})}{N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1} \quad (5.76)$$

Podemos expressar o argumento de $\delta_a^{(s)}$ como um polinômio de segundo grau fatorizado na forma $u^2 - 2B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})u - C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) = (u - u_0^{(s)})(u - u_1^{(s)})$. Onde $u_0^{(s)}$ e $u_1^{(s)}$ estão definidas por:

$$u_0^{(s)} = B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) + \sqrt{[B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})]^2 + C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})}, \quad u_1^{(s)} = B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - \sqrt{[B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})]^2 + C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda})} \quad (5.77)$$

De acordo com o procedimento anterior, a expressão (5.75) é transformada em:

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_d}) \rightarrow \frac{2}{\omega_M |N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}) - 1|} \delta_a^{(s)}\left((u - u_0^{(s)})(u - u_1^{(s)})\right) \quad (5.78)$$

Com ajuda da expressão (5.78) fazemos a integração na variável u da integral que define a τ_s^{-1} , assim encontramos.

$$\frac{1}{\tau_s} \approx \frac{\hbar\pi^2\gamma^2}{16a^3} \sinh\left(\frac{\hbar\beta\omega_1}{2}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 dx x^2 \left(\frac{\mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_0^{(s)}) + \mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_1^{(s)})}{|u_0^{(s)} - u_1^{(s)}|} \right) \quad (5.79)$$

Do resultado anterior, encontramos que a taxa de relaxação de para um processo de splitting está dada pela equação:

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{\hbar\pi^2\gamma^2}{32a^3} \sinh\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}_1}}{2K_B T}\right) I_{split}(\mathbf{k}_1) \quad (5.80)$$

onde $I_{split}(\mathbf{k}_1)$ está definida como

$$I_{split}(\mathbf{k}_1) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 dx x^2 \left(\frac{\mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_0^{(s)}) + \mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u_1^{(s)})}{|\sqrt{[B^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}_x)]^2 + C^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}_x)}|} \right) \quad (5.81)$$

e a função $\mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u)$ está definida como

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\lambda}_x, u) = \frac{Z(\boldsymbol{\varphi}, \theta_1, u)}{|N_2^{(s)}(\boldsymbol{\lambda}_x) - 1|} \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2^{(s)}}{2}\right) \operatorname{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_d^{(s)}}{2}\right) \quad (5.82)$$

A seguir, mostramos os resultados dos cálculos com as equações (5.54) e (5.80)

5.2 Cálculo das taxas de relaxação em processos de espalhamento de 4-mágnons em YIG

Nesta seção faremos o cálculo das taxas de relaxação de 4-mágnons. Portanto é importante levar em conta quais são os processos de maior probabilidade de ocorrência, a razão de isto está em que ao considerar um maior número de mágnons interatuantes, o número de canais de interação aumentam apresentando-se varias possibilidades. Apesar disso, tomaremos em consideração somente o cálculo das taxas de relaxação onde dois mágnons são aniquilados para criar um par novo. A figura 5.8 é uma ilustração pictórica da situação que vamos descrever a seguir.

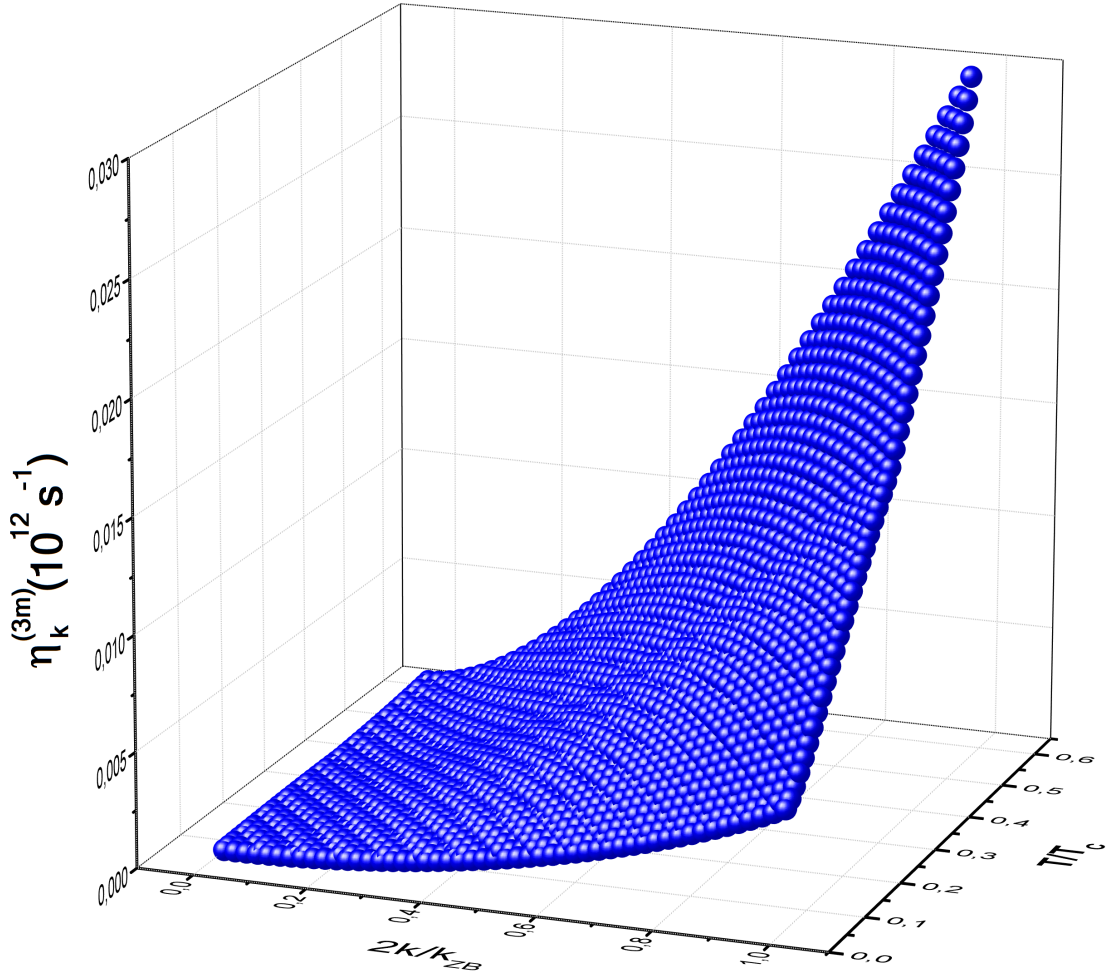


Figura 5.6: Soma das taxas de relaxação calculadas, para os processos de espalhamentos de 3-mágnons de tipo splitting e confluência.

Todos os processos de interação de 4-mágnons que sejam do tipo confluência são descritos por um Hamiltoniano da forma:

$$\mathcal{H}^{(4M)} = \sum_{ijlm} C_{ijlm}^{(4M)} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \Delta(\mathbf{k}_l + \mathbf{k}_m - \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \quad (5.83)$$

De maneira semelhante ao caso de 3-mágnons, para fazer nosso cálculo consideramos um estado inicial definido como $|i\rangle = |n_1, n_2, n_3, n_4\rangle$ e um estado final produto da interação igual a $|n_1 - 1, n_2 - 1, n_3 + 1, n_4 + 1\rangle$. Denotaremos os vetores de onda dos mágnon aniquilados por $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ e os vetores de onda dos mágnons criados são denotados

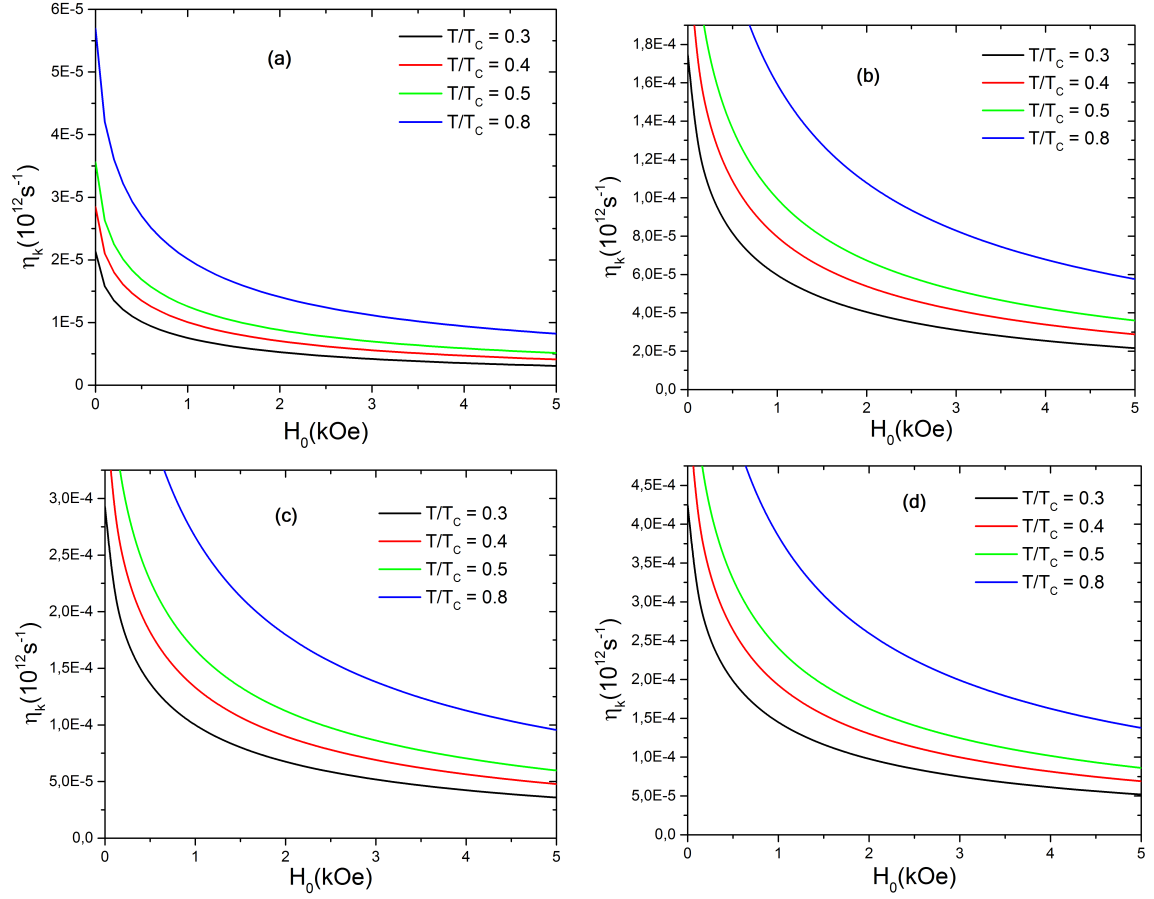


Figura 5.7: Taxas de relaxação $\eta_{\mathbf{k}}^{(3m)}$ como uma função do campo magnético externo, para valores fixos do vetor de onda na primeira zona de Brillouin como também da temperatura. Os valores atribuídos ao vetor de onda são $q = 2k/k_{ZB} = 0.1$ para o gráfico (a), $q = 0.3$ para o gráfico (b), $q = 0.4$ para o gráfico (c) e $q = 0.5$ para o gráfico (d) respectivamente.

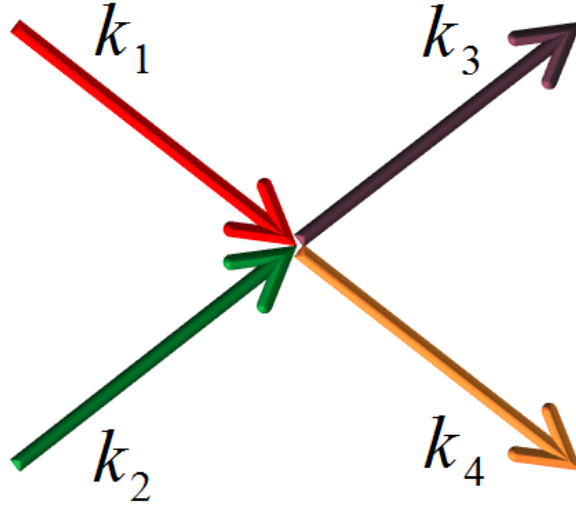


Figura 5.8: Ilustração pictórica da interação de dois mágns de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente, para criar um par novo com vetores de onda $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_4$, de forma que o momento e a energia são conservados.

por $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_4$ respectivamente. Os elementos matriciais do Hamiltoniano (5.83) são:

$$\mathcal{H}_{if} = \sum_{ijlm} C_{ijlm}^{(4M)} \langle n_1 - 1, n_2 - 1, n_3 + 1, n_4 + 1 | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m | n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle \Delta(\mathbf{k}_l + \mathbf{k}_m - \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \quad (5.84)$$

A expressão (5.84) ha somente quatro termos diferentes de zero para todos os possíveis valores dos índices $ijlm$ dos operadores de criação e aniquilação. Esses valores são dados na tabela 5.2. Então para todos esses valores permitidos, os elementos matriciais de

Valor para os índices $ijlm$ em $a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m$			
i	j	l	m
3	4	2	1
3	4	1	2
4	3	2	1
4	3	1	2

Tabela 5.1: Valores permitido para os índices dos operadores de criação e aniquilação do $\mathcal{H}^{(4M)}$. Aqui são mostrados quais termos de $\mathcal{H}^{(4M)}$ produzem contribuições diferentes de zero para os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$.

$\mathcal{H}^{(4M)}$ para os estados considerados após da simplificação ficam:

$$\mathcal{H}_{ij} = C^{(4M)} \sqrt{n_1 n_2 (n_3 + 1)(n_4 + 1)} \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \quad (5.85)$$

onde os coeficientes $C^{(4M)}$ são dados por $C^{(4M)} = C_{3412} + C_{3421} + C_{4312} + C_{4321}$. É necessário também considerar o processo inverso onde dois mágnons de vetores de onda $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_4$ são aniquilados para criar um par novo com vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente. Neste caso, os elementos matriciais do processo inverso são da forma:

$$\mathcal{H}_{ij} = (C^{(4M)})^* \sqrt{n_4 n_3 (n_1 + 1)(n_2 + 1)} \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \quad (5.86)$$

Novamente usamos a regra de ouro de Fermi para calcular as probabilidades de transição. Adicionalmente, vamos supor como no caso de 3-mágnons que as populações de mágnons com vetores de onda $\mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_4$ respectivamente, possuem os valores que têm no equilíbrio térmico. Portanto, a dinâmica da população n_1 de mágnons com vetores de onda $\mathbf{k}_1$, está governada pela equação:

$$\frac{dn_1}{dt} = -\eta_{\mathbf{k}_1}^{(4M)} (n_1 - \bar{n}_1) \quad (5.87)$$

onde a frequência de relaxação ou inverso do tempo de vida da onda de spin é dado pela seguinte expressão:

$$\eta_{\mathbf{k}_1}^{(4M)} := \tau_{\mathbf{k}_1}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar^2} (e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}_1}} - 1) \sum_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \frac{|C^{(4M)}|^2 e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}_2}} \delta(\omega) \Delta(\mathbf{k})}{(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}_2}} - 1)(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}_3}} - 1)(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}_4}} - 1)} \quad (5.88)$$

onde $\delta(\omega) := \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_4 - \omega_3)$ e $\Delta(\mathbf{k}) := \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)$ são a delta de Dirac que garante a conservação da energia e a delta de Kronecker que garante a conservação do momento respectivamente. Na interação de 4-mágnons ha duas contribuições: uma de origem dipolar e outra devido à interação de exchange, mas a contribuição predominante e a de exchange e fornecida pela expressão (1.39). O coeficiente $C^{(4M)}$ de (5.88) é justamente o que aparece no conjunto de expressões (2.14). Para avaliar numericamente a equação (5.88), usamos a conservação do momento para eliminar a soma em

$\mathbf{k}_4$ e as somas restantes em $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$ são convertidas em integrais. Além do mais, vamos denotar $\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ e o ângulo que existe entre $\mathbf{k}_3$ e $\mathbf{k}_s$ vamos denotá-lo por θ_3 . Usaremos como variável de integração para eliminar a delta a conservação da energia a $u = \cos \theta_3$. Para a frequência $\omega_{\mathbf{k}}$, usaremos a equação (5.19) e concentraremos nossa atenção nos mágnons que têm vetor de onda perpendicular ao campo aplicado ($\mathbf{k} \perp \mathbf{H}_0$). Para esta situação, o ângulo de espalhamento $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$ e tomando em conta que $\omega_M = 4\pi M_s$ temos que:

$$\omega_{\mathbf{k}} = \gamma H_0 + \omega_{ZB}(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + 2\pi M_s \quad (5.89)$$

Agora tomamos $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos(\pi k/2k_m)$, devido a que a integração será feita até a metade da primeira zona de Brillouin. Além disso, vamos comparar os resultados quando $\omega_{ZB} = \gamma z D/a^2$ e também $\omega_{ZB} \rightarrow \omega_A$ sendo ω_A o valor ajustado na seção 1.3.2. Na integração, usamos a propriedade da função delta de Dirac:

$$\delta(\omega(u)) = \frac{1}{f'(u_0)} \delta(u - u_0) \quad (5.90)$$

onde a função $f(u)$ é definida como $f(u) = \omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4$. Usando a equação (5.89), a função $f(u)$ é convertida em:

$$f(u) = \omega_{ZB}(\gamma_{\mathbf{k}_4} + \gamma_{\mathbf{k}_3} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_2}) \quad (5.91)$$

De acordo com a conservação do momento, temos que $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3$, portanto encontramos que $k_4 = (k_s^2 + k_3^2 - 2k_3k_s \cos \theta_3)^{1/2}$ e como $u = \cos \theta_3$, então $k_4 = k_4(u)$. A forma da expressão (5.89) indica que há independência da coordenada angular $\varphi_{\mathbf{k}}$, assim a integração nessa variável é imediata e vale $(2\pi)^2$. Usando (5.91) em (5.90) encontramos que:

$$f'(u) = \frac{\pi \omega_{ZB} k_s k_3}{2k_m k_4} \text{sen} \left(\frac{\pi k_4}{2k_m} \right) \quad (5.92)$$

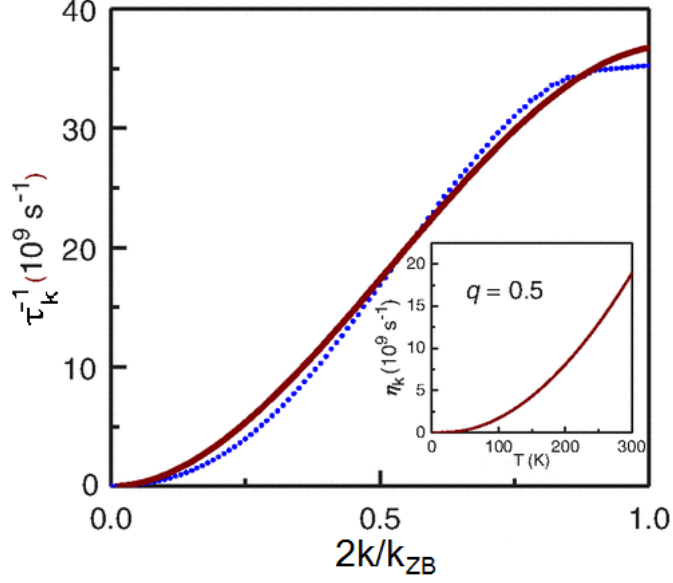


Figura 5.9: Taxas de relaxação como função do vetor de onda e da temperatura. A curva tracejada representa a taxa de relaxação calculada numericamente para o YIG quando a temperatura é 300 K e é função do vetor de onda racionalizado $q = k/k_m = 2k/k_{ZB}$. A linha sólida representa um polinômio de ajuste. O gráfico interior corresponde à taxa de relaxação como uma função da temperatura para o valor específico de $2k/k_{ZB} = 0.5$.

Então a forma integral para as taxas de relaxação de 4-mágnons é dada por:

$$\eta_{\mathbf{k}_1}^{(4M)} = \frac{2\pi}{\hbar} (e^{\beta\hbar\omega_1} - 1) \frac{N^2\Omega^2}{(2\pi)^4} \int dk_2 k_2^2 \int dk_3 k_3^2 \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_2) \times \int_{-1}^{+1} du \bar{n}_{\mathbf{k}_2} \bar{n}_{\mathbf{k}_3} \bar{n}_{\mathbf{k}_4} \left(\frac{2k_m k_4 |C^{4M}|^2}{\pi\omega_{ZB} k_s k_3 \sin(\pi k_4/k_m)} \right) \delta(u - u_0) \quad (5.93)$$

Os fatores $n_{\mathbf{k}}$ são os fatores de Bose-Einstein. Para fazer a avaliação numérica de (5.93), assumiremos uma zona de Brillouin esférica, e para que o número de estados em k seja conservado, definimos o raio dessa zona como $4\pi k_m^3/3 = (2\pi/a)^3$, então obtemos que $k_m a = (6\pi^2)^{1/3}$. Além disso, definimos $\Omega = a^3$, $x = \pi k/2k_m = \pi q/2$ com $0 \leq q \leq 1$ e também $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos x_{\mathbf{k}}$.

As taxas de relaxação calculadas mostram que estas se incrementam monotonamente com o valor de k , mas acontece que perto da metade da zona de Brillouin alcançam um valor máximo e a partir desse valor também decaem monotonamente. Para eli-

minar o decaimento perto da fronteira da porção considerada da zona de Brillouin, são levados em conta processos do tipo Umklapp, onde a conservação do momento é obtida adicionando um novo vetor $\mathbf{G}$ da rede recíproca. Assim, agora temos que $\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{G}$. Esta nova forma de conservar o momento, apresenta a dificuldade de como deve ser definido o $\mathbf{G}$ numa zona esférica. O problema é resolvido assumindo que $\mathbf{G}$ é paralelo ou perpendicular a $\mathbf{k}$ e seu comprimento é o dobro do k_m , isto é, $|\mathbf{G}| = 2k_m$. A figura 5.9, mostra a taxa de relaxação calculada numericamente para o YIG como uma função do vetor de onda para uma temperatura de 300 K. Este resultado mostra que o tempo de vida dos mágnons é da ordem de $\tau_k \approx 10^{-10} s^{-1}$ quando a magnitude do vetor de onda correspondente é $k \approx 10^7 \text{ cm}^{-1}$, o qual é mais pequeno que os valores reportados na literatura [132, 133, 134]. Adicionalmente, o polinômio que ajusta a taxa de relaxação de 4-mágnons calculada numericamente é dado por $\eta_k^{(4m)} = 1/\tau_k^{(4m)} = (10.2q^2 - 6.5q^3) \times 10^{10} s^{-1}$. Se consideramos a relaxação devido a processos de 3-mágnons e 4-mágnons e também tendo em conta que a taxa de relaxação depende da temperatura, podemos estimar a $1/\tau_k$ por médio de um polinômio de duas variáveis, o qual é dado pela expressão $\tau_k^{-1} = 1 + 500q(T/T_{max}) + (5100q^2 - 3250q^3)(T/T_{max})^2$, onde $T_{max} = 300 \text{ K}$. As expressões anteriores foram usadas no estudo das correntes de spins, na teoria do efeito de Spin-Seebeck longitudinal [135].

5.3 Cálculo das taxas de relaxação de ondas de spins em campos magnéticos intensos em YIG

Nesta seção, vamos calcular as taxas de relaxação de ondas de spins em campos magnéticos altos em YIG. A razão principal, é que serão necessárias para calcular algumas propriedades térmicas, tais como a condutividade térmica. Esses cálculos, precisam usar a função tempo de colisão $\tau(\omega)$, que pode ser determinada a partir da taxa de relaxação. Portanto, temos que usar a relação de dispersão mais apropriada, devido a que as considerações que faremos a seguir serão baseadas em supor que uma

amostra de YIG é submetidas a campos magnéticos muito intensos.

Quando uma amostra de YIG é submetida a um campo magnético de magnitude H_0 as interações de maior relevância são aquelas consideradas no capítulo 1, e a relação de dispersão obtida na formulação de ondas de spins é dada pela equação (1.63). Ao considerar que o campo magnético aplicado é demasiado intenso, essa relação de dispersão pode ser simplificada desconsiderando uma das três interações principais, que neste caso seria a interação dipolar. Então como é usual, vamos tomar $\omega_M = 4\pi\gamma M_s$, $\omega_0 = \gamma H_0$ e também $2zSJ = \hbar\omega_A$. Assim, para simplificar a equação (1.63), tomamos as definições $f_{\mathbf{k}} = \omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}})$ e do mesmo jeito fazemos $\bar{f}_{\mathbf{k}} = \omega_M \sin^2 \theta_{\mathbf{k}}$. Podemos ver que o termo $\bar{f}_{\mathbf{k}}$ é resultado da interação dipolar e é importante somente para comprimentos de onda curta. De acordo as definições previas, podemos escrever em forma simplificada a relação de dispersão como $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{f_{\mathbf{k}}(f_{\mathbf{k}} + \bar{f}_{\mathbf{k}})}$. Como veremos, no desenvolvimento das contas, precisamos em certo momento inverter a relação $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$ para $\mathbf{k}(\omega_{\mathbf{k}})$ ou outra relação apropriada e a dificuldade que existe na manipulação de $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$, está escondida no termo $\theta_{\mathbf{k}}$, pois acontece que $\sin \theta_{\mathbf{k}} = (k^2 - k_z^2)^{1/2}/k$.

Em relação ao anterior, uma forma de resolver a dificuldade no tratamento de $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$, consiste em fazer um estimativo numérico nas magnitudes das frequências $f_{\mathbf{k}}$ e $\bar{f}_{\mathbf{k}}$ envolvidas em $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$ para desprezar as quantidades mais pequenas. Lembremos que para o YIG, a magnetização de saturação é $M_s = 1.780$ kOe. Por conseguinte, encontramos que $\omega_M = 4\pi\gamma M_s = 6.30 \times 10^{10}$ rad s⁻¹. Também, do ajuste dos dados experimentais obtemos que $\omega_A/2\pi = 8.95$ THz. Para $\omega_0 = \gamma H_0$, vemos que seu valor é apreciável sempre que a magnitude de H_0 seja muito alta como é observado da figura 5.10. O valor do campo magnético onde ω_0 e ω_M são iguais é justamente $H_0 = 4\pi M_s = H_s = 22.37$ kOe. Portanto, as considerações que faremos a seguir é razoável sempre que $H_0 > H_s$ ou seja maior do que o campo de saturação da amostra. Se tomamos o campo magnético externo aplicado, compreendido numa faixa onde $H_0 > H_s$, como por exemplo de 30 até 300 kOe, perceberemos que ha um valor mínimo e outro máximo, iguais a $\omega_0^{(Min)} = 8.44 \times 10^{-2}$ rad

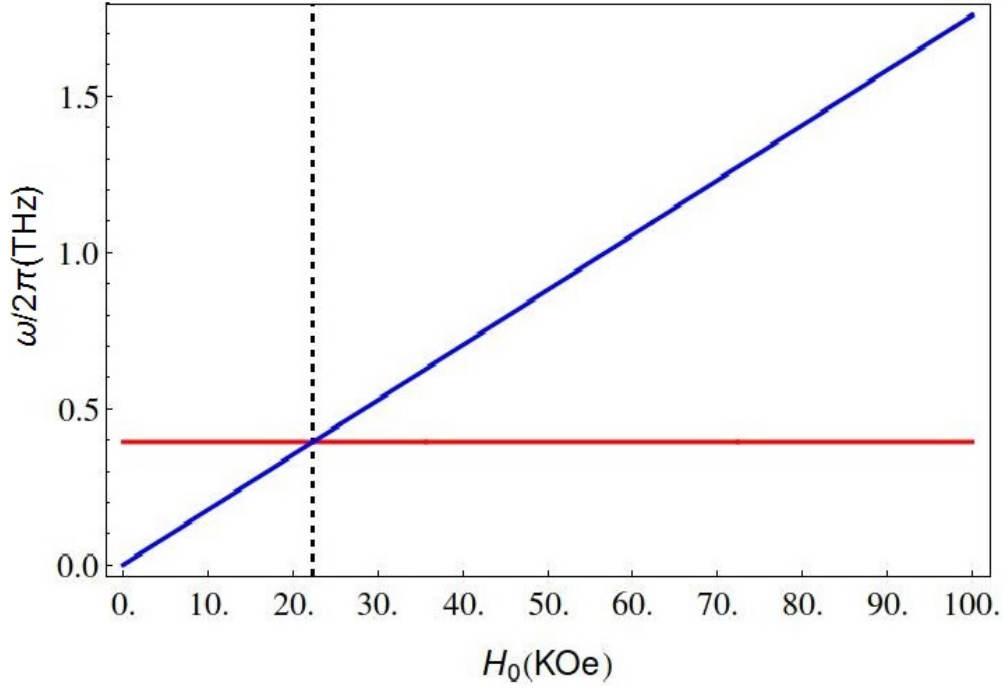


Figura 5.10: Comparação entre as magnitudes das frequências ω_0 e ω_M . A linha vermelha é para ω_M , a linha azul para ω_0 e o ponto de interseção marcado pela linha preta corresponde ao valor onde $\omega_0 = \omega_M$.

s^{-1} para o mínimo e $\omega_0^{(Max)} = 0.84 \text{ rad s}^{-1}$ para o máximo. Nestas condições acontece que no limite superior da primeira zona de Brillouin onde $k = k_{ZB}$, a condição $f^{(Max)} = \omega_0^{(Max)} + 2\omega_A = |f_{\mathbf{k}}(k = k_{ZB})| > |\bar{f}_{\mathbf{k}}(k = k_{ZB})|$ é satisfeita. No extremo inferior, a condição satisfeita é $f^{(Min)} = \omega_0^{(Min)} = |f_{\mathbf{k}}(k = 0)| > |\bar{f}_{\mathbf{k}}(k = 0)|$. Devemos adicionar que para campos muito intensos, os deslocamentos dos momentos magnéticos da amostra em relação à direção do campo magnético aplicado são pequenos, fazendo isto com que $\theta_{\mathbf{k}}$ seja mantido perto de um valor quase fixo. Podemos assim, usar a relação de dispersão (1.63) desprezando o termo $\bar{f}_{\mathbf{k}}$ e avaliar as taxas de relaxação dos mágnons em campos magnéticos intensos. Então, note que:

$$\omega_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} \left(1 + (\bar{f}_{\mathbf{k}}/f_{\mathbf{k}}) \right)^{1/2} \quad (5.94)$$

Lembrando que $\theta_{\mathbf{k}} \leq \pi/2$ o que significa ter $|\sin\theta_{\mathbf{k}}| \leq 1$ e das estimações numéricas feitas encontramos $(\omega_M/\omega_A) = 7.03 \times 10^{-3} < 1$, achamos então $(\bar{f}_{\mathbf{k}}/f_{\mathbf{k}}) \ll 1$. Portanto,

em boa aproximação podemos usar que:

$$\left(1 + \frac{\bar{f}_{\mathbf{k}}}{f_{\mathbf{k}}}\right)^{1/2} \approx 1 \quad (5.95)$$

De acordo com a equação (5.95) a relação de dispersão pode ser aproximada muito bem por meio da expressão:

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_0 + \omega_A(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \quad (5.96)$$

Por outra parte, usando os princípios de conservação da energia e do momento, podemos transformar os fatores de Bose - Einstein da expressão (5.88) como:

$$e^{\beta\hbar\omega_2} \bar{n}_{\mathbf{k}_2} \bar{n}_{\mathbf{k}_3} \bar{n}_{\mathbf{k}_4} = \frac{1}{8} e^{-\beta\hbar\omega_1/2} \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_3}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_4}{2}\right) \quad (5.97)$$

do procedimento anterior temos que a expressão da taxa de relaxação dada em (5.88) fica:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}_1}} \approx & \frac{\pi}{2\hbar^2} \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega_1}{2}\right) \sum_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} |C^{(4M)}|^2 \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_3}{2}\right) \times \\ & \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_4}{2}\right) \delta(\omega) \Delta(k) \end{aligned} \quad (5.98)$$

Por razões de simplificação vamos escrever o argumento da soma em (5.97) como:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) = |C^{(4M)}|^2 \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_2}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_3}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega_4}{2}\right) \delta(\omega) \quad (5.99)$$

Usando (5.99) em (5.98), temos que

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}_1}} := \frac{\pi}{2\hbar^2} \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega_1}{2}\right) \sum_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \mathcal{A}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \quad (5.100)$$

Como $\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, aplicando o princípio da conservação do momento, reduzimos

expressão (5.99) até:

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}_1}} := \frac{\pi}{2\hbar^2} \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega_1}{2}\right) \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \mathcal{A}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3) \quad (5.101)$$

Embora não exista restrição alguma nos momentos individuais, teremos prioridade só pela situação em que $\mathbf{k}_s \neq \mathbf{0}$, isto implica que $|\mathbf{k}_s| = k_s > 0$. A função delta da conservação da energia que surge na expressão (5.101) dificulta o cálculo da taxa de relaxação. Por isso, vamos buscar uma maneira de resolver essa dificuldade. Assim, a delta da conservação da energia é transformada em:

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}_1} + \omega_{\mathbf{k}_2} - \omega_{\mathbf{k}_3} - \omega_{\mathbf{k}_4}) = \frac{1}{\omega_A} \delta(\gamma_{\mathbf{k}_3} + \gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_2}) \quad (5.102)$$

Transformaremos as somas em $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$ em um par de integrais. A partir da relação de dispersão dada em (5.96) se observa que não ha uma dependência explícita no conjunto de variáveis $\theta_{\mathbf{k}_2}$, $\phi_{\mathbf{k}_2}$, $\theta_{\mathbf{k}_3}$, $\phi_{\mathbf{k}_3}$, e posto que as integrações são parciais, na transformação de somas para integrais, aparecerá um fator de proporcionalidade igual 4π , portanto temos:

$$\sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \rightarrow \frac{\Omega^2}{(2\pi)^6} \int \int d^3k_2 d^3k_3 = \frac{\Omega^2}{4\pi^4} \int_0^{k_{ZB}} dk_2 k_2^2 \int_0^{k_{ZB}} dk_3 k_3^2 \quad (5.103)$$

Tomando em conta que $\omega_i = \omega(\mathbf{k}_i) = \omega(\gamma_{\mathbf{k}_i})$, a equação (5.101) depois de usar o conjunto de expressões (5.99), (5.102) e (5.103) é transformada em:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}_1}} := & \left(\frac{\Omega^2}{8\omega_A \hbar^2 \pi^3} \right) \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}_1})}{2}\right) \int_0^{k_{ZB}} dk_2 k_2^2 \int_0^{k_{ZB}} dk_3 k_3^2 |C^{(4M)}|^2 \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}_2})}{2}\right) \times \\ & \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}_3})}{2}\right) \text{csch}\left(\frac{\beta\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3})}{2}\right) \delta(\gamma_{\mathbf{k}_3} + \gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_2}) \end{aligned} \quad (5.104)$$

O coeficiente de interação $C^{(4M)}$ novamente está definido na expressão (2.14) e pode ser expressado em termos dos $\gamma_{\mathbf{k}_i}$ depois de tomar as mudanças $\mathbf{k}_4 \rightarrow \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3$ e

$\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3$ como:

$$C^{(4M)} = \frac{zJ}{2N} \left(\gamma_{\mathbf{k}_1} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_3} + \gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} - 4\gamma_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3} \right) \quad (5.105)$$

Vamos aproximar o argumento da função delta do lado direito da equação (5.102) para simplificar a taxas de relaxação e assim fazer as integrações numéricas respectivas, mas isso requer escrever de maneira apropriada o fator $\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3}$. Estaremos exigindo que seja da forma $\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} \approx A(\mathbf{k}_s) \cdot \gamma_{\mathbf{k}_3} + B(\mathbf{k}_s)$. Também, assumiremos que os mágnons interagentes não correspondem aos modos uniformes, isto é $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{0}$ e $\mathbf{k}_2 \neq \mathbf{0}$. Então, para fazer isto, notemos primeiro que a magnitude de $\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3$ definida por $|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3| = (k_s^2 + k_3^2 - 2k_s k_3 \cos \theta_s)^{1/2}$ pode ser escrita como:

$$|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3| = (k_s - k_3) \left(1 + \frac{4k_s k_3}{(k_s - k_3)^2} \sin^2 \frac{\theta_s}{2} \right)^{1/2} \quad (5.106)$$

onde θ_s corresponde ao ângulo entre os vetores $\mathbf{k}_s$ e $\mathbf{k}_3$ respectivamente. A equação (5.106) ainda pode ser reescrita de forma melhor para conseguir aproximações mais sólidas. Por um lado, note que $i = e^{i\pi/2}$ e por outro é útil tomar as definições $\varphi = \theta_s/2$ e $\vartheta = 2e^{i\pi/2} \sqrt{k_s k_3} / (k_s - k_3)$. Com isto, conseguimos escrever a expressão para $|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3|$ da forma: $|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3| = (k_s - k_3) (1 - \vartheta^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}$. Outro resultado importante é que o fator da raiz quadrada pode ser escrito como $(1 - \vartheta^2 \sin^2 \varphi)^{1/2} = \partial E(\varphi, \vartheta) / \partial \varphi$, onde $E(\varphi, \vartheta)$ corresponde exatamente a integral elíptica incompleta de segunda classe [112, 113, 114]. Então combinando a equação (5.106) junto com as definições previas, obtemos:

$$|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3| = 2(k_s - k_3) \frac{\partial}{\partial \theta_s} E \left(\frac{\theta_s}{2}, 2e^{i\pi/2} \frac{\sqrt{k_s k_3}}{k_s - k_3} \right) \quad (5.107)$$

Um fato que resulta intuitivo a partir dos aspectos geométricos da interação dos magnos e que é suportado pela conservação do momento é que $\theta_s/2 \lesssim \pi/2$ e $\sqrt{k_s k_3} / |k_s - k_3| \lesssim 1$. Por ista razão, podemos em boa aproximação fazer $\partial E(\varphi, \vartheta) / \partial \varphi \approx 1/2$. Com este raciocínio podemos assumir que $|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3| \approx (k_s - k_3)$, com $k_s > k_3$. Então, de acordo com a definição que temos para o $\gamma_{\mathbf{k}_i}$ achamos que $\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} = \cos(|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3|a) \approx \cos[(k_s - k_3)a]$, mas também temos que $\cos[(k_s - k_3)a] = \cos k_s a \cos k_3 a + \sin k_s a \sin k_3 a \approx$

$\gamma_{\mathbf{k}_3}\gamma_{\mathbf{k}_s} + (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{1/2}$. Assim, com esta simplificação encontramos que uma aproximação razoável para $\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3}$ é dada por $\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} \approx \gamma_{\mathbf{k}_3}\gamma_{\mathbf{k}_s} + (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{1/2}$. Com este último resultado, conseguimos aproximar o argumento da função delta da conservação da energia por meio da expressão:

$$(\gamma_{\mathbf{k}_3} + \gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_2}) \approx \gamma_{\mathbf{k}_3}(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}) - (\gamma_{\mathbf{k}_1} + \gamma_{\mathbf{k}_2} - (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{1/2}) \quad (5.108)$$

Podemos substituir a delta do lado direito da equação (5.102) por:

$$\delta(\gamma_{\mathbf{k}_3} + \gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} - \gamma_{\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_2}) \rightarrow \frac{1}{|1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}|} \delta\left(\gamma_{\mathbf{k}_3} - \frac{\gamma_{\mathbf{k}_1} + \gamma_{\mathbf{k}_2} - (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{1/2}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}}\right) \quad (5.109)$$

Com ajuda do resultado (5.108), podemos reescrever os coeficientes de interação de 4 mágnons como:

$$C^{(4M)} = \frac{zJ}{2N} \left(\gamma_{\mathbf{k}_1} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2} - 4\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}_1}^2} + \gamma_{\mathbf{k}_3}(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s} - 4\gamma_{\mathbf{k}_1}) \right) \quad (5.110)$$

Para reescrever a equação (5.104) usando as mudanças estabelecidas até agora, consideremos que se o volume de uma célula cúbica é a^3 , então o volume Ω formado por N células cúbicas será igual a $\Omega = Na^3$. Além disso, as variáveis de integração em (5.104) estão em $\mathbf{k}_2$ e $\mathbf{k}_3$, mas em relação a $\mathbf{k}_3$ podemos fazer um tratamento alternativo para eliminar a função delta do integrando. Para isto, aproveitamos a relação que existe entre $\mathbf{k}_i$ e $\gamma_{\mathbf{k}_i}$, é dizer $\gamma_{\mathbf{k}_i} = \cos k_i a$. Assim ao inverter a relação, temos que $\gamma_{\mathbf{k}_i}(k_i) \rightarrow k_i(\gamma_{\mathbf{k}_i})$, e daqui para as variáveis em $\mathbf{k}_3$ encontramos que $\gamma_{\mathbf{k}_3}(k_3) \rightarrow k_3(\gamma_{\mathbf{k}_3})$. Da nova mudança resulta que $k_3 = a^{-1} \arccos \gamma_{\mathbf{k}_3}$, então o termo $dk_3 k_3^2$ é igual a:

$$dk_3 k_3^2 = -a^{-3} (1 - \gamma_{\mathbf{k}_3}^2)^{-1/2} \arccos^2 \gamma_{\mathbf{k}_3} d\gamma_{\mathbf{k}_3} \quad (5.111)$$

Para definir o limites de integração, observemos que se $k_3 = 0$, $\gamma_{\mathbf{k}_3} = 1$ e se $k_3 = k_{ZB}$ resulta $\gamma_{\mathbf{k}_3} = -1$. Além disso, fazendo $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}$, a integração parcial em k_3 , permite obter uma expressão que será função somente de $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}_2$, que denotaremos por $I_\tau(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)$

e definida como:

$$\begin{aligned}
I_\tau(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) = & \frac{1}{a^3|1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}|} \text{csch} \left(\frac{\beta \hbar \omega(\gamma_{\mathbf{k}_2})}{2} \right) \int_{-1}^1 d\gamma_{\mathbf{k}_3} \frac{\arccos^2 \gamma_{\mathbf{k}_3}}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}_3}^2}} \left(\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2} \right. \\
& - 4\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} + \gamma_{\mathbf{k}_3}(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s} - 4\gamma_{\mathbf{k}}) \Big)^2 \text{csch} \left(\frac{\beta \hbar \omega(\gamma_{\mathbf{k}_3})}{2} \right) \text{csch} \left(\frac{\beta \hbar \omega(\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3})}{2} \right) \\
& * \delta \left(\gamma_{\mathbf{k}_3} - \frac{\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} - (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{1/2}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}} \right)
\end{aligned} \tag{5.112}$$

Simplificamos (5.112), tomando as seguintes definições baseadas no fato que $|\gamma_{\mathbf{k}_i}| \lesssim 1$.

$$\begin{aligned}
\gamma_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_3} & \rightarrow \frac{\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_s}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}} \equiv G^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \\
\gamma_{\mathbf{k}_3} & \rightarrow \left(\frac{\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}} - \sqrt{\frac{1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}}} \right) \equiv G^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \\
\arccos^2 \gamma_{\mathbf{k}_3} & \rightarrow \arccos^2 \left(\frac{\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}} - \sqrt{\frac{1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}}} \right) \\
(1 - \gamma_{\mathbf{k}_3})^{-1/2} & \rightarrow \frac{2(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s})}{\sqrt{4(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s})^2 - (\gamma_{\mathbf{k}_s}^2 + 2\gamma_{\mathbf{k}} + 2\gamma_{\mathbf{k}_2} - 2)^2}} \equiv G^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \\
\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + (1 - \gamma_{\mathbf{k}_s}^2)^{-1/2} - 4(1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2)^{-1/2} + \gamma_{\mathbf{k}_3}(1 + \gamma_{\mathbf{k}_s} - 4\gamma_{\mathbf{k}}) & \rightarrow (2\gamma_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} \\
& - \frac{1}{2}\gamma_{\mathbf{k}_s}^2 - 3) + (\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}_2} + \frac{1}{2}\gamma_{\mathbf{k}_s}^2 - 1) \left(1 - \frac{4\gamma_{\mathbf{k}}}{1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}} \right) \\
& \equiv G^{(4)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)
\end{aligned} \tag{5.114}$$

Depois de usar as expressões anteriores a equação que define a $I_\tau(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)$ obtemos:

$$\begin{aligned}
I_\tau(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) = & \frac{1}{a^3|1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}|} \text{csch} \left(\frac{\hbar \omega(\gamma_{\mathbf{k}_2})}{2K_B T} \right) G^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) |G^{(4)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)|^2 \arccos^2 \left(G^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \right) \times \\
& \text{csch} \left(\frac{\hbar \omega(G^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2))}{2K_B T} \right) \text{csch} \left(\frac{\hbar \omega(G^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2))}{2K_B T} \right)
\end{aligned} \tag{5.115}$$

Substituindo a expressão (5.115) e mudanças relacionadas em (5.104) obtemos para as

taxas de relaxação a expressão:

$$\begin{aligned} \tau_{\mathbf{k}}^{-1} = & \left(\frac{z^2 J^2 a^3}{32\omega_A \hbar^2 \pi^3} \right) \sinh \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}})}{2K_B T} \right) \int_0^{k_{ZB}} dk_2 k_2^2 \frac{G^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)}{|1 + \gamma_{\mathbf{k}_s}|} \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_{\mathbf{k}_2})}{2K_B T} \right) \times \\ & |G^{(4)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)|^2 \arccos^2 \left(G^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \right) \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2))}{2K_B T} \right) \times \\ & \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2))}{2K_B T} \right) \end{aligned} \quad (5.116)$$

Antes de realizar o último passo na avaliação das taxas de relaxação, faremos uma última mudança de variável pensada no fato que a integração vai até o limite superior da primeira zona de Brillouin. Portanto, para a integração em k_2 tomamos $k_2 \rightarrow k_2 = \pi x/a$, de igual forma tomamos $k = \pi y/a$. Daqui, a equação (5.116) é transformada em:

$$\begin{aligned} \tau_{\mathbf{k}}^{-1} = & \left(\frac{z^2 J^2}{32\omega_A \hbar^2} \right) \sinh \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_y)}{2K_B T} \right) \int_0^1 dx x^2 \frac{G^{(3)}(y, x)}{|1 + \gamma_{xy}|} |G^{(4)}(y, x)|^2 \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_x)}{2K_B T} \right) \times \\ & \arccos^2 \left(G^{(2)}(y, x) \right) \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(1)}(y, x))}{2K_B T} \right) \operatorname{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(2)}(y, x))}{2K_B T} \right) \end{aligned} \quad (5.117)$$

A relação (5.117) depende explicitamente do ângulo entre os vetores $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$, que vamos denotar por θ_{12} . Então para resolver esta dificuldade, tomaremos o valor médio na variável θ_{12} da quantidade $\tau_{\mathbf{k}}^{-1}$. A razão de isto é simples: não ha absolutamente nada que impeça tomar o valor médio para todas as possíveis orientações dos mágnons interagentes de vetores de onda $\mathbf{k}_1$ e $\mathbf{k}_2$ respectivamente. Em consequência, teremos que $\tau_{\mathbf{k}}^{-1}(\theta_{12}) \rightarrow \bar{\tau}_{\mathbf{k}}^{-1}$, mas de acordo como teorema do valor médio encontramos:

$$\bar{\tau}_{\mathbf{k}}^{-1} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta_{12} \tau_{\mathbf{k}}^{-1}(\theta_{12}) \quad (5.118)$$

Usando o fato que $\omega_A = 2zSJ/\hbar$, junto com as equações (5.117) e (5.118) finalmente

encontramos que:

$$\bar{\tau}_{\mathbf{k}}^{-1} = \left(\frac{\omega_A}{128\pi S^2} \right) \sinh \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_y)}{2K_B T} \right) I_{\tau_{\mathbf{k}}}(H_0, T, y) \quad (5.119)$$

onde a função $\bar{I}_{\tau_{\mathbf{k}}}(H_0, T, y)$ é definida por médio da seguinte integral dupla:

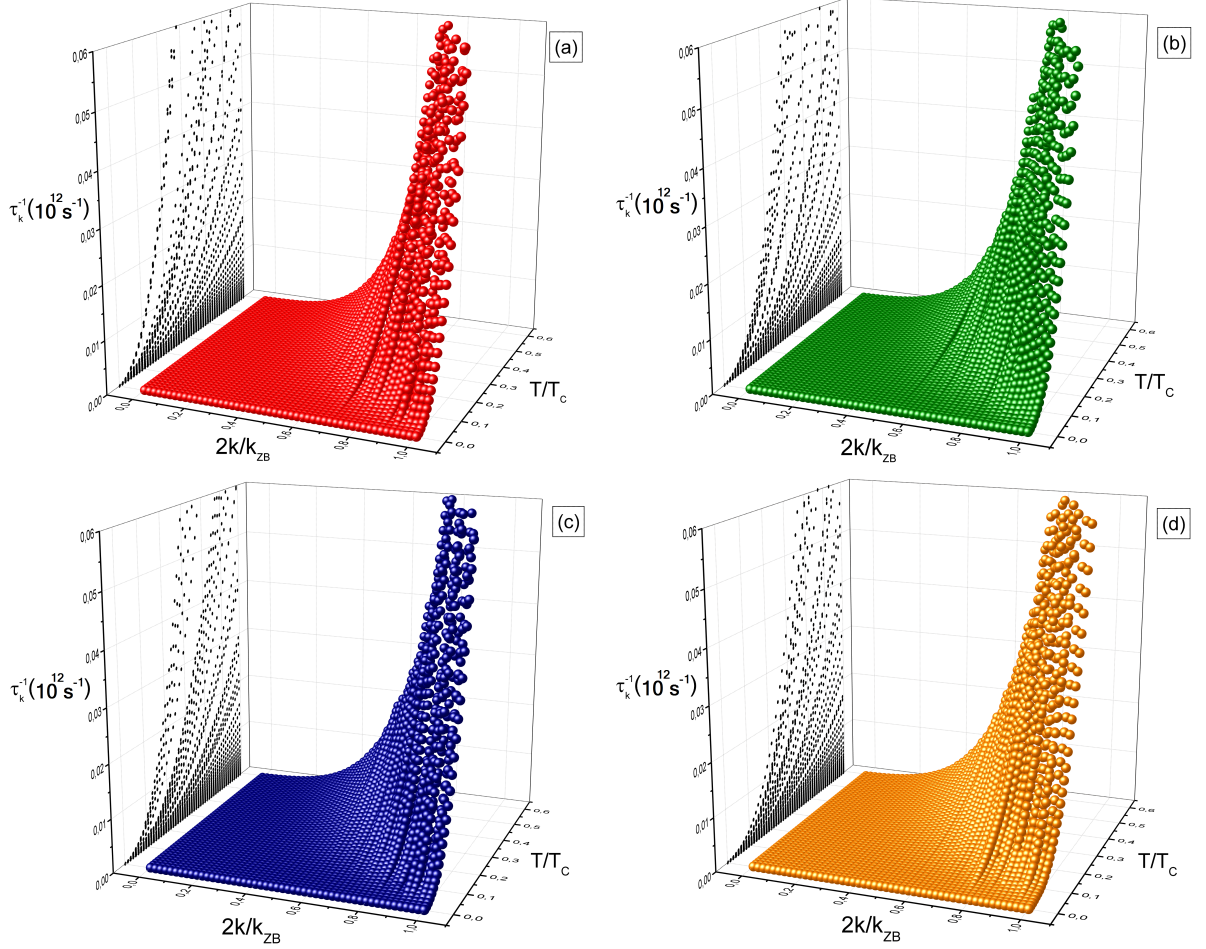


Figura 5.11: Racionalização da parte integral das taxas de relaxação de 4-mágnons

$$\begin{aligned} \bar{I}_{\tau_{\mathbf{k}}}(H_0, T, y) := & \int_0^\pi d\theta_{12} \int_0^1 dx x^2 \left(\frac{G^{(3)}(y, x) |G^{(4)}(y, x)|^2}{|1 + \gamma_{xy}|} \right) \text{csch} \left(\frac{\hbar\omega(\gamma_x)}{2K_B T} \right) \times \\ & \arccos^2 \left(G^{(2)}(y, x) \right) \text{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(1)}(y, x))}{2K_B T} \right) \text{csch} \left(\frac{\hbar\omega(G^{(2)}(y, x))}{2K_B T} \right) \end{aligned} \quad (5.120)$$

A dependência em θ_{12} é por meio do termo $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2| = (k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos \theta_{12})^{1/2}$, e

quando são feitas as mudanças $k_1 \rightarrow (\pi/a)y$ e $k_2 \rightarrow (\pi/a)x$, a magnitude da soma dos vetores de onda é transformada em $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2| = \frac{\pi}{a}(x^2 + y^2 + 2xy \cos \theta_{12})^{1/2}$. A função $\bar{I}_{\tau_{\mathbf{k}}}(H_0, T, y)$ que aparece na definição da taxa de relaxação de 4-mágnons em campos magnéticos intensos faz com que a expressão que define a $\bar{\tau}_{\mathbf{k}}^{-1}$ seja pouco prática para as computações numéricas posteriores devido a sua complexidade. Portanto, usamos uma função alternativa para ajustar à equação original. Para fazer isto escolhemos o caso mais simples, é dizer, um polinômio que será de duas variáveis. Daqui, encontramos outra função que resulta ser uma boa aproximação. Tomando as definições adicionais $x = k/k_{ZB}$ e $\tau = T/T_C$ para um valor fixo de campo magnético, o modelo de ajuste usado é da forma:

$$\bar{\tau}_{\mathbf{k}}^{-1} \rightarrow \tau_A^{-1}(\tau, x) = \sum_{m=0}^{N_{max}} \sum_{n=0}^{N_{max}} C_{mn} x^n \tau^m, \quad \text{com } C_{mn} = 0 \text{ se } m+n > N_{max} \quad (5.121)$$

Em relação ao anterior, o polinômio que melhor ajusta as superfícies de taxas de re-

$C_{mn} x^n \tau^m$'s	Potencias de x 's						
	1	x	x^2	x^3	x^4	x^5	
Potencias de τ 's	1	C_{00}	C_{01}	C_{02}	C_{03}	C_{04}	C_{05}
	τ	C_{10}	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	0
	τ^2	C_{20}	C_{21}	C_{22}	C_{23}	0	0
	τ^3	C_{30}	C_{31}	C_{32}	0	0	0
	τ^4	C_{40}	C_{41}	0	0	0	0
	τ^5	C_{50}	0	0	0	0	0

Tabela 5.2: Valores para os parâmetros de ajuste C'_{mn} s do modelo 5.121, que simplifica a representação integral (5.119) da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando é aplicado um campo magnético externo intenso.

laxação em função do vetor de onda e temperatura é de grau cinco. Em consequência, usamos a tabela 5.3 para apresentar a estrutura geral de coeficientes do polinômio de ajuste dado por (5.121). A interpretação da tabela para a construção do polinômio de ajuste é simples. Localizamos a posição (m, n) na tabela onde está o coeficiente

C_{mn} , com isto é construído o termo $C_{mn}x^m\tau^m$. Isto é feito para todos os coeficientes depois tomamos a soma de todos produtos, isto fornece a expressão que queremos para aproximar $\tau_A^{-1}(\tau, x)$.

Em vista de que estamos interessados em determinar as propriedades de transporte de mágnon em YIG no próximo capítulo, vamos fazer nossas estimações para quatro valores diferentes de campo magnético aplicado H_0 que são 0 kOe, 70 kOe, 200 kOe e 300 kOe respectivamente. Adicionalmente, tomamos o valor da temperatura de Curie do YIG como $T_C = 560.00$ K e com estes valores para esses parâmetros e valores dos parâmetros restantes, realizamos as estimações numéricas de forma que calculamos quatro superfícies de taxas de relaxação de 4-mágnons como uma função do vetor de onda reduzido $2k/k_{ZB}$ tomado até a metade da primeira zona de Brillouin e da temperatura reduzida T/T_C . Os resultados destas estimações, são apresentados nos quatro gráficos da figura 5.11. Também, essas superfícies são projetadas sobre o plano formado por τ_k^{-1} e a temperatura reduzida, com o proposito de observar as variações de τ_k^{-1} em função da temperatura, desses gráficos é observado que a taxa de relaxação cresce monotonamente com a temperatura, um resultado que é esperado devido ao aumento de desordem na distribuição espaciais dos spins dos íons magnéticos do cristal de YIG. Em adição ao anterior, com as estimações numéricas feitas de τ_k^{-1} para 4-mágnons em campos magnéticos intensos, calculamos os coeficientes dos polinômios de ajuste dados pela equação (5.121) e são utilizados para aproximar as superfícies calculadas e apresentadas nos gráficos da figura 5.11. Estes coeficientes, estão dados nas tabelas A.1, A.1, A.1 e A.1 respectivamente. Além disso, criamos quatro gráficos adicionais que mostram a comparação dos resultados da computação direta de (5.119) que inclui a integral (5.120). Esses gráficos estão contidos na figura 5.12 e a taxa calculada é representada pelos pontos azuis, embora as superfícies geradas com os polinômios de ajuste, são representada pelas superfícies coloridas.

Por outra parte, usando a equação (5.121) também calculamos a taxa de relaxação τ_k^{-1} para 4-mágnons em campos magnéticos intensos, como uma função do campo magnético

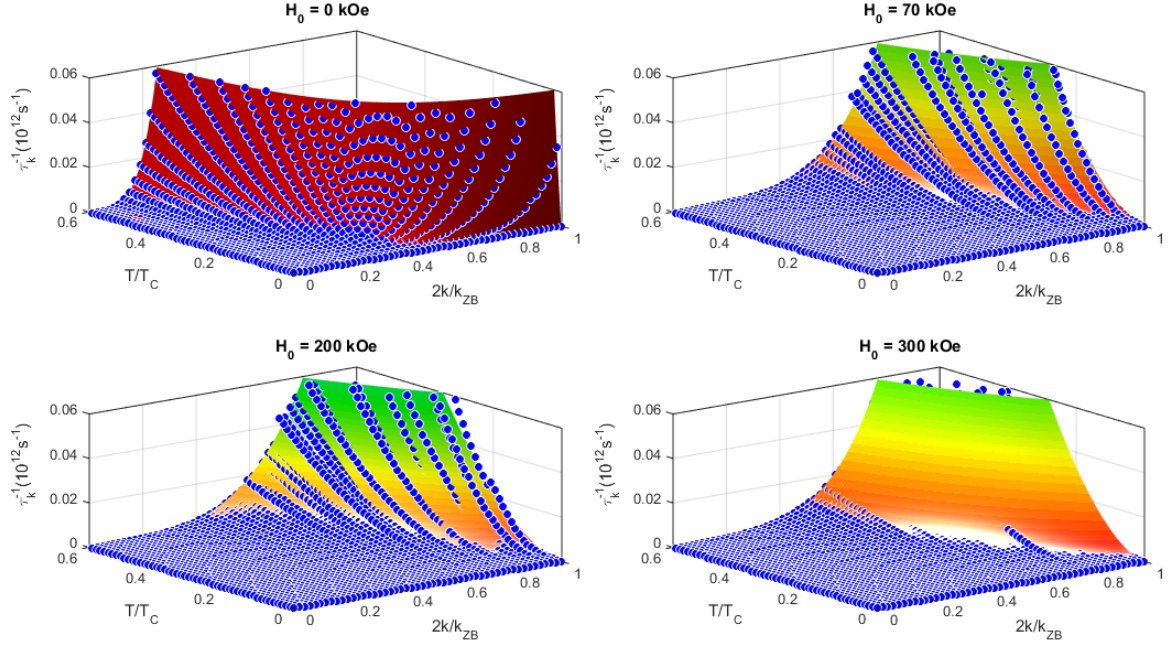


Figura 5.12: Comparação da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG calculada com a equação (5.119) e o respectivo ajuste da mesma usando a equação (5.121), onde os coeficientes C'_{mn} s para os valores de campo magnético considerado de 0 kOe, 70 kOe, 200 kOe e 300 kOe, estão dados nas tabelas A.1, A.1, A.1 e A.1 respectivamente.

e fixando o vetor de onda e também a temperatura. Nesta situação, escolhemos um valor para vetor de onda reduzido $2k/k_{ZB}$ somente, e quatro valores diferentes para a temperatura reduzida T/T_C . Os resultados de nossas estimações numéricas são apresentadas nos gráficos da figura 5.13. Se observa que para a faixa de valores de campo magnético aplicado, compreendida entre 0 kOe e 100 kOe, existe uma diminuição da taxa de relaxação, o qual é um resultado esperado posto que o campo magnético aplicado aumenta o valor da frequência de excitação e o comportamento das ondas de spins propagantes é a se relaxar mais rápido.

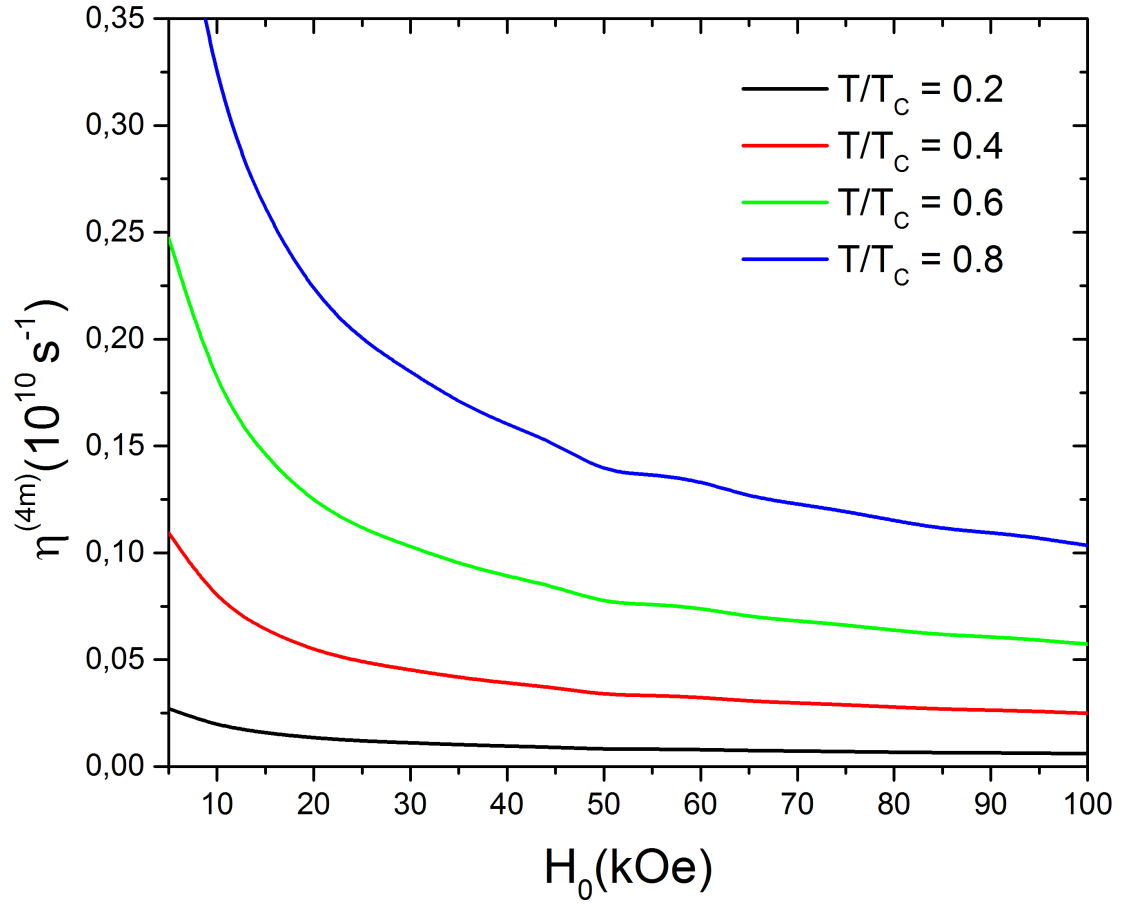


Figura 5.13: Taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG em função do campo magnético externo, calculada com a equação (5.119) para diferentes valores de temperatura e vetor de onda $q = 2k/k_{ZB} = 0.4$.

CAPÍTULO 6

PROPRIEDADES TÉRMICAS DE MÁGNONS NO YIG EM CAMPOS MAGNÉTICOS EXTERNOS MUITO INTENSOS

Introdução

Muitas propriedades físicas e parâmetros associados ao YIG tem sido explicadas e calculadas satisfatoriamente, mas quando o caso tratado são as propriedades térmicas de mágnons a situação muda o qual fica em evidência ao revisar a literatura correspondente, pois os resultados das condutividades térmicas e calores específicos discrepam bastante a temperatura ambiente [132, 136]. Uma das principais razões está em que para temperaturas maiores aos 10 K as propriedades térmicas no YIG são devido principalmente a fônons, dificultado as medições das contribuições as propriedades térmicas que fazem os mágnons [137, 140]. Além do anterior temos que adicionar o conhecimento da relação de dispersão em toda a primeira zona de Brillouin, mas as medidas feitas envolvem só números de onda pequenos, um fato associado à dificuldade de fazer espalhamento de nêutrons em ferrimagnetos, isto explica porque até agora as propriedades térmicas dos mágnons são bem entendidas em baixas temperaturas e números de onda pequenos.

Por outra parte, para entender bem a natureza das interações entre os fluxos de calor, carga e magnetização nos materiais, resulta conveniente examinar aqueles onde existe presença de uma ou duas das excitações elementares mais relevantes somente, também que ao mesmo tempo aconteçam de maneira simultânea. Então para estudar as interações fônons-mágnons, o YIG é um bom candidato porque possui uma banda gap de energia relativamente grande, uma temperatura de Curie alta, é um material que eletricamente é isolante e além disso possui uma fase de ordenamento magnético alto na faixa de temperaturas acessíveis experimentalmente, isto faz com que ele seja usado muito nos experimentos de spin-caloritronics. Especificamente, este material tem uma banda gap aproximadamente de 2.85 eV, suas temperaturas críticas de Curie e Debye são $T_C = 550$ K e $T_D = 531$ K respectivamente, estas temperaturas são extraordinariamente parecidas e relativamente altas. Então as propriedades eletrônicas e magnéticas podem ser mantidas a temperatura ambiente e abaixo desta. Apesar da ampla utilização deste material em experimentos de spin-caloritronics ainda ficam perguntas pendentes por resolver. Precisamente vamos trabalhar neste capítulo nas propriedades térmicas quando há campos magnéticos externos aplicados muito intensos e além disso são consideradas temperaturas ambientes no material YIG.

6.1 Propriedades térmicas de mágnons em YIG, em campos magnéticos intensos

6.1.1 Ajuste da magnetização espontânea do YIG em função da temperatura

Consideremos uma amostra monocristalina de YIG, a diminuição da magnetização espontânea na direção do equilíbrio com o aumento da temperatura está relacionado

ao número de mágnons excitados termicamente de acordo com a relação:

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}} \quad (6.1)$$

Onde N é o número de spins na amostra [8, 12] e $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ é a distribuição de Bose-Einstein. A soma em $\mathbf{k}$ da equação (6.1) pode ser transformada numa expressão integral, por meio da prescrição $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V/(2\pi)^3 \int d^3k$. Adicionalmente, se expressamos o parâmetro de rede como $a = (V/N)^{1/3}$, obtemos a expressão:

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}) - 1} \quad (6.2)$$

Para campos bastante intensos, a relação de dispersão mais apropriada é dada pela equação (5.96). Como a integração na relação (6.2) é feita em k , nós em seu lugar vamos fazê-la em $\gamma_{\mathbf{k}}$. Também é importante usar as mudanças de variáveis: $k = xk_{ZB}/2$, $\gamma_x = \cos(x\pi/2)$, e para o argumento da função exponencial do fator de Bose-Einstein tomaremos $u_0(H_0, T) \equiv u_0 \equiv \beta\hbar\omega_0 = \gamma\hbar H_0/K_B T$ e também $v_0(H_0, T) \equiv v_0 \equiv \beta\hbar\omega_A = 2zSJ/K_B T$, com isto temos que a integral (6.2) é transformada em:

$$\frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}) - 1} = \frac{\pi}{16} \int_0^1 \frac{x^2 dx}{\exp(u_0 + v_0(1 - \gamma_x)) - 1} \quad (6.3)$$

No lado direito da integral (6.3) precisamos fazer algumas mudanças adicionais. Assim, o primeiro que faremos é tomar $t(x) = \gamma_x = \cos(x\pi/2)$ e por conseguinte a relação inversa, $x = (2/\pi) \arccos t$. Daqui imediatamente obtemos: $dx = -(2/\pi)(1 - t^2)^{-1/2} dt$. Em segundo lugar, para definir os limites de integração note que se $x = 0$ então $t = 1$ e se fazemos $x = 1$ resulta $t = 0$. Ao levar em conta, todas as mudanças estabelecidas e substituindo o resultado encontrado na expressão para a magnetização espontânea (6.2) obtemos o resultado:

$$\frac{M(T, H_0)}{M_0} = 1 - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^1 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1 - t^2}} \frac{dt}{\exp[u_0 + v_0(1 - t)] - 1} \quad (6.4)$$

Aqui estamos assumindo que M_0 corresponde ao caso quando: $T = 0$ e $H_0 = 0$ respectivamente. Tomando a situação de campo magnético aplicado igual a zero, o quociente $M(T, H_0)/M_0$ é representado por $M(T)/M_0$ e a expressão (6.4), é transformada da seguinte maneira:

$$\frac{M(T)}{M_0} = 1 - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^1 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1-t^2}} \frac{dt}{e^{v_0(1-t)} - 1} \quad (6.5)$$

Para iniciar as estimativas numéricas, consideremos a situação $H_0 = 0$. Então, o primeiro que fazemos é criar um modelo de ajuste numérico para magnetização espontânea usando os dados experimentais de E. E. Anderson [141] apresentados na figura 6.1(a), em lugar de ajustar a os dados experimentais usando a equação (6.5). De acordo com isso, o modelo de ajuste numérico que propomos para $M(T)/M_0$ é do tipo:

$$\left[\frac{M(T)}{M_0} \right] = 1 + \sum_j \alpha_j \left(\frac{T}{T_C} \right)^{\beta_j} \quad (6.6)$$

onde α_j e β_j são os parâmetros de ajuste e T_C é a temperatura crítica de transição a uma fase de desordem. Usando os dados de Anderson [141], o valor encontrado para T_C é 559.2690 K. Portanto, ao aplicar o método de otimização de Nelder-Mead [44], o melhor ajuste fornece para os parâmetros α'_j s e β'_j s os valores da tabela 6.1.1. Os resultados obtidos com os parâmetros da tabela 6.1.1, são apresentados na figura 6.1 (b). Neste caso, o campo magnético externo aplicado é nulo e o argumento da função exponencial é transformado em termos de quantidades mais tratável, isto devido principalmente a que os números envolvidos são muito pequenos e numericamente é mais conveniente escrever esse argumento em termos de quantidades sem dimensão e valores de máquina representáveis. Para isso, tomemos $SJ = J_s$ e também $\varepsilon_0 = K_B T_C / 2z$. Isto supõe que tomaremos a temperatura no sistema como $T = \tau T_C$. Além disso, vamos escrever J_s como $J_s = \sigma \varepsilon_0$ sendo τ e σ quantidades sem dimensão. Com isto, v_0 será transformado como $v_0 = 2zSJ/K_B T = \sigma/\tau$ e a equação (6.5) fica.

$$\frac{M(T)}{M_0} = 1 - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^1 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1-t^2}} \frac{dt}{e^{(\sigma/\tau)(1-t)} - 1}, \quad \text{para } 0 < \tau \leq 1 \text{ e } \sigma > 0. \quad (6.7)$$

A equação (6.7) representa uma situação muito simplificada, pois os efeitos da in-

Índice - j	Parâmetros	
	α_j	β_j
1	0.2975	1.5
2	-5.3763	2.5
3	8.8600	3.5
4	-4.6788	4.5

Tabela 6.1: Valores obtidos para os parâmetros α'_j s e β'_j s do modelo de ajuste 6.6, para a magnetização espontânea usando o método de otimização de Nelder-Mead.

teração dipolar foram despreziados e além disso a contribuição Zeeman foi anulada. Também, para preservar o número de modos possíveis fornecidos pela relação de dispersão que temos considerado, o raio da zona esférica de Brillouin deve ser ajustado. Então para fazer isto, notemos que o lado direito da expressão (6.3) quando tentemos fazer os ajustes, ela é tal que poderá ser rescrita como:

$$\frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta \hbar \omega_{\mathbf{k}}) - 1} \propto \frac{(k_{ZB}a)^3}{2\pi^2} \int_0^1 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1-t^2}} \frac{dt}{e^{(\sigma/\tau)(1-t)} - 1} \quad (6.8)$$

Em consequência, podemos usar a equação (6.7) para criar um modelo de ajuste da magnetização espontânea e a partir dali determinar o valor de k_{ZB} aproximado ao valor experimental. Também, podemos combinar os modelos de ajustes novo e o dado em (6.6) para fazer estimativas numéricas da constante de exchange a primeiros vizinhos J em função da temperatura. De acordo com o anterior, as modificações que tomamos em (6.7), consistem em introduzir um novo parâmetro b para obter k_{ZB} , e também modificar o argumento do fator de Bose - Einstein, obtendo como novo modelo de ajuste à expressão:

$$\frac{M(T)}{M_0} = 1 - \frac{b}{2\pi^2} \int_0^1 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1-t^2}} \frac{dt}{\exp \left[4\pi\sigma \left(\frac{1-t}{\tau + \lambda} \right) \right] - 1} \quad (6.9)$$

onde os parâmetros τ , σ obedecem as mesmas restrições que em (6.7). O parâmetro λ , foi introduzido em (6.9) para evitar uma singularidade no modelo de ajuste quando a

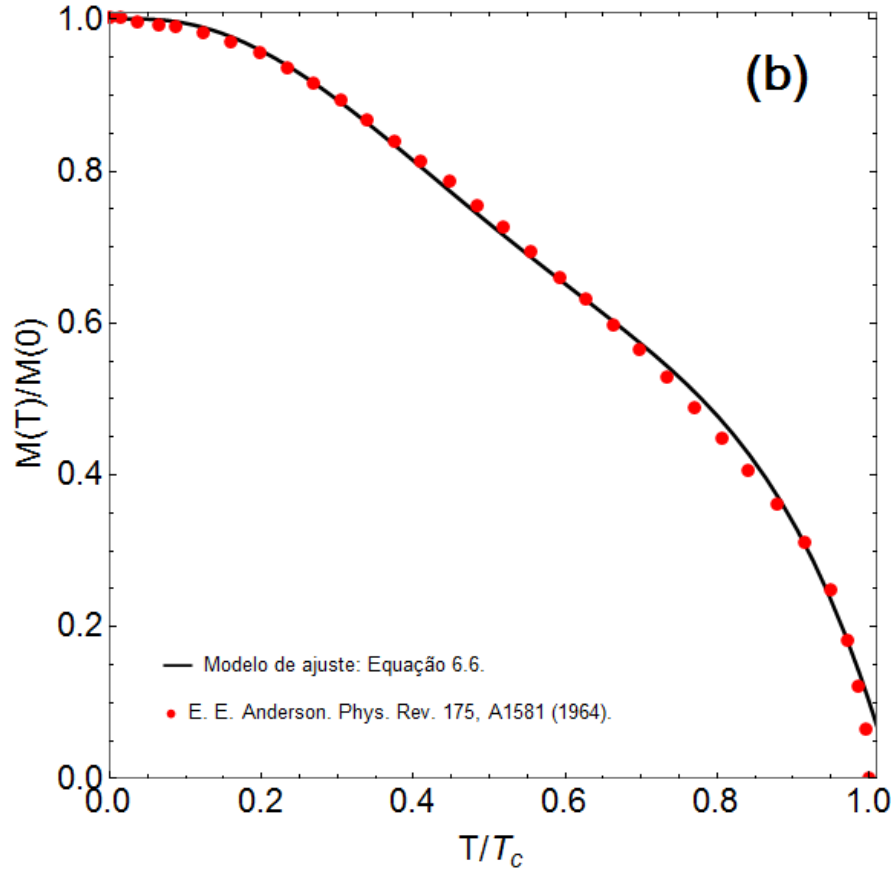


Figura 6.1: (a) Variação da magnetização espontânea com a temperatura para o YIG [141]. (b) Modelo de ajuste para os dados de Anderson usando a equação 6.6.

temperatura tende a zero, e satisfaz as restrições $\lambda > 0$ e $\lambda \rightarrow 0^+$. Adicionalmente, o argumento da exponencial da equação (6.9) corresponde a uma expressão sem correção alguma. Portanto, ao considerar a equação corrigida temos que levar em conta que o parâmetro σ está relacionado diretamente com a interação de exchange e a superfície de energia que usamos para aproximá-la é de simetria esférica. Assim, o fator 4π que aparece na equação (6.9) é em realidade uma correção à esfericidade da superfície de energia, é por isso que tomamos a mudança $\sigma \rightarrow 4\pi\sigma$.

Na aproximação de ondas de spins do capítulo 1, encontramos que a contribuição a segunda ordem da interação de exchange é proporcional ao fator $(1 - \gamma_{\mathbf{k}})$, o qual está contido no coeficiente $A_{\mathbf{k}}$ da equação 1.61. A figura 6.2 mostra a deformação que sofre a superfície no espaço recíproco que representa a contribuição de exchange quando nós

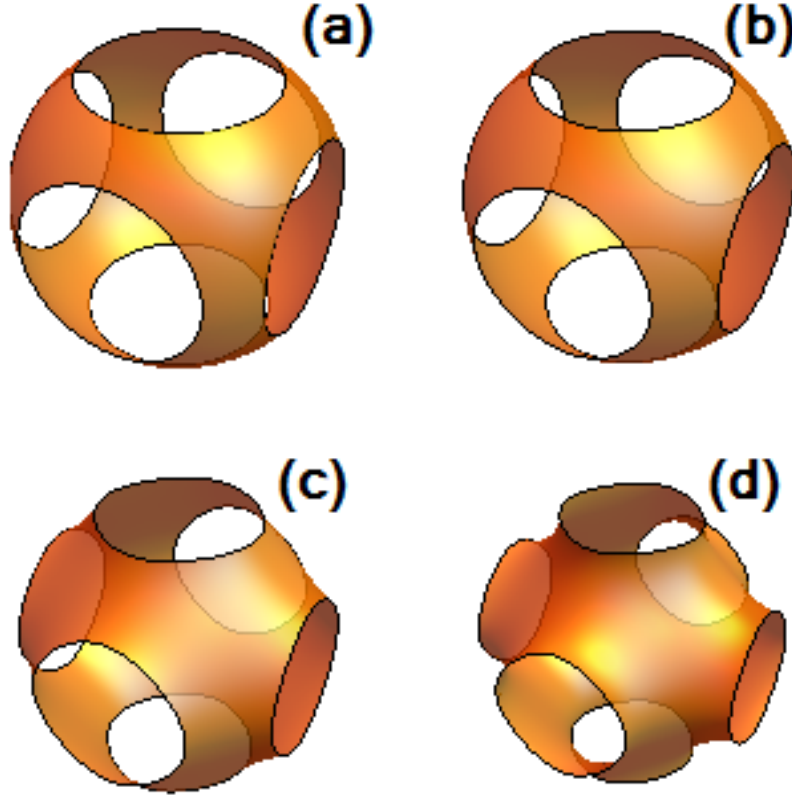


Figura 6.2: Mudança no aspeto geométrico da superfície que representa à energia exchange no espaço recíproco com o aumento da magnitude do vetor de onda na primeira zona de Brillouin. Para os quatro gráficos de superfície temos que $k_x = k_y = k_z$. Assim temos em: (a) $k_x = 1.00 \times 10^{-6}k_{ZB}$, (b) $k_x = 0.40k_{ZB}$, (c) $k_x = 0.80k_{ZB}$, (d) $k_x = 1.00k_{ZB}$ respectivamente, tomando $k_{ZB} = \pi/a$.

afastamos do ponto $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Dos primeiros dois gráfico fica em evidência que a superfície de energia é esférica perto de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, mas quando estamos na vizinhança da fronteira da zona, a aproximação de zona esférica já não é válida, isto obrigatoriamente conduz à introdução do fator 4π da equação (6.9). Além disso, temos que lembrar que para realizar os ajustes vamos tomar as integrações até a metade da zona de Brillouin.

Para usar a equação (6.9), podemos proceder de duas formas diferentes. A primeira, consiste em obter os valores de b e σ ao ajustar os dados experimentais para a magnetização espontânea, tomando um valor fixo e muito pequeno de λ . A segunda, é usar o valor encontrado para b que fornece a correção em k_{ZB} e então usar os valores dos parâmetros da tabela 6.1.1 e com isso determinar quais devem ser os valores de σ

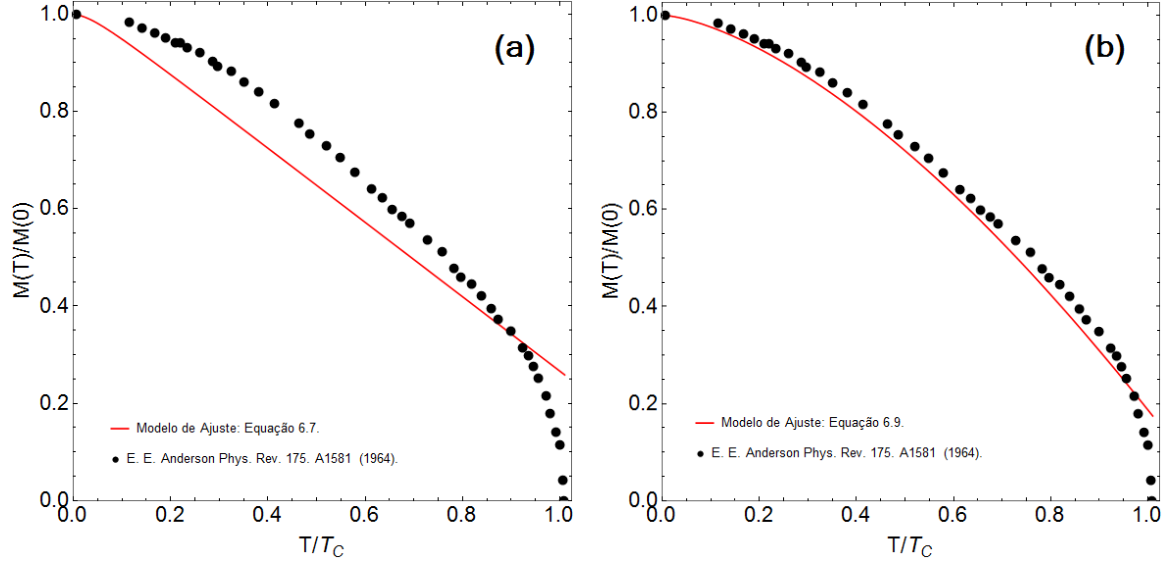


Figura 6.3: Comparação dos resultados fornecidos pelos modelos de ajuste para a magnetização espontânea. (a) Equação (6.7) sem correção alguma. (b) Equação modificada (6.9) considerando os efeitos de simetria esférica da superfície de energia.

que convertem as equações (6.9) e (6.6) idênticas. Então, observamos que $\sigma = \sigma(T)$, com isto podemos obter uma constante de exchange efetiva J_{eff} que também depende da temperatura. Então, antes de considerar o primeiro caso, tomamos a equação (6.7) e ajustamos os dados de Anderson. Por conseguinte, é possível obter somente o parâmetro σ . Assim, ao aplicar o método de ajuste de Nelder-Mead [44], o valor encontrado é $\sigma = 0.436$, daqui obtemos que $\omega_A = 2zSJ/\hbar = 30.3400$ THz que não tem sentido, isto mostra que a aproximação de zona de Brillouin esférica não é muito válida. Na figura 6.3 (a) se mostra o ajuste e fica em evidência que o resultado é bastante ruim.

Por outro lado, quando usamos a expressão (6.9) para ajustar os dados experimentais podemos encontrar k_{ZB} e também ω_A . Assim, se usamos o valor $\lambda = 10^{-16}$ obtemos que $b/2\pi^2 = 0.5443$, daqui temos que $k_{ZB}/2 = \sqrt[3]{b}/a = 1.7829 \times 10^7$ cm $^{-1}$. Também do ajuste temos que $\sigma = 0.1578$, com o qual obtemos que $\omega_A = 10.9684$ THz e se comparamos com o valor obtido no capítulo 1, o novo resultado tem sentido e porém válido. Na figura 6.3 (b) se mostra o resultado do ajuste feito com a equação (6.9), se observa que há uma melhoria bastante perceptível e isso é devido ao efeito que tem o

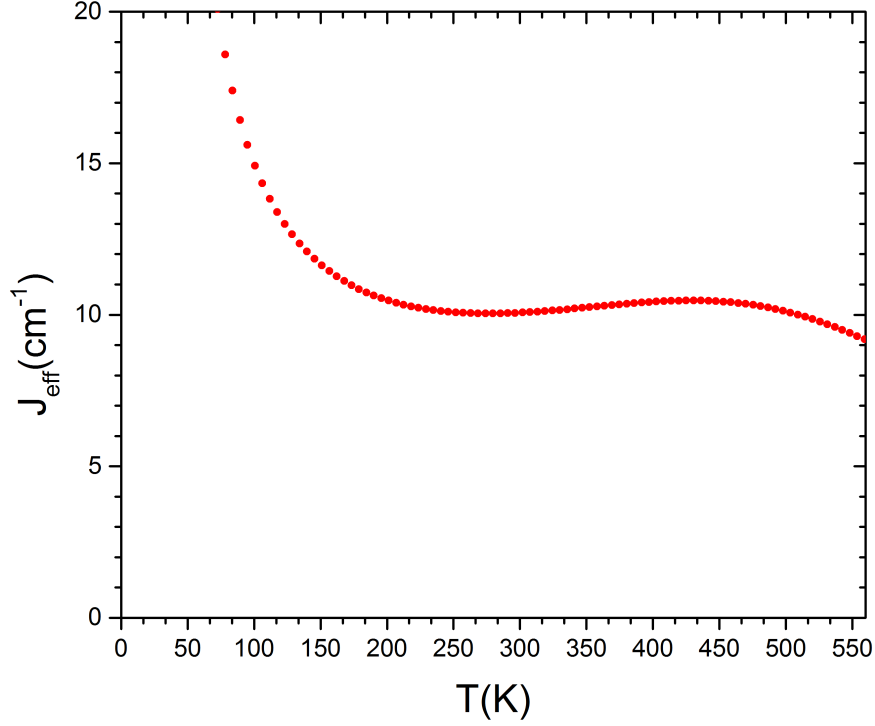


Figura 6.4: Estimação da constante de exchange como uma função da temperatura a partir dos dados experimentais de magnetização espontânea do YIG.

fator 4π . Para terminar, vamos usar a segunda maneira de proceder. Então, como o YIG tem uma estrutura cristalina complexa tomamos $J \rightarrow J_{eff}$. Com isto, podemos fazer uma estimativa da constante de exchange a primeiros vizinhos em função da temperatura, assim de acordo as mudanças que temos feito J_{eff} pode ser escrita como:

$$J_{eff}(T) = \left(\frac{K_B T_C}{2zS} \right) \sigma(T) \quad (6.10)$$

Lembremos que para cada valor de temperatura, é possível a partir dos dados de magnetização espontânea encontrar um valor para σ . Portanto, tomando os valores das quantidades constantes da equação (6.10) e buscando o valor de σ que faz com que as equações (6.6) e (6.9) sejam idênticas, o resultado é mostrado na figura 6.4.

6.2 Calor específico a volume constante de mágnons em YIG

Nesta seção vamos determinar o calor específico dos mágnons no YIG, mas para isso tomaremos em conta os efeitos de campos externos aplicados muito intensos. Então, de acordo com a definição de calor específico [142, 143, 144], o calor específico por unidade de volume a volume constante para o sistema de mágnons está dado por:

$$C_M = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial U_M}{\partial T} \right)_V \quad (6.11)$$

onde U_M é a energia interna [144] do sistema de mágnons e definida por:

$$U_M = \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}}{e^{E_{\mathbf{k}}/K_B T} - 1}, \quad \text{onde } E_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_{\mathbf{k}} \quad (6.12)$$

É assumido implicitamente que o sistema de mágnons está em equilíbrio térmico a temperatura T e seus estados são caracterizados pelo vetor de onda $\mathbf{k}$. Tomando a derivada de (6.12) com respeito à temperatura, encontramos que o calor específico dos mágnons é dado por:

$$C_M = \frac{K_B}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{K_B T} \right)^2 \frac{e^{E_{\mathbf{k}}/K_B T}}{(e^{E_{\mathbf{k}}/K_B T} - 1)^2} \quad (6.13)$$

Para simplificar as expressões, tomaremos a definição $Y_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}/K_B T$, é claro que $Y_{\mathbf{k}}$ depende explicitamente do campo externo aplicado por meio de $\omega_{\mathbf{k}}$ e também da temperatura. Para a situação que vamos descrever, usaremos a relação de dispersão (5.96), isto implica que não há nenhuma dependência explícita na variável $\phi_{\mathbf{k}}$ e como também temos eliminado o termo dipolar, tampouco haverá dependência em $\theta_{\mathbf{k}}$. Além do mais, aproximaremos a soma dada em (6.13) por uma integral. Assim ao momento de tomar a integração nas variáveis angulares, aparece um fator igual a 4π , ficando somente uma integral na variável de momento, isto conduz a seguinte expressão para

o calor específico.

$$C_M = \frac{K_B}{2\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} dk k^2 \frac{Y_{\mathbf{k}}^2 e^{Y_{\mathbf{k}}}}{(e^{Y_{\mathbf{k}}} - 1)^2} \quad (6.14)$$

Para fazer as estimativas numéricas do calor específico dado em (6.14), aproveitaremos as mudanças da seção 6.1.1 e tomaremos outras adicionais, por exemplo, definimos $\Lambda_H = \hbar\gamma H_0/K_B T_C$, com isto transformamos a $Y_{\mathbf{k}}$ como $Y_{\mathbf{k}} = (\Lambda_H + \sigma(1 - \gamma_{\mathbf{k}}))/\tau$, onde σ e τ foram definidas na seção anterior. Além disso, o fator que contém as exponenciais pode ser transformado como:

$$\frac{Y_{\mathbf{k}}^2 e^{Y_{\mathbf{k}}}}{(e^{Y_{\mathbf{k}}} - 1)^2} = \frac{1}{4} Y_{\mathbf{k}}^2 \text{csch}^2 \left(\frac{Y_{\mathbf{k}}}{2} \right) \quad (6.15)$$

Lembrando que $k = xk_{ZB}/2$ e também $\gamma_x = \cos(\pi x/2)$ a integral dada em (6.14) fica:

$$C_M = \frac{K_B k_{ZB}^3}{64\pi^2} \int_0^1 dx x^2 Y_x^2 \text{csch}^2 \left(\frac{Y_x}{2} \right) \quad (6.16)$$

Para a integral que está na variável x da equação (6.16), novamente tomamos a mudança $t = \cos(\frac{\pi x}{2}) = \gamma_x$ e com as mudanças da seção anterior, a expressão integral (6.16) é transformada em:

$$C_M = \left(\frac{K_B}{8\pi^2 \tau^2 a^3} \right) \int_0^1 dt \left(\Lambda_H + \sigma(1 - t) \right)^2 \frac{\arccos^2 t}{\sqrt{1 - t^2}} \text{csch}^2 \left(\frac{\Lambda_H}{2\tau} + \frac{\sigma}{2\tau}(1 - t) \right) \quad (6.17)$$

Para fazer as estimativas numéricas do calor específico usando a equação (6.17) empregamos para os valores dos parâmetros que aparecem nela, os valores encontrados na seção anterior. Então, usando a expressão encontrada para C_M , iniciamos calculando três curvas de calor específico como uma função do campo magnético externo, variando desde 0 até 300 kOe no regime de baixas temperaturas, especificamente são consideradas os casos de $T = 3, 8$ e 10 K e que são indicados pelas curvas azul, vermelha e preta respectivamente da figura 6.5, no gráfico que esboçamos ali, pode ser apreciado com clareza que para baixas temperaturas quando modificamos a temperatura os deslocamento apresentados no calor específico como função do campo magnético

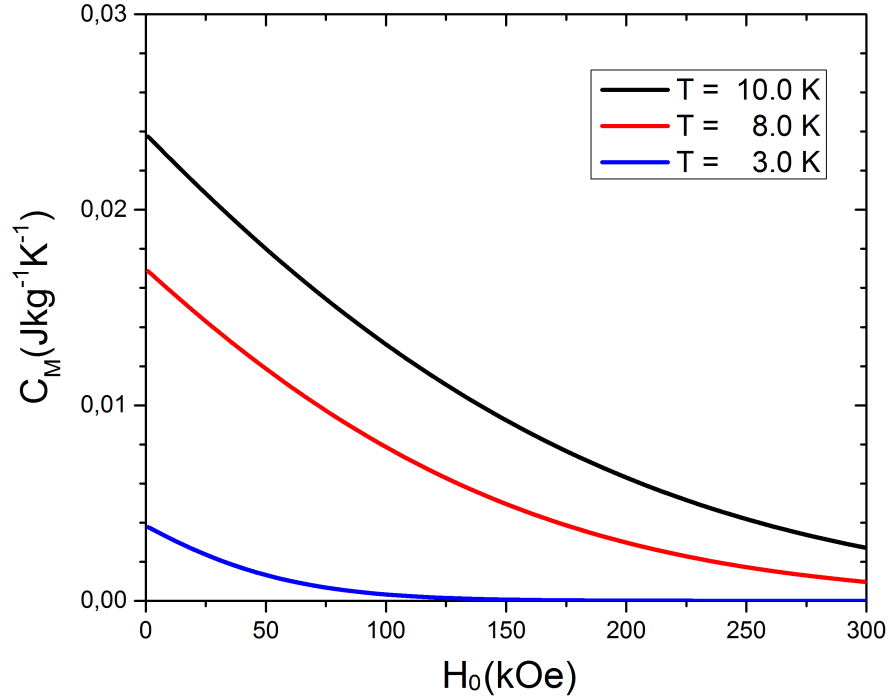


Figura 6.5: Calor específico de mágnons a volume constante em YIG como uma função do campo magnético para valores fixos de temperatura.

são bastante apreciáveis. Assim quanto mais baixa seja a temperatura as mudanças sofridas são mais pronunciadas. Também, pode ser visto que se o campo torna-se mais intenso o calor específico experimenta uma queda muito forte, por exemplo isto pode ser evidenciado com maior facilidade para o caso da curva azul que corresponde a caso de 3 K, em relação as curvas superiores que corresponde a 8 e 10 K.

Os resultados na figura 6.5, fornecem uma utilidade muito importante, eles permitem dar uma melhor interpretação às medidas experimentais tomadas por S. R. Boona e J. P. Heremans [145], que tem medido as propriedades térmicas do YIG em campos magnéticos muito intensos. Assim por exemplo, eles realizaram medidas do calor específico em função da temperatura em ausência de campo magnético aplicado e para um valor de campo aplicado de 70 kOe. Adicionalmente, estes autores tomam a diferença da medida entre 70 kOe e a medida com 0 kOe. Para o resultado encontrado erroneamente eles dão uma mal interpretação, pois argumentam que a contribuição ao calor específico dos mágnons é anulada pela aplicação do campo magnético muito

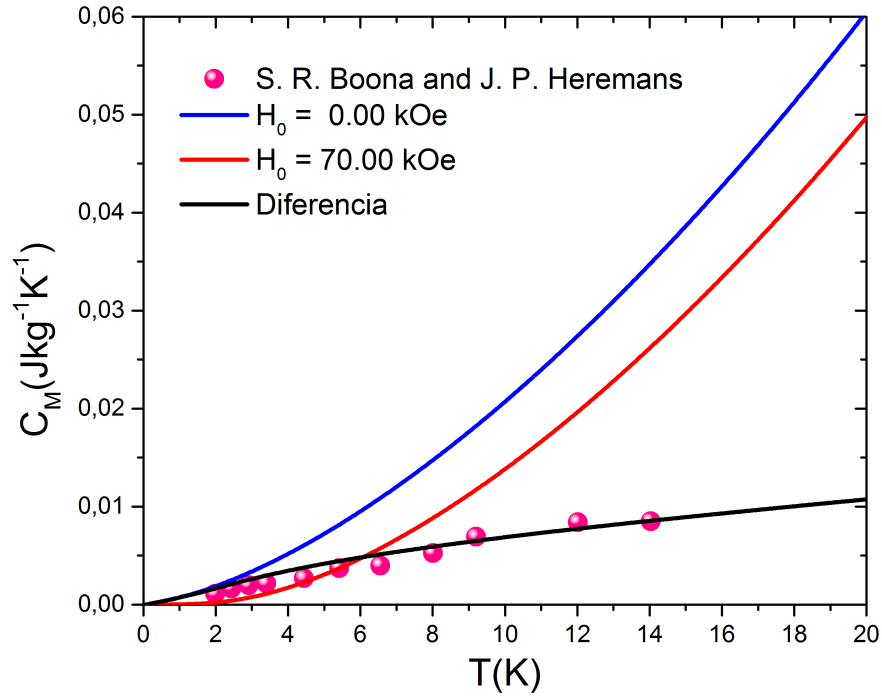


Figura 6.6: Calor específico de mágnons a volume constante em YIG como uma função da temperatura para valores fixos de campo magnético. A curva preta é a diferença das curvas do calor específico para 0 kOe e 70 kOe respectivamente e comparada com os dados de Boona *et. al.* [145].

intenso. Podemos a partir de nossas estimativas, contidas no gráfico da figura 6.5 que não existe tal supressão e para observar esse fato é suficiente traçar uma linha vertical que corte ao eixo horizontal justamente no valor $H_0 = 70$ kOe e perceber que para baixas temperaturas existe sempre uma contribuição ao calor específico por parte dos mágnons.

Por outra parte também temos feito uma estimativa numérica do calor específico como uma função da temperatura para os casos de campo nulo e campo magnético aplicado de 70 kOe. Como é natural para interpretar os dados experimentais com a estimativa realizadas, tomamos a diferença para esses valores de campo aplicado. Assim, na figura 6.6 apresentamos um gráfico que contém três curvas: a azul quando não há campo, a vermelha onde está aplicado o campo magnético de 70 kOe e a curva preta que corresponde a diferença da duas primeiras, embora os pontos são os dados experimentais. Então fica claro das curvas, que esses pontos que são erradamente interpretados por

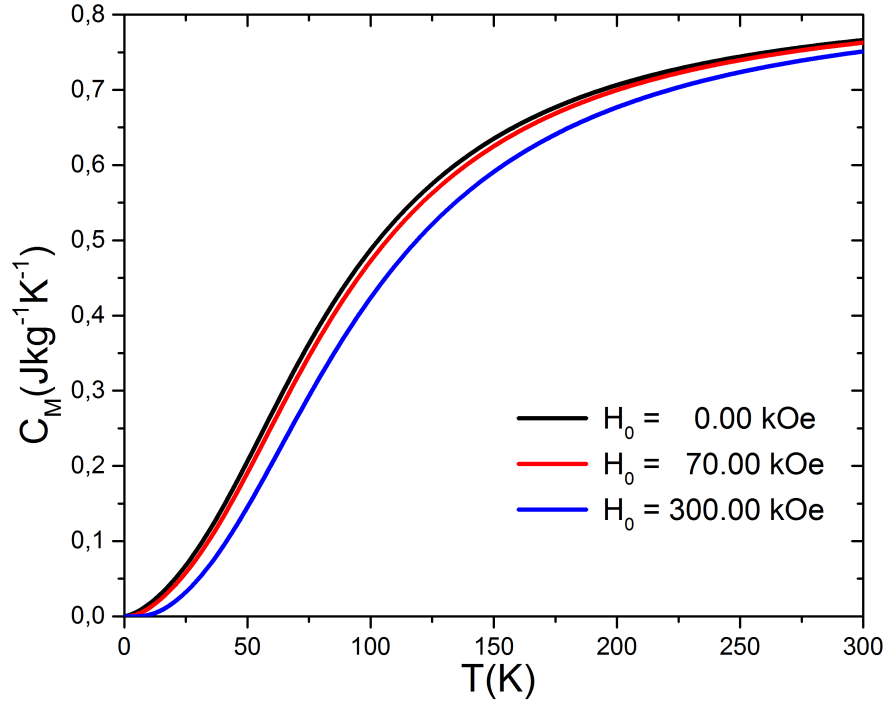


Figura 6.7: Curvas de calor específico a volume constante de mágnons em campos magnéticos muito intensos em YIG, quando os valores do campo magnético aplicado são fixos e temperaturas menores que 300 K. As estimações das curvas foram feitas usando a equação (6.17).

Boona *et. al*, em realidade não são outra coisa que uma diferença dos calores específicos entre 0 e 70 kOe respectivamente, em lugar de uma contribuição total dos mágnons ao calor específico. Pelo visto da comparação, as estimativas feitas da diferença dos calores específicos está em acordo com o resultado experimental. Também, é ressaltado que a interpretação mais apropriada é dada aqui e reforçada na referência [146].

Além do anterior, temos estendidos nossas estimações do calor específico para valores da temperatura que vão de 0 K até 300 K, estes resultados são apresentados no gráfico da figura 6.7. Aqui, são calculadas três curvas de calor específico para os valores de campo magnético aplicado de 0, 70 e 300 kOe que são representadas pelas curvas preta, vermelha e azul respectivamente. Neste gráfico, fica em evidência que para temperaturas próximas da temperatura ambiente as contribuições dos mágnons ao calor específico para diferentes campos aplicados diferem muito pouco, sem importar o

valor de campo considerado e as variações sofridas com a temperatura são desprezíveis, pode ser notado que as contribuições são bastante apreciáveis para $T \lesssim 200$ K.

6.3 Condutividade Térmica dos Mágnons

Para calcular a condutividade térmica dos mágnons no YIG, começaremos escrevendo a equação de transporte de Boltzmann na aproximação de tempo de colisão. A motivação de fazer isto, é porque vamos primeiro a encontrar uma expressão geral e dali tomaremos o caso particular que consiste em assumir uma condutividade térmica isotrópica. Então, denotaremos a condutividade térmica como κ e não deve ser confundida com o vetor de onda $\mathbf{k}$ associado ao o momento dos mágnons. Então, de acordo ao anterior temos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (6.18)$$

Aqui f representa a função de distribuição, $\mathbf{p}$ o momento das partículas, $\mathbf{F}$ a força externa atuando também nas partículas mesmas e τ o tempo empregado entre um par de colisões consecutivas. Para o presente caso, a força externa sobre os mágnons é nula, assim o termo proporcional a $\mathbf{F}$ vai se anular. Assim levando em conta que a função f depende do estado de momento das partículas, nós vamos incluí-lo substituindo o subíndice $\mathbf{k}$ nessa função para indicar que ela tem uma dependência explícita em $\mathbf{k}$. Além do mais, lembrando que $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, a equação de transporte (6.18) é transformada em:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla f_{\mathbf{k}} = -\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\tau} \quad (6.19)$$

Por outro lado, usando uma aproximação de tipo linear a função de distribuição pode ser escrita como $f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^{(0)} + g_{\mathbf{k}}$, onde $f_{\mathbf{k}}^{(0)}$ e $g_{\mathbf{k}}$ são as funções que caracterizam o estado equilíbrio térmico e o deslocamento do equilíbrio térmico a primeira ordem da distribuição de mágnons, respectivamente. Usaremos a notação $\nabla = \partial/\partial \mathbf{r}$ para representar o operador gradiente em coordenadas espaciais. Então usando a aproximação estabelecida, podemos expressar o lado direito da equação (6.19) como $-(f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^{(0)})/\tau = -g_{\mathbf{k}}/\tau$. Adicionalmente, temos que o gradiente de $f_{\mathbf{k}}$ é $\partial f_{\mathbf{k}}/\partial \mathbf{r} = \partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}/\partial \mathbf{r} + \partial g_{\mathbf{k}}/\partial \mathbf{r}$, usando

estes argumentos na equação (6.19), encontramos:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial g_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial g_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{g_{\mathbf{k}}}{\tau} \quad (6.20)$$

Em relação à expressão (6.20) vamos supor que a função $f_{\mathbf{k}}$ é homogênea no tempo, isto significa que $\partial f_{\mathbf{k}}/\partial t \equiv 0$. Também que a função $g_{\mathbf{k}}$ é uniforme espacialmente o que significa que $\partial g_{\mathbf{k}}/\partial \mathbf{r} \equiv 0$. Portanto, com estas considerações é deduzido da equação (6.20) que a forma funcional para $g_{\mathbf{k}}$ é dada pela expressão $g_{\mathbf{k}} = -\tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot (\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}/\partial \mathbf{r})$. Como $f_{\mathbf{k}}^{(0)}$ depende explicitamente da temperatura, podemos usar a regra da cadeia e reescrever a forma de $g_{\mathbf{k}}$ em termos do gradiente de temperatura que existe no sistema como $g_{\mathbf{k}} = -\tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla T \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T}$. Assim, usando a expressão obtida para $g_{\mathbf{k}}$, a função de distribuição de Boltzmann $f_{\mathbf{k}}$ em primeira aproximação toma a forma:

$$f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^{(0)} - \tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla T \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T} \quad (6.21)$$

O lado direito da equação (6.21) contém: a função de distribuição que caracteriza o estado de equilíbrio das partículas e o segundo que aparece é o resultado das excitações térmicas que sofre o sistema quando é submetido a um gradiente de temperatura, produzindo assim um deslocamento da situação de equilíbrio.

Por outra parte, vamos supor que agora temos um conjunto de excitações coletivas, cujo espectro de energia (o em seu defeito de frequências) é degenerado e representado por $\omega_{j\mathbf{k}} = \omega_j(\mathbf{k})$, onde o índice j representa o j -ésimo ramo no espectro. A corrente de calor transportado pelas excitações no estado $j\mathbf{k}$ é dada por $E_{j\mathbf{k}} \mathbf{v}_{j\mathbf{k}} = \hbar \omega_{j\mathbf{k}} \mathbf{v}_{j\mathbf{k}}$, onde $\mathbf{v}_{j\mathbf{k}}$ é a velocidade de grupo para o modo apropriado e dado por $v_{j\mathbf{k}} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} E_{j\mathbf{k}}$, se multiplicamos pela função de distribuição que descreve as quase partículas que populam o estado $j\mathbf{k}$, então ao somar sobre j e $\mathbf{k}$ encontramos que a densidade de corrente de calor por unidade de volume do cristal é dada por:

$$\mathbf{J}_Q = \frac{1}{V} \sum_{j\mathbf{k}} f_{j\mathbf{k}} E_{j\mathbf{k}} \mathbf{v}_{j\mathbf{k}} \quad (6.22)$$

Substituindo a expressão de $f_{\mathbf{k}}$ dada em (6.21) na equação (6.22), e depois de fazer as simplificações respectivas, encontramos que $\mathbf{J}_Q$ numa aproximação linear da equação de transporte de Boltzmann pode ser escrita como: $\mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_Q^{(0)} - \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T$. Assim, concluímos que um deslocamento da densidade de corrente de calor, permite definir a condutividade térmica por unidade de volume para o sistema de mágnons como:

$$\delta \mathbf{J}_Q = -\boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T, \quad \text{onde } \boldsymbol{\kappa} \text{ é,} \quad \boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{V} \sum_{j\mathbf{k}} \tau_{j\mathbf{k}} E_{j\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{j\mathbf{k}} \mathbf{v}_{j\mathbf{k}}) \frac{\partial f_{j\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T} \quad (6.23)$$

A condutividade térmica por unidade de volume $\boldsymbol{\kappa}$, definida em (6.23), define em realidade uma quantidade tensorial que pode ser representada por uma matriz de ordem 3×3 . Então, vamos usar as letras gregas α e β como índices para representar as componentes cartesianas x, y, z de $\boldsymbol{\kappa}$ e quantidades relacionadas com ela. Em consequência, o produto diádico das velocidades e dado por $\mathbf{v}_{j\mathbf{k}} \mathbf{v}_{j\mathbf{k}} := \sum_{\alpha\beta} v_{j\mathbf{k}}^{(\alpha)} v_{j\mathbf{k}}^{(\beta)} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta$ se utiliza para encontrar uma expressão final de $\boldsymbol{\kappa}$ que tem a forma $\boldsymbol{\kappa} = \sum_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta$, onde $\mathbf{e}_\alpha$ e $\mathbf{e}_\beta$ são os vetores unitários cartesianos canônicos. Portanto, encontramos que as componentes da matriz que representa a $\boldsymbol{\kappa}$ são dadas por:

$$(\kappa_{\alpha\beta}) := \begin{pmatrix} \kappa_{xx} & \kappa_{xy} & \kappa_{xz} \\ \kappa_{yx} & \kappa_{yy} & \kappa_{yz} \\ \kappa_{zx} & \kappa_{zy} & \kappa_{zz} \end{pmatrix}, \quad \text{onde temos que:} \quad (6.24)$$

$$\kappa_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{j\mathbf{k}} \tau_{j\mathbf{k}} E_{j\mathbf{k}} v_{j\mathbf{k}}^{(\alpha)} v_{j\mathbf{k}}^{(\beta)} \frac{\partial f_{j\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T}$$

Por outra parte, quando o meio considerado é isotrópico, que é um de nossos principais fatos assumidos para calcular $\boldsymbol{\kappa}$, a matriz representada por $\kappa_{\alpha\beta}$ é reduzida obtendo-se que $\kappa_{\alpha\beta} \rightarrow \kappa_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta}$, onde $\delta_{\alpha\beta}$ agora representa a matriz identidade de ordem 3×3 . Adicionalmente, supondo que o quadrado das três componentes cartesianas das velocidades possuem o mesmo valor médio, isto é, $3(v_{j\mathbf{k}}^{(\alpha)})^2 = v_{j\mathbf{k}}^2$, encontramos que as

componentes da matriz $\kappa_{\alpha\beta}$ são reduzidas até:

$$\kappa_{xx} = \kappa_{yy} = \kappa_{zz} = \kappa = \frac{1}{3V} \sum_{j\mathbf{k}} \tau_{j\mathbf{k}} E_{j\mathbf{k}} v_{j\mathbf{k}}^2 \frac{\partial f_{j\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T} \quad (6.25)$$

A seguir, usaremos a relação de dispersão dada em (5.96) para calcular κ de (6.25). Portanto, podemos esquecer a degenerescência e que está indicada pelo índice j nas definições anteriores. Então, igual ao que foi feito em casos passados, converteremos a soma em (6.25) numa integral. Em consequência, a equação (6.25) é transformada em:

$$\kappa_M = \frac{1}{6\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} dk k^2 \tau_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T} \quad (6.26)$$

Lembrando que $f_{\mathbf{k}}^{(0)}$ é função de distribuição de Bose-Einstein, então sua derivada respeito da temperatura é dada pela expressão:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial T} = \frac{K_B}{E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{K_B T} \right)^2 \frac{e^{E_{\mathbf{k}}/K_B T}}{(e^{E_{\mathbf{k}}/K_B T} - 1)^2} \quad (6.27)$$

Substituindo a expressão (6.27) na equação (6.26) encontramos que a condutividade térmica vem dada por:

$$\kappa_M = \frac{k_B}{6\pi^2} \int_0^{k_{ZB}/2} dk k^2 \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right)^2 \frac{\tau_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 e^{E_{\mathbf{k}}/k_B T}}{(e^{E_{\mathbf{k}}/k_B T} - 1)^2} \quad (6.28)$$

Agora precisamos voltar até as equações (6.19) e (6.24), em primeiro lugar temos que $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}$, que é justamente o resultado exibido pela equação (6.24), como nos casos anteriores vamos a estender o limite superior até a metade do vetor de onda da primeira zona de Brillouin. Como antes, tomamos as mudanças de variáveis $T = \tau T_C$ e $k = (x\pi/2a)$ respectivamente, assim transformamos a equação (6.28) como:

$$\kappa_M = \left(\frac{\pi k_B \omega_A^2}{192 a \tau^2} \right) I_{\kappa}(H_0, \tau) \quad (6.29)$$

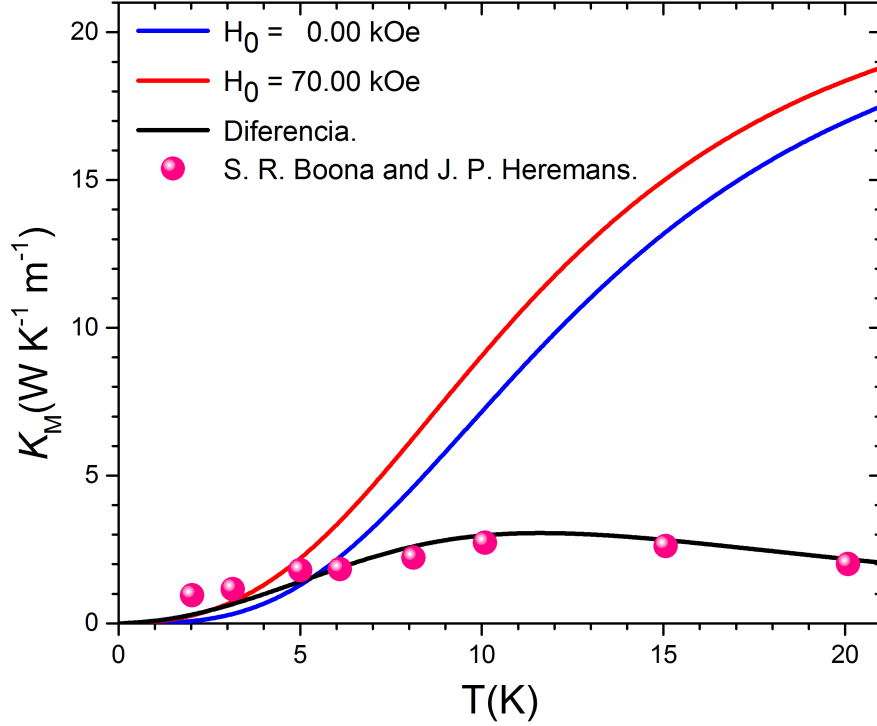


Figura 6.8: Condutividade térmica de mágnons em YIG como uma função da temperatura para campos magnéticos aplicados muito intensos. As curva vermelha e azul são calculadas usando a equação (6.29) e a curva preta e a diferença da vermelha com a azul e é comparada com as medidas realizadas por Boona *et. al.* [145].

onde $\gamma_x = \cos x\pi/2$, e o termo $I_\kappa(H_0, \tau)$ é definido por meio da integral:

$$I_{\kappa_M} = \int_0^1 dx \tau_x x^2 (1 - \gamma_x^2) (\Lambda_H + \sigma(1 - \gamma_x))^2 \text{csch}^2 \left(\frac{\Lambda_H}{2\tau} + \frac{\sigma}{2\tau}(1 - \gamma_x) \right) \quad (6.30)$$

Todas as quantidades que aparecem na integral (6.30) foram definidas nas seções anteriores, mas o termo τ_x é a soma da contribuição de 3-mágnons e 4-mágnons como definido é no capítulo anterior.

Faremos uma comparação dos dados experimentais com nossas estimações numéricas usando a equação que define a condutividade térmica de mágnons. Semelhante ao caso do calor específico, vamos usar outra vez as medidas experimentais de Boona e Heremans [145]. Novamente, confirmamos com nossas estimativas que os resultados obtidos experimentalmente na referência [145] representam deslocamentos mas esta vez

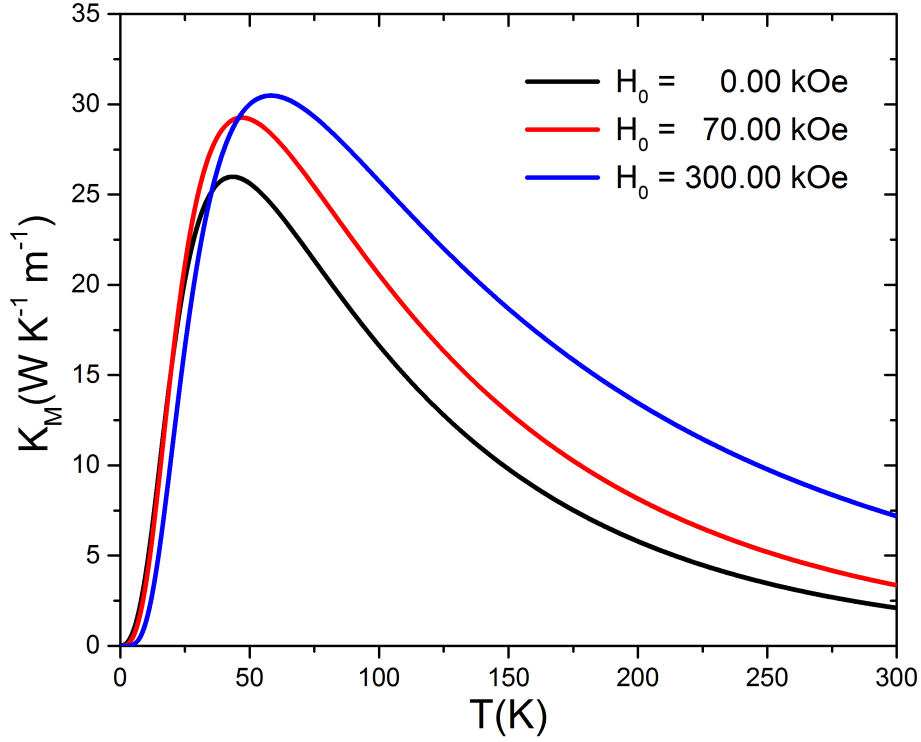


Figura 6.9: Condutividade térmica de mágnons em YIG como uma função da temperatura para três valores de campo magnético aplicado muito. As curvas são calculadas usando a equação (6.29) e a estimativa delas é estendida até temperaturas próxima à temperatura ambiente.

na condutividade térmica para os valores de campo magnético considerados e não uma contribuição total. Então na figura 6.8, temos um gráfico da condutividade térmica como uma função da temperatura, nesse gráfico temos três curvas, a curva azul quando não há campo aplicado e a curva vermelha quando o campo aplicado é de 70 kOe, a curva preta é a diferença da condutividade térmica entre 0 e 70 kOe respectivamente e os pontos são os dados experimentais. A diferença do calor específico, a condutividade térmica é pesada pela taxa de relaxação que depende da temperatura e do campo magnético externo aplicado. Como não há medidas experimentais desta quantidade na situação em que consideramos o cálculo da condutividade, apreciamos que os resultados obtidos nas estimativas de κ_M incluindo o cálculo das taxas de relaxação até a metade da zona de Brillouin onde a aproximação de zona esférica são bons. Isto, pode ser apreciado quando tomamos a diferença das condutividades térmicas devido a que ajustam bem os resultados experimentais.

Em adição ao anterior, estamos interessados em conhecer as propriedades térmicas do YIG para temperaturas próximas da temperatura ambiente, também calculamos κ_M na faixa de temperaturas que vão de 0 até 300 K. O resultado de nossa computação é esboçado no gráfico da figura 6.9, ali também desenhemos três curvas, cada uma delas para um valor de campo magnético aplicado. Assim, a curva preta é em ausência de campo magnético, a curva vermelha para 70 kOe e a curva azul para um campo de 300 kOe respectivamente. Pode ser visto, que cada uma das curvas alcança um máximo. A partir desse valor a condutividade sofre uma queda bastante rápida, associamos esta queda com o comportamento que possui a taxa de relaxação em função da temperatura, pois quando há um aumento da temperatura, o número de mágnons que são relaxados aumenta e isto tem como consequência uma diminuição de κ_M , devido que haverá uma menor contribuição a condutividade térmica.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES

A seguir apresento as conclusões globais focando os aspectos mais importantes dos trabalhos feitos nesta tese como também algumas perspectivas

- Usando a formulação de ondas de spins de Holstein-Primakoff aplicada a um ferromagneto foi possível ajustar as relações de dispersão experimental do YIG, sabendo que este material é de natureza ferrimagnética, apesar disso o modelo de ajuste resultou ser muito bom. Assim ao aplicá-lo, permitiu conhecer de maneira aceitável qual é o valor da frequência de excitação de mágnons nas proximidades da metade da primeira zona de Brillouin. Isto significa que a aproximação de zona esférica para a primeira zona de Brillouin deste material resulta ser aplicável. Também, foi verificado que os efeitos da interação dipolar magnética na formulação do modelo produz contribuições apreciáveis somente para vetores de onda cuja magnitude é pequena. Em contraste, foi verificado que a contribuição de exchange predomina para regiões que ficam mais afastadas do centro da primeira zona de Brillouin.

Semelhante ao caso do YIG, foi empregada a formulação de ondas de spins de Holstein-Primakoff para obter os modos de frequência de oscilação para um antiferromagneto simples de duas sub-redes como é o caso do FeF_2 . Com isso

também foi possível ajustar as relações dispersão experimental obtidas por espalhamento de nêutrons. A forma como foi reduzido o fator de forma, permitiu obter um ajuste muito bom com o qual se obteve além das frequências próprias de oscilação, também se obtiveram os campos de exchange e anisotropia. Como o resultado de ajuste foi excelente, este também pode ser estendido a outros fluoretos de metais de transição da forma XF_2 , onde X pode ser um dos Mn, Co, Ni.

- Com aplicação da formulação de ondas de spins de Holstein-Primakoff foi possível realizar a expansão em série do Hamiltoniano de interação do ferromagneto em termos de operadores de mágnons, assim foram obtidas as contribuições anarmônicas do espectro de excitações de ondas de spins, o Hamiltoniano de interação construído, somente incluiu interações de exchange e Zeeman. As contribuições calculadas que se empregaram para renormalizar a energia de mágnons foram justamente aquelas que conservam o momento e a energia. Especificamente, foi assumido que as contribuições anarmônicas principais em operadores de mágnons são devidas às de quarta ordem. Adicionalmente, tomamos a suposição básica de afirmar que o tratamento para materiais ferromagnéticos continua sendo válido para o YIG, sabendo que este material é de natureza ferrimagnética. Para realizar a renormalização mesma, foi empregado o formalismo das funções de Green de dois tempos dependentes da temperatura de Bogoliubov-Tyablikov. As cadeias infinitas de equações de movimentos para as funções de Green, foram truncadas considerando resultados até a consideração da função de Green de quarta ordem, e para eliminar a ligação entre as funções de Green de segunda e quarta ordem assumimos que a função de Green em operadores de mágnons de quarta ordem é proporcional à de segunda ordem. Com isto, foi possível obter expressões aproximadas explicitamente para as funções de correlação que surgiram no processo, as quais permitiram obter de forma direta a renormalização da energia de mágnons no YIG. Com os resultados calculados, foi possível calcular a magnetização espontânea para o YIG até temperaturas da

ordem da temperatura ambiente. Além disso, as estimativas da energia renormalizada de mágnons, serviu para mostrar que os modelos empregados para o estudo do efeito de spin Seebeck (SSE) em bicamadas FMI/NM entre um ferromagneto isolante (FMI) e um metal normal (NM) usando modelos para calcular as propriedades térmicas em YIG com expressões válidas para baixas temperaturas resultam ser inapropriadas e os resultados divergem muito dos obtidos a temperatura ambiente, estes estudos foram úteis para estudar o SSE e os resultados foram publicados [64].

- Para calcular a energia magneto cristalina em FeF_2 foi usado um hamiltoniano que incluiu as interações de exchange, Zeeman e anisotropia de um íon, este hamiltoniano foi diagonalizado escolhendo a base de funções do momento angular total. Então com os valores próprios de energia, se calcula a função de partição e dali se encontra a energia livre de Helmholtz. Logo após, se toma a expansão em série da energia livre respeito da orientação do campo magnético aplicado, isto permitiu a obtenção da expressão da energia magneto cristalina. Os resultados obtidos estão em bom acordo com os dados experimentais conseguidos por técnicas diferentes como o espalhamento de nêutrons ou espectroscopia Mössbauer. A forma de resolução do problema, aponta as falhas do tratamento feito por Ohlmann e Tinkham [45] em sua formulação teórica para determinar a anisotropia magneto cristalina.

Por outra parte, a suposição que a anisotropia de um íon fica bem representada pela anisotropia magneto cristalina por célula unidade permitiu a obtenção do campo de transição no limite de estabilidade AF, estes cálculos mostraram que o resultado foi aceitável. Com esta abordagem conseguimos melhores estimações para o campo de transição de spin-flop que aquelas obtidas por S. M. Rezende [47] empregando em seu modelo uma anisotropia de um íon independente da temperatura. Observamos que este tratamento também pode ser estendido a outros fluoretos da forma XF_2 , com $\text{X} = \text{Mn}, \text{Co}$ e Ni .

- O modelo empregado para determinar a anisotropia magneto cristalina do material RbMnF_3 baseado nas interações de campo cristalino e spin-órbita como extensão dos desenvolvimentos feitos por Tachiki [107], para ferritas de Co^{2+} mostrou ser muito satisfatório devido a que consegui dar uma boa explicação dos resultados experimentais. Entre outras coisas, este modelo permitiu determinar o valor do parâmetro de acoplamento da interação spin-órbita. Adicionalmente, resultado muito útil porque permitiu dar conta da redução que sofrem as componentes reais do momento angular dos íon Mn^{2+} , este efeito é atribuído diretamente a que as nuvem eletrônicas dos íons são distorcidas enquanto forma parte do cristal, os resultados permitiram fazer a publicação de um paper que expõe a o bom acordo da comparação entre o experimento e a teoria desenvolvida [108].
- Para obter os resultados das taxas de relaxação como função da temperatura e o vetor de onda até a metade da primeira zona de Brillouin, empregamos a teoria das probabilidades de transição entre estados populacionais de mágnons. Foram feitos cálculos bem sofisticados que permitiram o cálculo para espalhamento de 3-mágnons e 4-mágnons. Esses resultados foram usados para determinar quantidades tais como as densidades de correntes de spins em interfaces FMI/NM, ali foram obtidos resultados que estiveram em bom acordo com as medidas experimentais, estas estimações foram publicadas como um apêndice de outro paper sobre o estudo do efeito de spin Seebeck longitudinal [135]. Também, foram feitas estimações das taxas de relaxação de mágnons em processos de espalhamentos de 4-mágnons em campos magnéticos externos muito intensos esses resultados se empregaram para determinar outras propriedades de transporte em YIG os resultados obtidos foram bastante satisfatórios devido a que seu emprego no cálculo do calor específico e da condutividade térmica em YIG forneceu uma interpretação correta dos dados experimentais que foram obtidos aplicando campos magnéticos altos. Estes resultados também foram publicados [146] apontando as respectivas correções realizadas aos argumentos de S. R. Boona e J. P. Heremans [145] respeito de suas medidas.

REFERÊNCIAS

- [1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3th ed, Jhon Wiley and Sons, Inc. (1998).
- [2] W. K. H. Panofsky, M. Phillips, *Classical Electricity and Magnetism*, 2th ed, Dover Publications, Inc. (2005).
- [3] R. Boča, *Current Methods in Inorganic Chemistry Volume 1: Theoretical Foundations of Molecular Magnetism*, Elsevier (1999).
- [4] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1994).
- [5] K. Gottfried, T. M. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals*, 2th ed, Springer (2003).
- [6] H. A. Bethe, R. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, 3th ed, Westview Press (1987).
- [7] H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Dover Publications, Inc. (2008).
- [8] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, Berlin (2007).
- [9] A. I. Akhiezer, V. G. Bar'Yakhtar, S. V. Peletminskii, *Spin Waves*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1968).
- [10] B. Bleaney and K. W. H. Stevens, *Rep. Prog. Phys.* 16 (1953).

- [11] M. G. Cottam and, D. J. Lockwood, *Light Scattering in Magnetic Solids*, Wiley - Interscience Publications (1986).
- [12] M. Sparks, *Ferromagnetic Relaxation Theory*, McGraw-Hill, New York (1964).
- [13] G. Rado and H. Suhl, *Magnetism I*, Academic Press, New York, (1963).
- [14] T. Holstein and H. Primakoff, *Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet*, Phys. Rev., Vol. 58, Pages: 1098 - 1113 (1940).
- [15] Andreas Kreisel, Francesca Sauli, Lorentz Bartosch and Peter Kopietz, *Microscopic Spin-Wave Theory for Yttrium-Iron Garnet Films*, EPJ, Pages: 1-10 (2009).
- [16] Chunhui Du, Hailong Wang, P. Chris Hammel, and Fengyuan Yang, *$Y_3Fe_5O_{12}$ spin pumping for quantitative understanding of pure spin transport and spin Hall effect in a broad range of materials*, J., Appl., Phys., Vol. 117, Pages: 172603-1 - 172603-5 (2015).
- [17] F., Bertaut and F. Forrat, *Structure des ferrites ferrimagnetiques des terres rares*. Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L' Academie Des Sciences, Vol. 242(3), Pages: 382-384 (1956).
- [18] J. E. Mee, *Chemical vapor deposition of epitaxial garnet films* , IEEE Trans. Magn., Vol 3(3), Pages: 190-194 (1967).
- [19] P. E. Wigen, *Microwave properties of magnetic garnet thin films*, Thin Solid Films, Vol. 114(1-2), Pages: 135-186 (1984).
- [20] V. Cherepanov, I. Kolokolov and V. L'vov, *The saga of YIG: spectra, thermodynamics, interaction and relaxation of magnons in a complex magnet*, Physics Reports, Vol 229(3), Pages: 81-144 (1993).
- [21] B. Lax and K. J. Buttom, *Microwave Ferrites and Ferrimagnetics*, McGraw-Hill, New York, (1962).

- [22] S. M. Rezende and F. R. Morgenthaler, *Magnetoelastic waves in time-varying magnetic fields. II. Experiments*, J. Appl. Phys., Vol. 40(2), Pages: 524 - 536 (1969).
- [23] M. J. Hurben and C. E. Patton, *Theory of magnetostatic waves for in-plane magnetized isotropic films*, J. Mag. Mag. Mat., Vol. 139, Pages: 263 - 291 (1995).
- [24] I. C. Hunter and J. D. Rhodes, *Electronically tunable microwave bandpass filters*, IEEE Trans. Microw. Theory Tech., Vol. 30(9), Pages: 1354 - 1360 (1982).
- [25] R. Suzuki, *Recent Development in Magnetic-Bubble Memory*, Proc. IEEE, Vol.74, Pages: 1582 - 1590 (1986).
- [26] A. K. Zvezdin and V. A. Kotov, *Modern Magnetooptics and Magneto-optical Materials*, Taylor & Francis, New York (1997).
- [27] Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, K. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Transmission of electrical signals by spin-wave interconversion in a magnetic insulator*, Nature (London), Vol. 464, Pages: 262-266 (2010).
- [28] C. W. Sandweg, Y. Kajiwara, K. Ando, E. Saitoh, and B. Hillebrands, *Enhancement of the spin pumping efficiency by spin wave mode selection*, Appl. Phys. Lett., Vol. 97(25), 252504 (2010).
- [29] K. Ando, T. Na, and E. Saitoh, *Enhancement of the spin pumping efficiency by spin wave mode selection*. Appl. Phys. Lett., Vol. 97(25), 252504 (2010).
- [30] L. H. Vilela-Leao, C. Salvador, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Unidirectional anisotropy in the spin pumping voltage in yttrium iron garnet/platinum bilayers*, Appl. Phys. Lett., Vol. 99(10), 102505 (2011).
- [31] A. Hoffmann, *Spin Hall effects in metals*, IEEE Trans. Magn. Vol. 49(10), Pages: 5172-5193 (2013).

- [32] K. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, J. Ohe, S. Takahashi, J. Ieda, T. Ota, Y. Kajiwara, H. Umezawa, H. Kawai, G. E. W. Bauer, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Spin Seebeck insulator*, Nat. Mater., Vol. 9, Pages: 894-897 (2010).
- [33] K. Uchida, H. Adachi, T. Ota, H. Nakayama, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Observation of longitudinal spin-Seebeck effect in magnetic insulators*, Appl. Phys. Lett. Vol. 97(17), Pages: 172505-172507 (2010).
- [34] K. Uchida, T. Nonaka, T. Ota, H. Nakayama, and E. Saitoh, *Longitudinal spin-Seebeck effect in sintered polycrystalline (Mn,Zn) Fe₂O₄*, Appl. Phys. Lett., Vol. 97(26), 262504 (2010).
- [35] E. Padron-Hernández, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Amplification of Spin Waves by Thermal Spin-Transfer Torque*, Phys. Rev. Lett. 107, 197203 (2011).
- [36] I. Zutic and H. Dery, *Spintronics: Taming spin currents*, Nat. Mater., Vol. 10, Pages: 647-648 (2011).
- [37] G. E. W. Bauer, E. Saitoh, and B. J. van Wees, *Spin caloritronics*, Nat. Mater. Vol., 11, Pages: 391-399 (2012).
- [38] L. Lu, Y. Sun, M. Jantz, and M. Wu, *Control of Ferromagnetic Relaxation in Magnetic Thin Films through Thermally Induced Interfacial Spin Transfer*, Phys. Rev. Lett., Vol. 108, 257202 (2012).
- [39] H. Adachi, K. Uchida, E. Saitoh, and S. Maekawa, *Theory of the spin Seebeck effect*, Rep. Prog. Phys. Vol. 76(3), 036501 (2013).
- [40] M. B. Jungfleisch, T. An, K. Ando, Y. Kajiwara, K. Uchida, B. I. Vasyuchka, A. V. Chumak, A. A. Serga, E. Saitoh, and B. Hillebrands, *Heat-induced damping modification in yttrium iron garnet/platinum hetero-structures*, Appl. Phys. Lett., Vol. 102(6), 062417 (2013).
- [41] R. O. Cunha, E. Padron-Hernández, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Controlling the relaxation of propagating spin waves in yttrium iron garnet/Pt bilayers with thermal gradients*, Phys. Rev. B, Vol. 87, 184401 (2013).

- [42] P. E. Wigen, *Microswave Properties of Magnetic Garnet Thin Films*, Thin Solid Films, Vol. 114, Pages: 135-186 (1984).
- [43] J. S. Plant, '*Pseudo-acoustic*' magnon dispersion in yttrium iron garnet, J. Phys C: Solid State Phys. 16, Pages: 7037 - 7051 (1983).
- [44] Wolfram Research, Inc., *Mathematica*, Version 10.0, Wolfram Research, Champaign, Illinois Inc., (2014).
- [45] R. C. Ohlmann and M. Tinkham, *Antiferromagnetic Resonance in FeF_2 at Far-Infrared Frequencies*, Phys. Rev., Vol. 123(15), Pages: 425 - 434 (1961).
- [46] U. Ganiel and S. Shtrikman, *Crystal-Field Studies of Fe^{2+} by the Mössbauer Effect: FeF_2* , Phys. Rev, Vol. 177(2), Pages: 503 - 508 (1968).
- [47] Sergio M. Rezende, *The Antiferromagnetic Spin Flop Boundary in FeF_2* , J. Phys C: Solid State. Phys., Vol. 11, L701- L705 (1978).
- [48] V. Jaccarino, A. R. King, M. Motokawa, T. Sakakibara and M. Date, *Temperature Dependence of FeF_2 Spin Flop Field*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1117 - 1118 (1983).
- [49] R. Ingalls, *Electric-Field Gradient Tensor in Ferrous Compounds*, Phys. Rev., Vol. 133(3A), Pages: A787 - A795 (1963).
- [50] S. M. Rezende and R. M. White, *Multimagnon theory of antiferromagnetic resonance relaxation*, Phys. Rev. B., Vol. 14(3), Pages: 2939 -2955 (1976).
- [51] B. D. Rainford, J. G. Houmann and H. J. Guggenheim, 5th IAEA, *Symposium on Neutron Inelastic Scattering*, Grenoble France (Vienna: IAEA) (1972).
- [52] F.J. Dyson, Phys. Rev., 102, 1217 (1956).
- [53] H. Suhl, *Subsidiary absorption peaks in ferromagnetic resonance at high signal levels*, Phys. Rev., Vol. 101, Pages: 1437 - 1438 (1956).

- [54] H. Suhl, *Relaxation Processes in Micromagnetics*, Oxford University Press Inc., New York, (2007).
- [55] D. D. Stancil and A. Prabhakar, *Spin Waves: Theory and Applications*, Springer, New York, (2009).
- [56] N. N. Bogoliubov and S. V. Tyablikov, Doklady Akad. Nauk S.S.S.R. 126, 53.[
Tradução: Soviet Phys. -Doklady 4, 604, (1959).]
- [57] D. N. Zubarev, *Double-Time Green Functions in Statistical Physics*, Usp. Fiz. Nauk, Vol 3(3), Pages: 320- 345 (1960).
- [58] V. Yu. Irkhin, *The Bogoliubov-Tyablikov Green's Function Method in the Quantum Theory of Magnetism*, Theoretical and Mathematical Physics, 168(3), Pages: 1246-1257 (2011).
- [59] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, *Many-Body Green's Theory of Heisenberg Films*, Physics Report, 432, Pages: 223 - 304 (2006).
- [60] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics 3thed*, Springer-Verlag, Berlin (2006).
- [61] R. A. Thair-Kheli and D. ter Haar, *Use of Green Function in the Theory of Ferromagnetism. I. General Discussion of the Spin-S Case*, Phys. Rev., Vol 127(1), Pages: 88 - 94 (1962).
- [62] R. A. Thair-Kheli and D. ter Haar, *Use of Green Function in the Theory of Ferromagnetism. II. Dyson Spin Wave*, Phys. Rev., Vol 127(1), Pages: 95 - 100 (1962).
- [63] A. B. Harris, *Spin-Wave Spectra of Yttrium and Gadolinium Iron Garnet*, Phys. Rev., Vol 132(1), 2398 (1963).
- [64] S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, J. C. Lopez Ortiz, and A. Azevedo, *Thermal properties of magnons and the spin Seebeck effect in yttrium iron garnet/normal metal hybrid structures*, Phys. Rev. B Vol. 89(13), Pages: 134406-1 - 134406-6 (2014).

- [65] O. Schröder and H. Reinhardt, *Generalized Random Phase Approximation and Gauge Theories*, Annals of Physics., 307, Pages: 452-506 (2003).
- [66] P. G. Reinhard, M. Brack and O. Genzken, *Random-Phase Approximation in a Local Representation*, Phys. Rev. A, Vol 41(10), Pages: 41-5568 - 41-5582 (1990).
- [67] U. Gäfvert, L. Lundgren, P. Wasterstrandh and O. Beckman, *Magnetocrystalline Anisotropy of MnF_2 Deduced from Static Torque*, Solid State Communucations, Vol. 23, Pages: 9 - 12 (1977).
- [68] D. Bohm and D. Pines, *A Collective Description of Electron Interactions: III. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas*, Phys. Rev., Vol 92(3), Pages: 609-625 (1953).
- [69] M. T. Hutchings, B. D. Rainford and H. J. Guggenheim, *Spin Waves in Antiferromagnetic FeF_2* , J. Phys C: Solid State. Phys, Vol. 3, Pages: 307 - 322 (1970).
- [70] Tôru Moriya, *Theory of Magnetism of NiF_2* , Phys. Rev., Vol. 117(3), Pages: 635 - 647 (1960).
- [71] J. Strempfer, U. Rütt, and W. Jauch, *Absolute Spin Magnetic Moment of FeF_2 from High Energy Photon Diffraction*, Phys. Rev. Lett., Vol 86, Pages: 3152 (2001).
- [72] J. Strempfer, U. Rütt, S. P. Bayrakci, Th. Brückel and W. Jauch, *Magnetic properties of transition metal fluorides MF_2 ($M=Mn, Fe, Co, Ni$) via high-energy photon diffraction*, Phys. Rev. B, Vol 69, Pages: 014417-1 - 014417-8 (2004).
- [73] F.J. Litterst, *Susceptibility of non-crystalline ferromagnetic FeF_2* . Journal de Physique Lettres, Vol 36, Pages: 197-199 (1975).
- [74] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, 2nd Ed, Wiley-VCH, Strauss GmbH, Mörlenbach, (2004).

- [75] A. S. Núñez, R. A. Duine, P. Haney, and A. H. MacDonald, *Theory of spin torques and giant magnetoresistance in antiferromagnetic metals*, Phys. Rev. B 73, 214426 (2006).
- [76] A. B. Shick, S. Khmelevskiy, O. N. Mryasov, J. Wunderlich, and T. Jungwirth, *Spin-orbit coupling induced anisotropy effects in bimetallic antiferromagnets: A route towards antiferromagnetic spintronics*, Phys. Rev. B 81, 212409 (2010).
- [77] A. H. MacDonald and M. Tsoi, *Antiferromagnetic metal spintronics*, Philos. Trans. R. Soc., A 369, Pages: 3098-3114 (2011).
- [78] V. M. T. S. Barthém, C. V. Colin, H. Mayaffre, M. H. Julien, and D. Givord, *Revealing the properties of Mn₂Au for antiferromagnetic spintronics*, Nat. Commun. 4, 2892 Pages: 1-7 (2013).
- [79] P. Merodio, A. Ghosh, C. Lemonias, E. Gautier, U. Ebels, M. Chshiev, H. Bea, V. Baltz, and W. E. Bailey, *Penetration depth and absorption mechanisms of spin currents in Ir₂₀Mn₈₀ and Fe₅₀Mn₅₀ polycrystalline films by ferromagnetic resonance and spin pumping*, Appl. Phys. Lett. Vol 104(3), Pages: 032406-1 - 032406-4 (2014).
- [80] C. Hahn, G. de Loubens, V. V. Naletov, J. B. Youssef, O. Klein, and M. Viret, *Damping of Confined Modes in a Ferromagnetic Thin Insulating Film: Angular Momentum Transfer Across a Nanoscale Field-defined Interface*, arXiv:1310.6000, Pages: 1-5 (2014).
- [81] E. V. Gomonay and V. M. Loktev, *Spintronics of antiferromagnetic systems (Review Article)*, Low Temp. Phys. Vol 40(1), Pages: 17-35 (2014).
- [82] S. S. P. Parkin, K. P. Roche, M. G. Samant, P. M. Rice, R. B. Beyers, R. E. Scheuerlein, E. J. O'sullivan, S. L. Brown, J. Bucchigano, D. W. Abraham, Yu Lu, M. Rooks, Pi L. Trouilloud, R. A. Wanner, W. J. Gallagher, *Exchange-biased magnetic tunnel junctions and application to nonvolatile magnetic random access memory*, J. Appl. Phys. Vol 85(5), Pages: 5828-5833 (1999).

- [83] J. Nogues and I. K. Schuller, *Exchange bias*, J. Magn. Magn. Mater. Vol 192(2), Pages: 203 - 232 (1999).
- [84] J. R. Fermin, M. A. Lucena, A. Azevedo, F. M. de Aguiar, and S. M. Rezende, *Measurements of exchange anisotropy in NiFe/NiO films with different techniques*, J. Appl. Phys. Vol 87(9), Pages: 6421-6423 (2000).
- [85] H. Chen, Q. Niu, and A. H. MacDonald, *Anomalous Hall Effect Arising from Noncollinear Antiferromagnetism*, Phys. Rev. Lett., Vol 112(1), Pages: 017205 (2014).
- [86] J. B. S. Mendes, R. O. Cunha, O. Alves Santos, P. R. T. Ribeiro, F. L. A. Machado, R. L. Rodríguez-Suarez, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Large inverse spin Hall effect in the antiferromagnetic metal Ir₂₀Mn₈₀*, Phys. Rev. B 89, 140406(R) (2014).
- [87] L. J. de Jongh and A. R. Miedema, *Experiments on simple magnetic model systems*, Adv. Phys. Vol. 50 (8), Pages: 947-1170 (2001).
- [88] M. Chirwa, L. Lundgren, P. Nordblad, and O. Beckman, *Magnetic specific heat of FeF₂ near T_N*, J. Magn. Magn. Mater., Vol. 15(18), Pages: 457-458 (1980).
- [89] D. P. Belanger, P. Nordblad, A. R. King, V. Jaccarino, L. Lundgren, and O. Beckman, *Critical behavior in anisotropic antiferromagnets*, J. Magn. Magn. Mater., Vol. 31, Pages: 1095-1096 (1983).
- [90] F. Keffer, *Anisotropy in the Antiferromagnetic MnF₂*, Phys. Rev. 87, 608 (1952).
- [91] J. Barak, V. Jaccarino, and S. M. Rezende, *The magnetic anisotropy of MnF₂ at 0 K*, J. Magn. Magn. Mater., Vol. 9(4), Pages: 323-332 (1978).
- [92] D. T. Teaney, M. J. Freiser, and R. W. H. Stevenson, *Discovery of a Simple Cubic Antiferromagnet: Antiferromagnetic Resonance in RbMnF₃*, Phys. Rev. Lett. 9, 212 (1962).

- [93] P. H. Cole and W. J. Ince, *Equilibrium Spin Configuration and Resonance Behavior of $RbMnF_3$* , Phys. Rev. 150, 377 (1966).
- [94] W. J. Ince, *Coupled Antiferromagnetic-Nuclear-Magnetic Resonance in $RbMnF_3$* , Phys. Rev. 184, 574 (1969).
- [95] A. Kornblit and G. Ahlers, *Heat Capacity of $RbMnF_3$ near the Antiferromagnetic Transition Temperature*, Phys. Rev. B 8, 5163 (1973).
- [96] E. E. Bragg and M. S. Seehra, *Magnetic susceptibility of $RbMnF_3$* Phys. Lett. A, Vol. 39(1), Pages: 29-30 (1972).
- [97] L. J. de Jongh and D. J. Breed, *Antiferromagnetic susceptibility of $RbMnF_3$. Evidence for a temperature dependence of the exchange constant*, Solid State Commun. Vol. 15(6), Pages: 1061-1065 (1974).
- [98] Y. Shapira and N. F. Oliveira, Jr., *Crossover behavior of the magnetic phase boundary of the isotropic antiferromagnet $RbMnF_3$ from ultrasonic measurements*, Phys. Rev. B 17, 4432 (1978).
- [99] U. Köbler and A. Hoser, *Single domain behaviour of bulk $RbMnF_3$* , J. Magn. Magn. Mater., Vol. 325, Pages: 87-93 (2013).
- [100] R. W. Sanders, V. Jaccarino, and S. M. Rezende, *Magnetic polariton, impurity mode enhancement, and superradiance effects in FeF_2* , Solid State Commun., Vol. 28(11), Pages 907-910 (1978).
- [101] F. M. Johnson and A. H. Nethercott, *Antiferromagnetic Resonance in MnF_2* , Phys. Rev. 114, 705 (1959).
- [102] J. P. Kotthaus and V. Jaccarino, *Antiferromagnetic-Resonance Linewidths in MnF_2* , Phys. Rev. Lett. 28, 1649 (1972).
- [103] A. Platzker and F. R. Morgenthaler, *Phonon-Induced Nuclear Spin-Wave Instabilities in $RbMnF_3$* , Phys. Rev. Lett. 26, 442 (1971).

- [104] S. M. Rezende, F. M. de Aguiar, and O. F. de Alcantara Bonfim, *Order and chaos in ferromagnetic spin wave instabilities*, J. Magn. Magn. Mater., Volumes 54-57, Part 3, Pages: 1127-1131 (1986).
- [105] G. Chaddha and M. S. Seehra, *Magnetization process and principal magnetic susceptibilities in $RbMnF_3$* , Solid State Commun., Vol. 44(7), Pages: 1097-1100 (1982).
- [106] S. M. Rezende and R. M. White, *Spin-wave lifetimes in antiferromagnetic $RbMnF_3$* , Phys. Rev. B 18, 2346 (1978).
- [107] M. Tachiki, *Origin of the Magnetic Anisotropy of Cobalt Ferrite*, Prog. Theor. Phys., Vol. 23(6), Pages: 1055-1072 (1960).
- [108] J. C. López Ortiz, G. A. Fonseca Guerra, F. L. A. Machado and S. M. Rezende, *Magnetic anisotropy of antiferromagnetic $RbMnF_3$* , Phys. Rev. B 90, 054402 (2014).
- [109] A. Abragam and M. H. L. Price, *The theory of paramagnetic resonance in hydrated cobalt salts*, Proc. Roy. Soc. Vol 206 A, Pages: 173-191 (1950).
- [110] M. Weissbluth, Atoms and Molecules, Student Edition, *Academic Press, Inc.*, New York (1978).
- [111] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, National Bureau of Standards Applied Mathematical Series, No 55 (1972).
- [112] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, 7th Ed, Academic Press (2007).
- [113] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press (2010).
- [114] E. W. Weisstein, *CRC Concise Encyclopedia of Mathematics*, 2th Ed, CRC Press (2002).

- [115] W. P. Wolf, *Effect of Crystalline Electric Fields on Ferromagnetic Anisotropy*, Phys. Rev. 108, 1152 (1957).
- [116] E. I. Solomon and D. S. McClure, *Comparison of the Jahn-Teller effect in four triply degenerate states of Mn^{++} in $RbMnF_3$* , Phys. Rev. B 9, 4690 (1974).
- [117] F. Rodríguez, H. Riesen, and H. U. Gudel, *Luminescence Properties of Mn^{2+} in $KMgF_3$ and $KZnF_3$ Perovskite Crystals. Evidence of Dynamical Jahn Teller Effect*, J. Lumin., Vol 50, Pages: 101-110 (1991).
- [118] R. C. Fletcher, R. C. LeCraw, and E. G. Spencer, *Electron Spin Relaxation in Ferromagnetic Insulators*, Phys. Rev. 117, 955 (1960).
- [119] P. Pincus, M. Sparks, and R. C. LeCraw, *Ferromagnetic Relaxation. II. The Role of Four-Magnon Processes in Relaxing the Magnetization in Ferromagnetic Insulators*, Phys. Rev. 124, 1015 (1961).
- [120] E. Schlömann, *Ferromagnetic Relaxation Caused by Interaction with Thermally Excited Magnons*, Phys. Rev. 121, 1312 (1961).
- [121] J. J. Green and E. Schlömann, *Ferromagnetic Relaxation at Low Microwave Frequencies*, J. Appl. Phys. Vol. 32(3), Pages: S168-S170 (1961).
- [122] T. Kasuya and R. C. LeCraw (1961) , *Relaxation Mechanisms in Ferromagnetic Resonance*, Phys. Rev. Letters, 6, 223.
- [123] M. Sparks, R. Loudon, and C. Kittel, *Ferromagnetic Relaxation. I. Theory of the Relaxation of the Uniform Precession and the Degenerate Spectrum in Insulators at Low Temperatures*, Phys. Rev. 122, 791 (1961).
- [124] R. C. LeCraw and E. G. Spencer, *Intrinsic relaxation of the uniform precession in ferromagnetic resonance of yttrium iron garnet*, J. Phys. Soc. Japan. Suppl. 17, Pages: 401-405 (1962).
- [125] R. W. Teale and K. Tweedale (1962), *Rare-Earth Ion Relaxation in Ferrimagnetic Resonance*, J. Appl. Phys., Vol. 34(4), Pages: 1269-1270.

- [126] H. Le Gall, J. Appl. Phys. 36, 1203 (1965).
- [127] M. Sparks, *Theory of Three-Magnon Ferromagnetic Relaxation Frequency for Low Temperatures and Small Wave Vectors*, Phys. Rev. 160, 364 (1967).
- [128] C. E. Patton, *Effective Linewidth due to Porosity and Anisotropy in Polycrystalline Yttrium Iron Garnet and Ca-V-Substituted Yttrium Iron Garnet at 10 GHz*, Phys. Rev. 179, 352 (1969).
- [129] S. M. Rezende and F. M. de Aguiar, *Spin wave instabilities auto-oscillations and chaos in yttrium iron garnet*, Proc. IEEE, Vol. 78, Pages: 893-908 (1990).
- [130] A. G. Gurevich and A. N. Anisimov, *Intrinsic spin wave relaxation processes in yttrium iron garnet* Zh. Eksp. Teor. Fiz., Vol. 68, Pages: 677-688 (1975).
- [131] A. N. Anisimov and A. G. Gurevich, *Attenuation of spin-waves due to 4-magnons scattering*, Fiz. Tverd. Tela, Vol. 18(1), Pages: 38-43 (1976).
- [132] J. Xiao, G. E. W. Bauer, K.-C. Uchida, E. Saitoh, and S. Maekawa, *Theory of magnon-driven spin Seebeck effect*, Phys. Rev. B Vol. 81, 214418 (2010).
- [133] Steven S.-L. Zhang and Shufeng Zhang, *Magnon Mediated Electric Current Drag Across a Ferromagnetic Insulator Layer*, Phys. Rev. Lett, Vol. 109, Pages: 096603-1 - 096603-5 (2012).
- [134] Steven S.-L. Zhang and Shufeng Zhang, *Spin convertance at magnetic interfaces*, Phys. Rev. B, Vol. 86, Pages: 214424-1 - 214424-7 (2012).
- [135] S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, R. O. Cunha, A. R. Rodrigues, F. L. A. Machado, G. A. Fonseca Guerra, J. C. Lopez Ortiz, and A. Azevedo, *Magnon spin-current theory for the longitudinal spin-Seebeck effect*, Phys. Rev. B, Vol. 89, Pages: 014416-1 - 014416-10 (2014).
- [136] M. Schreier, A. Kamra, M. Weiler, J. Xiao, G. E. W. Bauer, R. Gross, and S. T. B. Goennenwein, *Magnon, phonon, and electron temperature profiles and the spin*

- Seebeck effect in magnetic insulator/normal metal hybrid structures*, Phys. Rev. B, Vol. 88, 094410 (2013).
- [137] B. Luthi, J. Phys. Chem. Solids 23, 35 (1962).
- [138] R. L. Douglass, *Heat Transport by Spin Waves in Yttrium Iron Garnet*, Phys. Rev., Vol. 129, 1132 (1962).
- [139] D. Walton, J. E. Rives, and Q. Khalid, *Thermal Transport By Coupled Magnons and Phonons in Yttrium Iron Garnet at Low Temperatures*, Phys. Rev. B, Vol. 8, 1210.
- [140] B. Y. Pan, T. Y. Guan, X. C. Hong, S. Y. Zhou, X. Qiu, H. Zhang, and S. Y. Li, Europhys. Lett. 103, 37005 (2013).
- [141] E. E. Anderson, *Molecular Field Model and the Magnetization of YIG*, Phys. Rev., Vol. 134, A1581 (1964).
- [142] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 7th ed. John Wiley & Sons, New York (2007).
- [143] C. Kittel, Quantum Theory of Solids, John Wiley & Sons, New York, (1963).
- [144] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2th ed, Butterworth-Heinemann (1996).
- [145] S. R. Boona and J. P. Heremans, *Magnon thermal mean free path in yttrium iron garnet*, Phys. Rev. B, Vol. 90(6), Pages: 064421-1 - 064421-8 (2014).
- [146] S. M. Rezende and J. C. López Ortiz, *Thermal properties of magnons in yttrium iron garnet at elevated magnetic fields*, Phys. Rev. B, Vol. 91(10), Pages: 104416-1 - 104416-4 (2015).

APÊNDICE A

COMPLEMENTOS ADICIONAIS AO CÁLCULO DAS TAXAS DE RELAXAÇÃO

Vamos dedicar este apêndice especialmente à inclusão de alguns resultados que foram feitos, mas não aparecem no corpo principal do desenvolvimentos dos capítulo da tese, e devem ser incluídos como um complemento adicional das considerações principais para evitarmos criar confusão ou ambiguidade.

A.1 Polinômios de ajuste para as superfícies calculadas das taxas de relaxação de 4-magnons em campos intensos

A seguir apresentamos os resultados obtidos no ajuste das superfícies das taxas de relaxação de 4-mágnons no YIG assumindo que as amostras do material estão submetidas a um campo magnético externo muito intenso.

Campo magnético $H_0 = 0.0$ kOe						
	1	x	x^2	x^3	x^4	x^5
1	0.0005	-0.0207	0.1870	-0.5288	0.5381	-0.1813
τ	-0.0151	0.5411	-4.3850	8.3170	-2.0930	0.0000
τ^2	0.1016	-1.0620	5.5940	19.0200	0.0000	0.0000
τ^3	-0.4702	0.0421	-8.9210	0.0000	0.0000	0.0000
τ^4	1.1270	1.9860	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
τ^5	-0.9898	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela A.1: Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 = 0.0$ kOe.

Campo magnético $H_0 = 70.0$ kOe						
	1	x	x^2	x^3	x^4	x^5
1	0.0001	0.0091	-0.1297	0.4401	-0.5416	0.2215
τ	-0.0043	0.0860	0.1200	-0.9746	0.8056	0.0000
τ^2	-0.0197	-0.3724	0.5947	0.5486	0.0000	0.0000
τ^3	0.1707	0.1835	-0.6898	0.0000	0.0000	0.0000
τ^4	-0.2874	0.2530	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
τ^5	0.1245	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela A.2: Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 = 70.0$ kOe.

Campo magnético $H_0 = 200.0$ kOe						
	1	x	x^2	x^3	x^4	x^5
1	0.0004	-0.0081	-0.0114	0.1568	-0.2585	0.1205
τ	0.0056	0.1170	-0.3311	-0.1114	0.3342	0.0000
τ^2	-0.1182	-0.01576	0.7498	0.0006	0.0000	0.0000
τ^3	0.4310	-0.8141	-0.2049	0.0000	0.0000	0.0000
τ^4	-0.5086	0.8594	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
τ^5	0.1507	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela A.3: Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 = 200.0$ kOe.

Campo magnético $H_0 = 300.0$ kOe						
	1	x	x^2	x^3	x^4	x^5
1	0.0007	-0.0220	0.1477	-0.4000	0.4658	-0.1927
τ	-0.0009	0.0705	-0.0872	-0.0492	0.0462	0.0000
τ^2	-0.0494	-0.2451	-0.0293	0.6760	0.0000	0.0000
τ^3	0.3303	0.4361	-0.2824	0.0000	0.0000	0.0000
τ^4	-0.7213	-0.1511	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
τ^5	0.5062	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela A.4: Coeficientes do polinômio de ajuste da taxa de relaxação de 4-mágnons em YIG quando o valor do campo magnético externo considerado é $H_0 = 300.0$ kOe.

APÊNDICE B

PUBLICAÇÕES RELACIONADAS COM A TESE

A seguir apresentamos uma lista das publicações que foram realizados usando os resultados desenvolvidos nesta tese. Em algumas das publicações, ou autor da tese aparece como coautor o autor principal.

- 1 S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, R. O. Cunha, A. R. Rodrigues, F. L. A. Machado, G. A. Fonseca Guerra, **J. C. Lopez Ortiz**, and A. Azevedo, *Magnon spin-current theory for the longitudinal spin-Seebeck effect*, Phys. Rev. B 89, 014416 - Published 15 January 2014.
- 2 S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, **J. C. Lopez Ortiz**, and A. Azevedo, *Thermal properties of magnons and the spin Seebeck effect in yttrium iron garnet/normal metal hybrid structures*, Phys. Rev. B 89, 134406 - Published 10 April 2014.
- 3 **J. C. Lopez Ortiz**, G. A. Fonseca Guerra, F. L. A. Machado, and S. M. Rezende, *Magnetic anisotropy of antiferromagnetic $RbMnF_3$* , Phys. Rev. B 90, 054402 - Published 4 August 2014.
- 4 S. M. Rezende, **J. C. Lopez Ortiz**, *Thermal properties of magnons in yttrium iron garnet at elevated magnetic fields*, Phys. Rev. B 91, 104416 - Published 19 March 2015.

APÊNDICE C

PROGRAMAS UTILIZADOS PARA REALIZAR AS ESTIMAÇÕES NUMÉRICAS DA TESE NA LINGUAGEM WOLFRAM-MATHEMATICA

C.1 Descrições gerais dos programas

A seguir apresentamos a codificação de todos os programas desenvolvidos nesta tese para realizar as estimativas numéricas das propriedades físicas estudadas nos diferentes capítulos. Cada um destes programas foi compilado num computador Dell Inspiron 5547 com processador Intel(R) core(TM) i7-4510U CPU@ 2.00 GHz - 2.60 GHz. Com 16 GB de memória RAM. O autor recomenda para um bom desempenho da maioria dos programas usar máquinas de cálculo com características semelhantes ou superiores à descrita, devido que há rotinas que exigem um consumo alto de memória e CPU. Também, é recomendado compilar cada um dos programas desenvolvido em cada capítulo separadamente para acrescentar o nível de desempenho das rotinas. Além disso, cada programa contém um mínimo de informação que permite saber como trabalha cada uma das rotinas desenvolvidas, também existem partes adicionais de código que não faz parte do manuscrito principal mas ajuda a entender melhor como são realizados os procedimentos numéricos para estimar as quantidades desejadas.

Código MATHEMATICA das estimações numéricas de todos os capítulos da tese

Cápítulo 1: Ajustes e gráficos do capítulo 1.

```
directorioWindows =  
  "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con  
    _mathematica";  
(*directorioLinux=  
  "/home/javier/Dropbox/datos_tesis/fisica_computacional_con_mathematica";*)  
SetDirectory[directorioWindows];
```

Definición de los parámetros de cálculo.

```
(*-----  
*)  
(* Las siguientes líneas definen los diferentes parámetros del YIG, *)  
(* así como también las diferentes constantes usadas en nuestras *)  
(* computaciones numéricas. *)  
(*-----  
*)  
umTHz = 10^12.0 ; (* Un tera Hertz. *)  
cteD = 5.1700 10^(-9.0); (* Constante D. *)  
cteγ = 2.800 10^6.0 ; (* 2.00*Pi Constante γ. *)  
cteZ = 8.00 ; (* No de vecinos mas próximos. *)  
cteR = 12.3760 10^(-8.0); (* Constante de red. *)  
hbar = 1.054570 10^(-27.0); (* Constante de planck entre 2π. *)  
cteB = 1.38064880 10^(-16.0); (* constante de Boltzmann. *)  
cteMs = 1.7800 10^3.0 ; (* Magnetización de saturación. *)  
tempC = 531.00 ; (* Temperatura critica de Curie del YIG*)  
cteSS = 14.200 ; (* Espin medio por unidad de volumen. *)  
fcCE = 1.0 / (10^4.0);  
sigma = 1.8779388777141528;  
tempCP = 557.453;  
(*-----  
*)
```

Relaciones de dispersión del YIG

Constantes derivadas:

```
ωZB = (cteγ * cteZ * cteD) / (cteR * cteR); (*9.5*umTHz*)  
ωM = 4.00 * Pi * cteMs * cteγ;  
wZB = 8.949838917494797 * 10^12. (* Valor ajustado de ωZB*);
```

Relações de dispersão teóricas.

```

ωRel[hCampo_, x_, θk_, w_] := Sqrt[(ctey*hCampo + 2.*w*Sin[(Pi/2.0)*x]^2)*
    (ctey*hCampo + 2.0*w*Sin[(Pi/2.0)*x]^2. + ωM*Sin[θk]^2)]

Manipulate[
  Plot[{ωRel[hcamp, x, Pi/2., ωZB]/umTHz, ωRel[hcamp, x, Pi/2, ωZB]/umTHz},
    {x, 0., 0.1}, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
    PlotStyle → {{Thickness[0.0085], Red}, {Thickness[0.005], Blue}},
    FrameTicks → {{Automatic, None}, {Automatic, None}},
    AspectRatio → 1.], {hcamp, 200., 1500., 100.}]

```

Gráficos para campo magnético aplicado zero e relações de dispersão sem ajustar.

A função `ticks[xmin, xmax]`, define o tamanho das legendas nos quadros dos gráficos.

```

freqYIGUno = Plot[ωRel[0., x, Pi/2., ωZB]/umTHz,
  {x, 0., 0.01}, AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.01], Black},
  PlotRange → {{-0.00001, 0.01}, {-0.0001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  PlotLegends → {Style["k||H0", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  ImageSize → Large];

(**)
freqYIGDos = Plot[ωRel[0., x, 0., ωZB]/umTHz, {x, 0.0, 0.01},
  AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.01], Red},
  PlotRange → {{-0.001, 0.01}, {-0.00001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  PlotLegends → {Style["k||H0", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  ImageSize → Large]; (* *)

freqYIG = Show[freqYIGUno, freqYIGDos]
(*PlotLabel→Style["H0=0 kOe", Black, FontSize→22, FontFamily→"Helvetica"]*)

Export["freqYIG.png", freqYIG]; (**)

```

```
graficosCampo = Table[Plot[ $\omega$ Rel[y, x, Pi / 2.,  $\omega$ ZB] / umTHz,
  {x, 0.0, 0.02}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}}, PlotStyle →
  {Thickness[0.004], Black}, PlotRange → {{-0.0001, 0.02}, {-0.0001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style[" $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 0., 1500., 100.}];
Export["freqYIGCamp.png", Show[graficosCampo]];
```

Relações dispersão experimentais do YIG ao longo do caminho [001]

Comparação das medidas experimentais com as estimações teóricas sem ajuste

Valores experimentais das relações de dispersão do YIG (reldispexpYIG) à temperatura de 295 K. As medições consideradas são aquelas feitas na primeira zona de Brillouin ao longo do caminho [001]. Dados extraídos de **J. S. Plant, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 16(1983) 7037-7051.**

```
reldispexpYIG = {{3.979328825 * 10^-6., 0.000055093256814},
  {0.159641176775504, 0.772576978258471},
  {0.210363533511778, 1.13110694183865}, {0.25563187339469, 1.5315925394548},
  {0.3068996318163, 2.02743185078909}, {0.367439218888628, 2.60718243019534},
  {0.402890328435486, 3.09920759298091}, {0.469974735731849, 3.90399293676195},
  {0.514697673929424, 4.97958282750248}};

encabezadoDaTabela = {"Vetor de Onda k", " Frequência  $\omega_k$ "};
TableForm[SetPrecision[reldispexpYIG, 5], TableAlignments → Center,
  TableHeadings → {None, encabezadoDaTabela}, TableSpacing → {1, 3}]

datosTeoricos = Table[{x,  $\omega$ Rel[0., x, Pi / 2.,  $\omega$ ZB] / (umTHz)}, {x, 0., 1.0, 0.005}];

figsimajuste = ListPlot[{reldispexpYIG, datosTeoricos},
  PlotStyle → {{PointSize[0.025], Red}, {PointSize[0.01], Black}},
  PlotRange → {{-0.01, 0.55}, {-0.1, 5.50}}, PlotRangeClipping → True,
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style[" $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 28, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large,
  PlotLegends → {Style["Dados experimentais.", Black, FontSize → 24,
  FontFamily → "Helvetica"], Style["Dados teóricos sem\najustar.",
  Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  AspectRatio → 1., Frame → True, ImageSize → Medium];
```

Comparação das medidas experimentais com as estimações teóricas ajustadas.

x := Magnitude relativa do vetor de onda na zona de brillouin $x = k/k_{ZB}$.
q := Valor da orientação do campo magnético em relação ao eixo z.

```

h := Valor do campo magnético medido em Oersted.
wa := Valor da frequência da Zona de Brillouin que deve se ajustar.

q = 0.5 * Pi;
h = 0.;

freqAjuste =
  Sqrt[(ctey * h + wa * Sin[0.5 * Pi * x]^2) * (ctey * h + wa * Sin[0.5 * Pi * x]^2.
    + ωM * Sin[q]^2.)] / (umTHz);

(*freqAjuste=
  Sqrt[(ctey*h+( wa/3)*(1-Cos[Pi*a*x]))*(ctey*h+ ( wa/3)*(1-Cos[Pi*a*x])
    +ωM*Sin[q]^2.)]/(umTHz);*)

modeloFreqAjuste = FindFit[reldispexpYIG, {freqAjuste, {wa > 0}}, {wa}, {x},
  MaxIterations → 1000, Method → {"NMinimize", Method → "NelderMead"}]
ffreqAjusteYIG = Function[{x}, Evaluate[freqAjuste /. modeloFreqAjuste]];
ffreqAjusteYIG[x];

figajuste = Show[Plot[ffreqAjusteYIG[x], {x, 0., 0.55}, PlotRange →
  {{-0.001, 0.55}, {-0.051, 5.51}}, PlotStyle → {Red, Black}, Frame → True,
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], PlotRangeClipping → True,
  FrameLabel → {Style["k/kzB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω (THz)", Black, FontSize → 28, FontFamily → "Helvetica"]},
  PlotLegends → {Style["Dados teóricos ajustados.", Black,
    FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]}],
  ListPlot[reldispexpYIG, PlotRange → {{-0.001, 0.55}, {-0.051, 5.51}},
  Frame → True, PlotStyle → {PointSize[0.02], Red}, PlotRangeClipping → True,
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  PlotLegends → {Style["Dados experimentais.", Black, FontSize → 24,
    FontFamily → "Helvetica"]}], AspectRatio → 1., ImageSize → Large]

Export["figajusteYIG.png", figajuste];
Export["figsimajusteYIG.png", figsimajuste];

```

Relações de dispersão usando as estimações teóricas ajustadas.

```

freqYIGUnoAjuste = Plot[ $\omega_{\text{Rel}}$ [200., x,  $\pi / 2.$ ,  $\omega_{\text{ZB}}$ ] / umTHz,
  {x, 0., 0.01}, AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0051], Black},
  PlotRange → {{-0.00001, 0.01}, {-0.0001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 222],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$  (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large];
(**)
freqYIGDosAjuste = Plot[ $\omega_{\text{Rel}}$ [200., x, 0.,  $\omega_{\text{ZB}}$ ] / umTHz,
  {x, 0.0, 0.01}, AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0051], Black},
  PlotRange → {{-0.001, 0.01}, {-0.00001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$  (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  PlotLegends → {Style["Dados ajustados", Black, FontSize → 24,
    FontFamily → "Helvetica"]}, ImageSize → Large];
(* *) freqYIGUnoAAjuste = Plot[ $\omega_{\text{Rel}}$ [200., x,  $\pi / 2.$ ,  $\omega_{\text{ZB}}$ ] / umTHz,
  {x, 0., 0.01}, AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0051], Red},
  PlotRange → {{-0.00001, 0.01}, {-0.0001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 222],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$  (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large];
(**)
freqYIGDosAAjuste = Plot[ $\omega_{\text{Rel}}$ [200., x, 0.,  $\omega_{\text{ZB}}$ ] / umTHz,
  {x, 0.0, 0.01}, AspectRatio → 0.8, AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0051], Red},
  PlotRange → {{-0.001, 0.01}, {-0.00001, 0.02}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$  (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  PlotLegends → {Style["Dados sem ajustar.", Black,
    FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large]; (* *)

freqYIGAjuste =
  Show[freqYIGUnoAjuste, freqYIGDosAjuste, freqYIGUnoAAjuste, freqYIGDosAAjuste]
  (*PlotLabel→Style["H0=0 kOe", Black, FontSize→22, FontFamily→"Helvetica"]*)

Export["freqYIGAjuste.png", freqYIGAjuste]; (**)

```



```
graficosCampoAjuste = Table[Plot[ $\omega_{\text{Rel}}$ [y, x, Pi / 2., wZB] / umTHz,
  {x, 0.0, 0.01}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.004], Black}, PlotRange → {{-0.0001, 0.01}, Full},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 0., 1500., 100.}];
Export["freqYIGCampAjuste.png", Show[graficosCampoAjuste]];
```

Estudo das propriedades antiferromagnética do FeF₂ : Ajuste relações de dispersão

Parametros estruturais do FeF2

```
pC = 3.309; (* Medida em Amstrong.*)
pA = 4.697; (* Medida em Amstrong.*)
pH = (pC / pA);
hpl = 6.62606957 × 10-27.; (* Constante de Planck em ergios. *)
hb = hpl / (2.0 * Pi); (* Constante de Planck dividida pelo 2 $\pi$ . *)
fErgCm = 5.0341 × 1015.; (* Equivalença de 1.0 erg em cm-1. *)
hbcm = hb * fErgCm; (* Constante  $\hbar$  em cm-1. *)
uTHzeV = 4.136; (* Converçã de THz para meV *)
umKilo = 1000.0;
umMega = 106.;
umGiga = 109.;
umTera = 1012.;
cgamFeF2 = (1.97 × 107.) / (2 * Pi); (* Valor do prefixo numerico Kilo. *)

datExpRelDispFeF2meV =
  {{0.00584232509571869, 6.58084496510469}, {0.0408806126000696,
    6.63625373878365}, {0.137897667942917, 6.83326271186441},
    {0.231343543334493, 7.19034147557328}, {0.293541594152454, 7.5135593220339},
    {0.367941176470588, 8.17538634097707}, {0.534001044204664, 8.98189182452642},
    {0.688156978767838, 9.75145812562313}, {0.824754611903933, 10.0715977068794},
    {0.935461190393317, 10.1793369890329}};

datExpRelDispFeF2THz =
  Table[{datExpRelDispFeF2meV[[k, 1]], (datExpRelDispFeF2meV[[k, 2]] / 4.136)},
    {k, Length@datExpRelDispFeF2meV}];

datEnerFreq = Table[{datExpRelDispFeF2meV[[k, 1]],
  datExpRelDispFeF2meV[[k, 2]], datExpRelDispFeF2THz[[k, 2]]}, {k, 10}];
encabezado = {Style["k/kmax", FontSize → 18, Black, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["Energia Ek(meV)", FontSize → 18, Black, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["Frequência  $\omega_k$ (THz)", FontSize → 18, Black, FontFamily → "Helvetica"]};
TableForm[SetAccuracy[datEnerFreq, 10], TableAlignments → Center,
  TableHeadings → {None, encabezado}, TableSpacing → {1, 3}]
```

```
Show[ListLinePlot[datExpRelDispFeF2THz, Frame → True,
  PlotRange → {{0., 1.}, Full}, PlotRangeClipping → True, PlotStyle → Red,
  ImageSize → Large, AspectRatio → 1, FrameLabel → {Style["k/kmax", FontSize → 22,
    FontFamily → "Helvetica", Black],
    Style["ωk(THz)", FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica", Black]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 20]],
ListPlot[datExpRelDispFeF2THz, Frame → True, PlotRange → {{0., 1.}, Full},
  PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large, PlotStyle → Black,
  AspectRatio → 1, FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 20]]]
```

Modelo de Ajuste dos dados experimentais do FeF₂

```
w0 := Frequência Num campo de magnitude H0
wc := Frequencia critica
we := frequência de Exchange

fgamak[t_, a_, b_, c_] := Cos[Pi * t * a / 2] * Cos[Pi * t * b / 2] * Cos[Pi * t * c / 2];
fwk[w0_, wc_, we_, t_, a_, b_, c_] :=
  w0 + Sqrt[wc^2 + we^2 (1 - Abs[fgamak[t, a, b, c]]^2)];

fwk[0, wc, we, t, a, b, c] // TraditionalForm

modeloAjusteFeF2 = fwk[0, h, e, t, a, b, c];

fittingFreqFeF2 = FindFit[datExpRelDispFeF2THz,
  {modeloAjusteFeF2, {h > 0.0, e > 0.0, a > 0.0, b > 0.0, c > 0.0}}, {h, e, a, b, c},
  {t}, MaxIterations → 1000, Method → {"NMinimize", Method → "NelderMead"}];
funFittingFeF2 = Function[{t}, Evaluate[modeloAjusteFeF2 /. fittingFreqFeF2]];

{(1.5904083104463314 * 1 × 10^12.) / cgamFeF2,
 (1.8768947652482424 * 1 × 10^12.) / cgamFeF2} (* Campos Hcrit e HE *)

yy = {a, b, c} /. fittingFreqFeF2

(* Calculo de los campos de Exchange e anisotropia. *)
soleq = {x, y} /.
  NSolve[{eq1 = Sqrt[(2 * x + y) * y] - h == 0., x - e == 0.} /. fittingFreqFeF2, {x, y}];
camposExAni = {(soleq[[2, 1]] * 1 × 10^12.) / cgamFeF2,
  (soleq[[2, 2]] * 1 × 10^12.) / cgamFeF2};

{soleq[[2, 1]], soleq[[2, 2]]}

graphFitFeF2 =
  Show[Plot[funFittingFeF2[τ], {τ, 0.0, 1.0}, PlotRange → {Full, {0., 3.0}},
    AspectRatio → 1., PlotRangeClipping → True, Frame → True,
    PlotStyle → Red, PlotLegends → {"Modelo de Ajuste"}],
  ListPlot[datExpRelDispFeF2THz, PlotRange → {Full, Full}, AspectRatio → 1.,
    Frame → True, PlotStyle → {Black}, PlotLegends → {"Dados"}],
  FrameLabel → {Style["k/k0", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω(THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large]

freq[t_] := funFittingFeF2[t];
frequenciasTeorFeF2 = Table[{t, freq[t]}, {t, 0., 1., 0.01}];

Export["frequenciasTeorFeF2.dat", frequenciasTeorFeF2, "Data"];
Export["datExpRelDispFeF2THz.dat", datExpRelDispFeF2THz, "Data"];
```

```

coefW0 = 1.97 / (200 * Pi);

ca = 1.065365576166345;
cb = 0.3154957570529768;
cc = 0.000017087620913101114;
ce = 1.8768947652482424;
ch = 1.5904083104463314;

fwk[ $\omega_0$ , ch, ce, t, ca, cb, cc] // TraditionalForm

fwPos1[h_, t_] := coefW0 * h + Sqrt[ch^2 + ce^2 (1 - Abs[fgamak[t, ca, cb, cc]]^2)];
fwNeg1[h_, t_] := coefW0 * h - Sqrt[ch^2 + ce^2 (1 - Abs[fgamak[t, ca, cb, cc]]^2)];

fwNeg[h_, t_] := If[coefW0 * h ≥ ch, Return[], Abs@fwNeg1[h, t]];
fwPos[h_, t_] := If[coefW0 * h ≥ ch, Return[], Abs@fwPos1[h, t]]

Manipulate[Plot[{Abs[fwNeg[h, t]], fwPos[h, t]}, {h, 0, 650},
  Frame → True, PlotStyle → {Red, Black}, PlotRange → All, {t, 0, 1, 0.025}]

freqRes = Table[{h, Abs[fwNeg[h, 0]], fwPos[h, 0]}, {h, 0, 650, 10}];
Export["freqResFeF2.dat", freqRes, "Data"];

Plot[Table[{fwPos[h, t]}, {h, 0, 600, 100}], {t, 0, 1}, Frame → True,
  PlotStyle → {Red, Black}, PlotRange → {{0, 1}, {0, 4.5}}, AspectRatio → 1]

freqwkFeF2 = Table[{t, fwPos[100, t], fwPos[200, t], fwPos[300, t],
  fwPos[400, t], fwPos[500, t], fwPos[600, t]}, {t, 0.0, 1.0, 0.02}];
Export["freqwkFeF2.dat", freqwkFeF2, "Data"];

```

Capítulo 2: Renormalización de las frecuencias de los magnons.

```

(*-----
*)
(* Nesta pasta serão salvos os arquivos de dados e gráficos. Para
  modificar o lugar onde sejam salvos *)
(* então modifique o endereço:
  "/home/javier/Dropbox/datos_tesis/fisica_computacional_con_mathematica" *)
(*-----
*)
(*SetDirectory[
  "/home/javier/Dropbox/datos_tesis/fisica_computacional_con_mathematica"];*)
SetDirectory[
  "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con
    _mathematica"];

```

```

(*-----
*)
(* As seguintes linhas definem os diferentes parâmetros do YIG
   assim como as diferentes constantes *)
(* usadas em nossas computações numéricas. *)
(*-----
*)
gama = 2.8 * 10^6;
cpms = 1.750 * 10^3;
dex = 5.170 * 10^(-9);
znuv = 8.0;
cred = 12.376 * 10^(-8);
kb = 1.3806488 * 10^(-16);
hb = 6.62606896 * 10^(-27);
sp = 20.00;
ho = 1.0 * 10^3;
tempMax = 300.0;

(*-----
                                     -*)
(* As seguintes linhas definem os diferentes parâmetros derivados
   paro YIG. *)
(*-----
                                     -*)

ctem = (1.50) / (sp);
wZB = (gama * znuv * dex) / (cred * cred);
ca = (2.0 * hb * wZB) / kb;
cb = (sp * ca) / 3.0;
cteλ = (gama * ho) / (2.0 * wZB);

(*-----
*)
funAux[x_] := (1.0 - x / 3000.0);
d[x_, y_, z_] := Sqrt[x^2. - 2.0 * z * x * y + y^2.];
fxy[x_, y_, z_] := (Cos[(Pi / 4.0) * x]^2 +
  Cos[(Pi / 4.0) * y]^2. - Cos[(Pi / 4.0) * d[z, x, y]]^2. - 1.0);

```

Gráficas de contornos e superficies para as contribuições de quarta ordem na energia dos mágnons.

```

rta = Input[Text[Style["Deseja crias as graficas de contorno: S/N"]]];
If[(ToString[rta] == "S" || ToString[rta] == "s"),
  contorno3D = ContourPlot3D[fxy[x, y, z], {x, -1., 1.}, {y, -1., 1.},
    {z, -1., 1.}, Mesh -> False, ColorFunction -> "Rainbow", Contours -> 5];
If[True, Show[contorno3D]];
Manipulate[ContourPlot[fxy[x, y, z], {x, -1., 1.}, {y, -1., 1.},
  ColorFunction -> "Rainbow", Contours -> 15, AspectRatio -> 1.]
, {z, -1., 1., 2. / 100}]
Manipulate[ParametricPlot3D[{fxy[x, y, z] Cos[x] Sin[z],
  fxy[x, y, z] Sin[x] Sin[z], fxy[x, y, z] Cos[z]}, {x, 0., 1.}, {z, -1., 1.},
ColorFunction -> "Rainbow", AspectRatio -> 1.], {y, 0., 1., 2. / 100}]
]

(* Frequências não renormalizadas. *)
ω[x_] := 7.56 * 2.0 * (cteλ + Sin[0.25 * Pi * x]^2)

functionP[x_] := (2.0 * cteλ * Sin[0.25 * Pi * x]^2);
functionK[x_] := (cteλ + Sin[0.25 * Pi * x]^2); (* cteλ *)
functionL[x_] :=
  NIntegrate[(y^2 * fxy[x, y, z]), {y, 0.0, 1.0}, {z, -1.0, 1.0}, Method ->
    {"UnitCubeRescaling", "FunctionalRangesOnly" -> True}, WorkingPrecision -> 10];
(* AccuracyGoal->8, PrecisionGoal->16, MaxRecursion->60*)
ocupationNumber[x_, temp_] := 1.0 /
  (Exp[(ca * functionK[x]) / temp + (cb / temp) * (functionP[x] / functionL[x])] -
    1.0);
functionM[x_, temp_] := NIntegrate[(y^2 * fxy[x, y, z] * ocupationNumber[y, temp]),
  {y, 0.0, 1.0},
{z, -1.0, 1.0}, Method -> {"UnitCubeRescaling", "FunctionalRangesOnly" -> True},
  WorkingPrecision -> 10];
(* AccuracyGoal->8, PrecisionGoal->16, MaxRecursion->60*)
ωNormalized[x_, temp_] :=
  7.56 * 2.0 * (funAux[temp] * functionK[x] + ctem * functionM[x, temp]);

(*-----*)
*)
(* A seguinte função calcula os gráficos de frequências não
renormalizadas e renormalizadas *)
(* como uma função da temperatura que é medida em
graus Kelvin. Os gráficos são feitos na *)
(* escala temperatura que vai de 0.0 K até 300
K. Os parâmetros de entrada da função *)
(* definidos functionGraphics[ ] são da seguinte maneira. *)
(**)
(* nGraph: Número de gráficos que
podense determinad na escala de 0.0 K até 300.0 K em *)
(* passos de temperatura (300.0 K/nGraph). *)
(**)
(* extFile: Corresponde a extensão do

```

```

    arquivo gráfico de saída. *)
(**)
(*-----*)
*)
Module[{nn = nGraph}, (* função para exportar os gráficos. *)
(**)
    nn = Input[Text[Style["Digite seu numero de gráficos"
        , FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
If[ (* Inicio do Conditional No:1. *)
    nn ≤ 0,
    MessageDialog[Text[Style["Erro: Número de entrada têm que ser maior a 1."
        , FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
    Abort[(* Fim do Conditional No:1. *)
];
(**)
    extFile =
    InputString[Text[Style["Digite a extensão do arquivo gráfico de saída."
        , FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
nomeArquiv =
    InputString[Text[Style["Digite o nome do arquivo gráfico de saída."
        , FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
(**)
    nomeFile = {};
    headGraph = {};
    tempPass = Range[0.0, 300.0, (300.0 / nn)];
longTempPass = Length[tempPass];
(**)
    Do[AppendTo[nomeFile, StringJoin[ToString[nomeArquiv],
        ToString[k], ToString[extFile]]]; AppendTo[headGraph, Row[
        {Style["Temperatura=", Red, FontSize → 18, FontFamily → "Helvetica"], Style[
            ToString[tempPass[[k]], Red, FontSize → 18, FontFamily → "Helvetica"],
            Style["0 K", Red, FontSize → 18, FontFamily → "Helvetica"]}]];
        , {k, 1, longTempPass}];
(**)
(**)
If[(* Inicio do Conditional No:2. *)
    nn == 1,
graphs[1] = Plot[{ $\omega[x]$ ,  $\omega_{\text{Normalized}}[x, 0.00001]$ },
    {x, 0., 1.}, FrameTicksStyle → Directive[Black, 18],
    PlotStyle → {{Thickness[0.0045], Red}, {Thickness[0.0045], Black}},
    Frame → True, FrameTicks → {{Automatic, None}, {Automatic, None}},
    FrameLabel → {Style["2k/kZB", FontSize → 18, Black],
    Style["Frequência  $\omega$  (THz)", FontSize → 18, Black]},
    PlotRange → {{0.0, 1.0}, {0.0, 7.85}},
    PlotLabel → Style["Temperatura = 0.0 K", Red, FontSize → 18,
        FontFamily → "Helvetica"], PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large];
    Export[nomeFile[[1]], graphs[1]];
(**)
graphs[1] = Plot[{ $\omega[x]$ ,  $\omega_{\text{Normalized}}[x, 0.00001]$ },
    {x, 0., 1.}, FrameTicksStyle → Directive[Black, 18],
    PlotStyle → {{Thickness[0.0045], Red}, {Thickness[0.0045], Black}},
    Frame → True, FrameTicks → {{Automatic, None}, {Automatic, None}},
    FrameLabel → {Style["2k/kZB", FontSize → 18, Black],

```

```

Style[ " $\omega$ (THz)", FontSize → 18, Black]],
PlotRange → {{0.0, 1.0}, {0.0, 7.850}},
PlotLabel → Style["Temperatura = 0.0 K", Red, FontSize → 18,
  FontFamily → "Helvetica"], PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large];
Export[ nomeFile[[1]], graphs[1] ];
(**)
Do[ graphs[k] = Plot[ { $\omega$ [x],  $\omega$ Normalized[x, tempPass[[k]]]},
  {x, 0., 1.}, FrameTicksStyle → Directive[Black, 18],
  PlotStyle → {{Thickness[0.0045], Red}, {Thickness[0.0045], Black}}, Frame →
    True, FrameTicks → {{Automatic, None}, {Automatic, None}}, FrameLabel →
    {Style["2k/kzB", Black, FontSize → 18, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[ " $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 18, FontFamily → "Helvetica"]},
  PlotRange → {{0.0, 1.0}, {0.0, 7.850}},
  PlotLabel → headGraph[[k]], PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large];
Export[nomeFile[[k]], graphs[k]], {k, 2, longTempPass}
]
(* Fim do Conditional No:2. *)];
]

```

Capítulo 3 : Cálculo da Constante de Anisotropia de Primeira Ordem e Renormalização da Energia para um antiferromagneto simples: FeF₂.

```

directorioWindows =
  "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con_
    _mathematica";
(*directorioLinux=
  "/home/javier/Dropbox/datos_tesis/fisica_computacional_con_mathematica";*)
SetDirectory[directorioWindows];

```

Definição dos parâmetros básicos do FeF₂ e Parâmetros adicionais

Parametros associados ao material FeF₂ e constantes adicionais.

O seguinte conjunto de valores são obtidos das difrentes referencias citadas no corpo do documento principal, onde ficam explicitamente todas as contas do cálculo da constante de anisotropia de primeira ordem junto com a renormalização da energia. Também usamos os valores de algumas constantes universais para obter a solução do problema, igualmente são usadas algumas potencias de 10 da notação científica.

```

hpl = 6.62606957 × 10-27.; (* Constante de Planck em erg*seg. *)
hb = 1.054570 10^(-27.0);
(* Constante de planck dividida por 2π em erg*seg.*)
kB = 1.38064880 10^(-16.0); (* constante de Boltzmann em erg/K. *)
umKilo = 10^3.;
umMega = 10^6.;
umGiga = 10^9.;
umTera = 10^12.;

```

Parâmetros para definir os argumentos das funções trigonométricas hiperbólicas das eqs 3.59.

```

tempMin = 4.20; (* Valor medido em K. *)
tempN = 78.393; (* Temperatura de Neél. *)
campMax = 6.5 × 10^5.;
(* Valor máximo do campo magnético aplicado e medido em kOe. *)
campMin = 0.0;
(* Valor máximo do campo magnético aplicado e medido em kOe. *)
cgamFeF2 = (1.97 × 10^7.); (* Fator giromagnético do FeF2. *)

```

Constantes de Exchange em Ergios , constante $u = E + D$ e números de vizinhos tipo 1, 2 e 3 Respectivamente

```

exJ1 = 7.23069 × 10^-16.;
exJ2 = -9.53947 10^-18.;
exJ3 = 3.85372 × 10^-17.;
cteU = 1.41157 × 10^-15.;
cZ1 = 8.0;
cZ2 = 2.0;
cZ3 = 4.0;

```

Fatores de Conversão

```

umCMaMenosUM = 1.98645 × 10^-16.; (* conversão de cm-1 a ergios erg*)
umErgaCM = 5.0341 × 10^15. (* conversão de ergios erg para cm-1. *) ;

```

Constantes derivadas

```

exJ = (exJ2 * cZ2 + exJ3 * cZ3 - exJ1 * cZ1) ;
(* Constante efetiva de exchange. *)
vc1 = -0.5 (* (exJ / (kB * tempN)) *) ;
vc2 = (cgamFeF2 * campMax * hb) / (kB * tempN) ;
vc3 = 0.1 (* (cteU / (kB * tempN)) *) ;

```

Cálculo do valor medio da componente z do spin na aproximação de campo meio.

h := Variável de campo magnético.
s := Variável de spin.
t := Variável de temperatura.
phi := Variável angular campo magnético-spin.

As seguintes funções são usadas para definir a equação trascendental que permite encontrar o

valor médio da componente z do spin no material antiferromagnético FeF₂. Esta quantidade dependerá de: magnitude do campo magnético, orientação do campo magnético aplicado e da temperatura no sistema.

Adicional ao anterior muitas estimações serão feitas usando um modelo do tipo:

$$f(t) = 1 - \sum_{n=1}^{N_{\max}} \alpha_n t^{\beta_n} \quad (1)$$

```
fS1[h_, s_, t_, phi_] := (vc1 * s) / (t * Cos[phi]) + (vc2 * h) / t;
(* Função que define a βλ em Cosh[βλ] e Sinh[βλ] *)
fS2[h_, s_, t_, phi_] := 1.0 + 2.0 * Exp[-(vc3 / t)] * Cosh[fS1[h, s, t, phi]] +
  2.0 * Exp[-4.0 * (vc3 / t)] * Cosh[2.0 * fS1[h, s, t, phi]];
fS3[h_, s_, t_, phi_] := Exp[-(vc3 / t)] *
  (Sinh[fS1[h, s, t, phi]] + 2. * Exp[-(3. * vc3) / t] * Sinh[2. * fS1[h, s, t, phi]]);
fS4[s_, phi_] := 0.5 * (s / Cos[phi]);

eqTrasSpin[h_, s_, t_, phi_] := fS4[s, phi] * fS2[h, s, t, phi] + fS3[h, s, t, phi];

Off[FindRoot::reged]; Off[FindRoot::lstol]; Off[FindRoot::brmp];
Off[NIntegrate::slwcon]; Off[NIntegrate::ncvb];
```

Cálculo do valor medio da componente z do spin na aproximação de campo meio.

Com as funções definidas anteriormente, vamos agora a determinar quais são os zeros da equação transcendental que define o valor medio da componente z do spin, para as duas subredes antiferromagnéticas, do material FeF₂. Especificamente, calcularemos como muda a configuração do spin médio ao longo do eixo z. Tomaremos diferentes valores de campo magnético aplicado, estaremos mudando a temperatura e fixaremos o valor do campo e sua orientação. Aproveitando a atribuição dos valores para os parâmetros anteriores, fazemos um gráfico da função que define a equação transcendental em termos do valor médio da componente Z do spin, mudando em forma simultânea a temperatura, a magnitude do campo magnético e sua orientação.

```
Manipulate[Plot[eqTrasSpin[h, x, t, φ + Pi], {x, -2.5, 2.5},
  PlotStyle → {Thickness[0.0025], Black}, PlotRange → {Full, {-5., 5.}},
  Frame → True, FrameLabel → {{f[x, β, H, φ], None}, {x, None}}, ImageSize → Large],
{t, (tempMin / tempN), 1, Abs[(tempMin / tempN) - 1.] / 100.},
{h, 0., 1., 0.02}, {φ, 0, Pi / 2, Pi / 100}]
```

Algoritmo para buscar as raices da equação transcendental

A seguir definimos tres vetores: Um vetor “intTemp”, para conter um array de temperaturas entre “tempMin” (Temperatura Mínima) e uma temperatura máxima “tempMax”. Um vetor que contem um array de campos magnéticos “inthCamp”, entre un valor minimo e um valor máximo, e um vetor de spin “intSpin”, criado para buscar os zeros da equação transcendental que define o valor médio da componente z do spin entre -2.0 y 2.0. Cada um com seu respectivo comprimento (número de elementos): longVecTemp, longVecCamp e longVecSpin respectivamente.

```

spinMedioZ[camp_?NumericQ, phi_?NumericQ, tempMin_?NumericQ,
tempMax_?NumericQ] := Block[{h = camp, fi = phi, tMin = tempMin,
tMax = tempMax, numPasTemp = 50, numPassSpin = 21, spinMedMax = 2.2,
tt, xLenSp, tempIni, tempFim, intTemp, vecSpinMed, xStart,
intSpin, longVecTemp, longVecSpin, xProd, xProdRet, xProdAva},
vecSpinMed = {};
vecSpin = {};
tempIni = (tMin / tempN);
tempFim = (tMax / tempN);
intTemp = Range[tempIni, tempFim, Abs[(tempFim - tempIni) / numPasTemp]];
(**)
intSpin = Range[-spinMedMax, spinMedMax, Abs[(2 * spinMedMax) / numPassSpin]];
longVecTemp = Length[intTemp];
longVecSpin = Length[intSpin];
Do[(* Variação da temperatura. *)
Do[(* Busqueda de raices para Sz. *)
xStart = intSpin[[i]] + (intSpin[[i + 1]] - intSpin[[i]]) * 0.0625;
xProdRet = eqTrasSpin[h, intSpin[[i]], intTemp[[j]], fi];
xProdAva = eqTrasSpin[h, intSpin[[i + 1]], intTemp[[j]], fi];
xProd = xProdRet * xProdAva;
If[xProd < 0.0,
tt = x /. FindRoot[eqTrasSpin[h, x, intTemp[[j]], fi] == 0.,
{x, xStart, intSpin[[i]], intSpin[[i + 1]]},
PrecisionGoal → 25, MaxIterations → 100];
AppendTo[vecSpinMed, tt]
], {i, 1, longVecSpin - 1} (* Fim da Busqueda de raices para Sz. *)];
(* Aqui estão as raices encontradas. *)
xLenSp = Length[vecSpinMed];
If[xLenSp == 1,
AppendTo[vecSpin, Flatten[{intTemp[[j]],
Flatten[{vecSpinMed, vecSpinMed[[1]], vecSpinMed[[1]]}]}]],
If[xLenSp == 2,
AppendTo[vecSpin,
Flatten[{intTemp[[j]], Flatten[{vecSpinMed, vecSpinMed[[2]]}]}]],
AppendTo[vecSpin, Flatten[{intTemp[[j]], vecSpinMed}]]];
];
vecSpinMed = {};
], {j, 1, longVecTemp} (* Fim da variação da temperatura.*)]
]

```

A seguir apresentamos num gráfico os resultados das estimações numéricas de calcular os zeros da equação que define o valor médio da componente z do spin.

```

spinMedioZ[0, 0, 4.2, tempN];
xx = Table[
{vecSpin[[k, 1]], (vecSpin[[k, 2]] / vecSpin[[1, 2]]), {k, Length@vecSpin}];
yy = Table[{vecSpin[[k, 1]], (vecSpin[[k, 3]] / vecSpin[[1, 2]]),
{k, Length@vecSpin}];
zz = Table[{vecSpin[[k, 1]], (vecSpin[[k, 4]] / vecSpin[[1, 2]]),
{k, Length@vecSpin}];
ListPlot[{xx, yy, zz}, PlotRange → {{0, 1.3}, {-0.1, 1.1}},
PlotStyle → {{Red, PointSize[0.01]}, {Blue, PointSize[0.01]},
{Black, PointSize[0.01]}}, Frame → True, ImageSize → Large]

```

```
Export["spinMedioZFeF2A.dat", xx, "Data"];
```

Anisotropia de primeira ordem

Calculando o valor da anisotropia de primeira ordem usando o promedio da componente z do spin.

A seção anterior foi exclusivamente para determinar o valor promedio do spin na aproximação de campo meio, agora usaremos esos valores computados para determinar como é a contribuição à constante de anisotropia por ion. Além do mais, definimos um array de graficas que mostram como é a mudança da anisotropia em função da temperatura quando o campo magnético mantém fixa sua magnitude e sua orientação no espaço respecto do eixo z. Obviamente, cada configuração de campo determina o valor medio da componente z do spin.

```
fA1[h_, s_, t_, phi_] := Exp[-vc3 / t] * Sinh[fS1[h, s, t, phi]] *
  (1.0 + 4.0 * Exp[(-3.0 * vc3) / t] * Cosh[fS1[h, s, t, phi]]);
fAKpa[h_, s_, t_, phi_] := (fA1[h, s, t, phi] / fS2[h, s, t, phi]);
mSpontanea[h_, s_, t_, phi_, beta_] := (fAKpa[h, s, t, phi] / fAKpa[h, 2, 0.02, 0]) ^ (beta)
```

O seguinte conjunto de dados, corresponde aos resultados experimentais de J. Strempfer, et al. Phys. Rev. B 69, 014417 (2004).

```
magnetizacionFeF2 = {{0.281072477112034`, 0.989637980429363`,
  {0.407494831749561`, 0.967168954868475`, {0.669628638766801`,
    0.836667038732001`, {0.736917956557743`, 0.795587305130781`,
    {0.802847894191292`, 0.7191018342821`, {0.827769863743493`,
    0.697994567846114`, {0.879199746364853`, 0.624005655393087`,
    {0.908199856389232`, 0.585876399895822`, {0.918621770929243`,
    0.560683856085129`, {0.930629628986212`, 0.527774677233322`,
    {0.941051543526224`, 0.505305651672434`, {0.947621880953622`,
    0.478978308590988`, {0.9517000214258`, 0.465814637050266`,
    {0.958270358853199`, 0.440622093239573`, {0.963481316123204`,
    0.423600104178294`, {0.973903230663215`, 0.37457677568181`,
    {0.979340751292787`, 0.346887673475462`, {0.985911088720185`,
    0.309893217248949`, {0.987270468877578`, 0.291509469062767`,
    {0.993840806304976`, 0.245209658816088`, {0.996333003260196`,
    0.199136808423559`, {0.997692383417589`, 0.118566060200171`}}};
```

Ajuste Polinomial da magnetização espontânea do FeF₂

```
base = {1, t^e[1], t^e[2]};
coefmodel = {1, a[1], a[2]};
modelo = coefmodel.base;
modelFitFeF2 = FindFit[magnetizacionFeF2, {modelo}, {a[1], a[2], e[1], e[2]},
  {t}, MaxIterations -> 1000, Method -> {"NMinimize", Method -> "NelderMead"}]
modelofunFeF2 = Function[{t}, Evaluate[modelo /. modelFitFeF2]];
modelofunFeF2[t]
```

```

ajustePolinomial =
Show[Plot[modelo /. modelFitFeF2, {t, 0.0, 1.009899}, PlotRange →
  {{0.0, 1.1}, {0.0, 1.1}}, Frame → True, PlotStyle → {Thickness[0.005], Black},
  PlotLegends → {"Modelo de ajuste: Equação (1)."}],
ListPlot[magnetizacionFeF2, PlotRange → {{-0.01, 1.01}, {-0.01, 1.5}},
  Frame → True, PlotStyle → {PointSize[0.0175], Red},
  PlotLegends → {"J. Strempfer, et al. Phys. Rev. B 69, 014417 (2004)."}],
FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
FrameLabel → {Style["T/TN", Black, FontSize → 22,
  FontFamily → "Helvetica"], Style["M(T)/M(0)", Black, FontSize → 22,
  FontFamily → "Helvetica"]}, AspectRatio → 1., ImageSize → Large]

(*Export["ajustePolinomial.png",ajustePolinomial];*)

datosFuncionMAT = Table[{t, modelofunFeF2[t]}, {t, 0., 1., 0.01}];
Export["datosFuncionMAT.dat", datosFuncionMAT, "Data"];

modelFunFitFeF2[t_] :=
  1 - 0.5936871830941278 t3.4370215364974115 - 0.2774906113781544 * t49.39077749549568;

fSpinMedl[h_, s_, t_, phi_] := (fS3[h, s, t, phi] / fS2[h, s, t, phi]) * Cos[phi];

```

Modelo de Ajuste para a magnetização espontânea do FeF₂

Estaremos agora ajustando os dados de magnetização espontânea no intervalo 3.5 K até 4.5 K, para fazer a estimação inicial das quantidades que vai-nos permitir definir os parâmetros $J(T_0)$, $u(T_0)$, e por conseguinte $f(T_0, p)$. Usaremos a função numerica que estima a magnetização espontânea

```

fffreqAFMROTFEF2A[t_] :=
  1 + 2.965010697838101` t1.762896843274748` - 3.439997483429204` t1.8405763966325617`; (*1*)

```

Tabela de dados criada usando a função (1).

```

dadosIniciaisFeF2 = Table[{t, fffreqAFMROTFEF2A[t]},
  {t, (4.15 / 78.394), (4.3 / 78.394), (0.15 / (10 * 78.394))}];

fS11[s_, t_, b_] := (2 * b) * (s / t);
(* Função que define a βλ em Cosh[βλ] e Sinh[βλ] *)
fS22[s_, t_, a_, b_] := 1 + 2 * Exp[- (a / t)] * Cosh[fS11[s, t, b]] +
  2 * Exp[- 4 * (a / t)] * Cosh[2 * fS11[s, t, b]];
fS33[s_, t_, a_, b_] := Exp[- (a / t)] *
  (Sinh[fS11[s, t, b]] + 2 * Exp[- (3 * a) / t] * Sinh[2 * fS11[s, t, b]]);

eqTrasSpinss[s_, t_, a_, b_] := (fS33[s, t, a, b] / fS22[s, t, a, b]);

fitfuncFeF2[a_?NumericQ, b_?NumericQ, t_?NumericQ] :=
  s /. FindRoot[eqTrasSpinss[s, t, a, b] == -s, {s, 0.15, -0.1, 1.1}];
(**)
(* Com esta função criamos um ajuste onde o valor médio
  do spin é considerado como uma *) (*função que depende
  implicitamente dos parâmetros: constante de Exchange efetivo,
  a constante*) (*de anisotropia e obviamente da temperatura.*)
(**)
(* 0.5321 para iniciar el mejor ajuste*)

```

```

(* {a,b}/.
  FindFit[dadosIniciaisFeF2,{fitfuncFeF2[a,b,t],{-1<a<-1/2,0<b<(2/5)}},{a,b},
    {t},MaxIterations→100,Method→{"NMinimize", Method→"NelderMead"}]*)

Module[{vectSpinIni, xyz, longVSI, a, b, s, t, k},
  vectorBA0 = {};
  vectSpinIni = Range[0.1, 0.9, 0.05];
  longVSI = Length@vectSpinIni;
  Do[
    fitfuncFeF2[a_?NumericQ, b_?NumericQ, t_?NumericQ] := s /.
      FindRoot[eqTrasSpinss[s, t, a, b] == -s, {s, vectSpinIni[[k]], -0.1, 1.1}];
    xyz = {a, b} /. FindFit[dadosIniciaisFeF2,
      {fitfuncFeF2[a, b, t], {-1 < a < -1/2, 0 < b < (2/5)}}, {a, b}, {t},
      MaxIterations → 100, Method → {"NMinimize", Method → "NelderMead"}];
    AppendTo[vectorBA0, xyz], {k, longVSI}]
  (* TableForm@SetAccuracy[vectorBA0,10] Verifica
    o valor de J estimado para varias valores iniciais de s*)
]

MatrixForm@{vectorBA0[[17]], {(exJ / (kB * tempN)), (cteU / (kB * tempN))}}
(* Valores estimados e usando as referencias
  de M. T. Hutchings et. al. ver Ref [42]. *)

```

Dados da ressonância antiferromagnética (AFMR) de Ohlmann e Tinkham

Dados de Ohlmann and Tinkham sem racionalizar, é dizer sem dividir pelo valor máximo de frequência medida

```

fAFMROhlmannTinkham = {{1.27476131174761`, 52.4161790017212`,
{1.88634417808219`, 52.7170395869191`}, {2.94034869240349`,
53.0309810671256`}, {4.98329571398921`, 53.0309810671256`},
{13.8447410751349`, 52.5731497418244`}, {15.1329688148609`,
52.5731497418244`}, {15.9657625051889`, 52.5731497418244`},
{16.4992709630552`, 52.952495697074`}, {18.8415032171025`,
52.4946643717728`}, {20.1297309568286`, 52.1938037865749`},
{21.3398842880863`, 52.2722891566265`}, {23.2396948941469`,
52.1153184165232`}, {24.6059970423412`, 51.8798623063683`},
{25.816150373599`, 51.7359724612737`}, {27.4817377542549`, 51.657487091222`},
{28.1583826276463`, 51.5790017211704`},
{30.2794040577003`, 50.9772805507745`}, {33.4674424034869`,
49.6037865748709`}, {35.4323150166044`, 48.8450946643718`},
{36.5643939393939`, 48.8450946643718`}, {39.8955687007057`,
48.1518072289157`}, {42.9274582295558`, 47.4716006884682`},
{43.838326328352`, 47.8509466437177`}, {44.5930456102117`,
47.3146299483649`}, {45.0484796596098`, 46.9352839931153`},
{45.0484796596098`, 44.5022375215146`}, {46.9482902656704`,
46.3335628227195`}, {47.6249351390618`, 46.712908777969`},
{49.1343737027812`, 45.8757314974182`}, {49.9671673931092`,
43.3641996557659`}, {50.5006758509755`, 44.8815834767642`},
{51.945052407638`, 45.718760757315`}, {54.5215078870901`, 42.2915662650602`},
{55.1981527604815`, 42.2915662650602`},
{55.1981527604815`, 40.9965576592083`}, {54.9769419364882`,
38.184165232358`}, {58.5293275217933`, 39.7800344234079`},
{61.1057830012453`, 38.5635111876076`}, {61.9385766915733`,
39.7800344234079`}, {63.4480152552926`, 37.4254733218589`},
{65.8032599107513`, 37.5039586919105`}, {78.394, 0.}}};

(*freqAFMROT=Table[{(fAFMROhlmannTinkham[[k,1]]/tempN),
(fAFMROhlmannTinkham[[k,2]]/53.0309810671256)},
{k,Length@fAFMROhlmannTinkham}];*)

(* Os seguintes pontos são pontos auxiliares
de correção do modelo: {{0.8686,0.5819},{0.9021,0.44},
{0.9294,0.325},{0.9805,0.143},{1.0000127562409908,0.}}*)

```

Dados de Ohlmann and Tinkham racionalizados.

```

freqAFMROT = {{0.016261162498534435`, 0.9884067378533654`,
  {0.024062660927406655`, 0.9940800363506548`, {0.03750779651759072`, 1.`},
  {0.06356812105658936`, 1.`}, {0.1766068536110992`, 0.9913667196780371`},
  {0.19303979711021263`, 0.9913667196780371`},
  {0.20366311411974156`, 0.9913667196780371`},
  {0.21046867657897003`, 0.9985200090876641`}, {0.24034675566826755`,
  0.9898867287657013`}, {0.25677969916738225`, 0.9842134302684119`},
  {0.2722167066968517`, 0.9856934211807479`}, {0.2964511486248377`,
  0.9827334393560743`}, {0.3138800280935951`, 0.9782934666190649`},
  {0.32931703562306586`, 0.9755801499464491`}, {0.3505636696421224`,
  0.9741001590341115`}, {0.3591951147123633`, 0.9726201681217755`},
  {0.38625137522100567`, 0.9612735711271951`},
  {0.426918760648105`, 0.9353737301613066`}, {0.4519831492174607`,
  0.9210671513420544`}, {0.4664242207772875`, 0.9210671513420544`},
  {0.5089174888154007`, 0.9079938982830822`}, {0.5475930023032133`,
  0.8951673103761659`}, {0.5592122552823848`, 0.902320599785791`},
  {0.5688396363222699`, 0.8922073285514924`}, {0.5746492628118556`,
  0.8850540391418653`}, {0.5746492628118556`, 0.8391743208594334`},
  {0.5988837047398415`, 0.8737074421472868`}, {0.6075151498100825`,
  0.8808607315569118`}, {0.6267699118898523`, 0.865074161825322`},
  {0.6373932288993813`, 0.8177144526305543`}, {0.6441987913586098`,
  0.8463276102690604`}, {0.6626236067970099`, 0.8621141800006504`},
  {0.6954894937952381`, 0.797487910161955`}, {0.704120938865479`,
  0.797487910161955`}, {0.704120938865479`, 0.7730680601084042`},
  {0.7012991202848239`, 0.7200350524163454`}, {0.7466142069035921`,
  0.7501282009671874`}, {0.7794800939018189`, 0.7271883418259724`},
  {0.790103410911348`, 0.7501282009671874`}, {0.8093581729911166`,
  0.7057284735970932`}, {0.8394022414086881`, 0.707208464509429`}}};

ListPlot[freqAFMROT, Frame → True,
  PlotRange → {{0., 1.0}, {0., 1.1}}, ImageSize → Large, AspectRatio → 1]

modeloAFMR = 1 - aa[1] * t^ee[1] - aa[2] * t^ee[2];
freqAFMROTFeF2 =
  FindFit[freqAFMROT, {modeloAFMR, {aa[1] > 0, aa[2] > 0, ee[1] > 0, ee[2] > 0}},
    {aa[1], aa[2], ee[1], ee[2]}, {t}, MaxIterations → 1000,
    Method → {"NMinimize", Method → "NelderMead"}]
ffreqAFMROTFeF2 = Function[{t}, Evaluate[modeloAFMR /. freqAFMROTFeF2]]

fffreqAFMROTFeF2B[t_] :=
  1 - 0.4213062639608737` t^2.308285247794406` - 0.584087500053123` t^10.835803469026464`;

ajustePolinomial =
  Show[Plot[modeloAFMR /. freqAFMROTFeF2, {t, 0.0, 1.0}, PlotRange →
    {{0.0, 1.0}, {0.0, 1.1}}, Frame → True, PlotStyle → {Thickness[0.005], Black},
    PlotLegends → {"Modelo de ajuste: Equação (1)."}],
  ListPlot[freqAFMROT, PlotRange → {{0.0, 1.0}, {0.0, 1.0}},
    Frame → True, PlotStyle → {PointSize[0.0175], Red},
    PlotLegends → {"R. C. Ohlmann and M. Thinkham,
      et al. Phys. Rev. B 69, 014417 (2004)."}],
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], FrameLabel →
    {Style["T/TN", Black, FontSize → 22,
      FontFamily → "Helvetica"], Style["ωAFMR(T)/ωAFMR(0)", Black, FontSize → 22,
      FontFamily → "Helvetica"]}, AspectRatio → 1., ImageSize → Large]

```

```
Show[ListPlot[Table[{t, fffreqAFMROTF2B[t]}, {t, 0, 1, 0.02}],
  PlotStyle -> {Red, PointSize[0.015]}], Plot[fffreqAFMROTF2A[t], {t, 0, 1},
  PlotStyle -> Black, PlotStyle -> {{0, 1}, {0, 1}}, PlotRangeClipping -> True],
  Frame -> True, ImageSize -> Large, AspectRatio -> 1]

Export["freqResAFMROhlmTink.dat",
  Table[{t, fffreqAFMROTF2B[t]}, {t, 0, 1, 0.01}], "Data"];
Export["freqTransAFMROT.dat", freqAFMROT, "Data"];
```

Calculando : A constante efectiva de Exchange e o parâmetro de Anisotropia efetivo

```
pAa = 0.17910871331835648;
pAb = -0.5048566204787923;
hEX = 1.8768947652482424;
hAN = 0.5832134750031918;
tempN = 78.394;

(* Magnetização Espontânea definida por: mesp[t] *)
(* Frequência de Ressonância definida por: wres[t] *) wres[t_] :=
  1 - 0.4213062639608737 * t2.308285247794406 - 0.584087500053123 * t10.835803469026464 (**);
mesp[t_] := 1 - 0.5936875049694936 * t3.4370243159492744 -
  0.27749045540159345 * t49.3909156081535;

funSistemEq1[a_, b_, x_, y_] :=
  y + ((Exp[-(a/x)] * Sinh[2 b (y/x)] + 2 Exp[-(4 a/x)] * Sinh[4 b (y/x)]) /
    (1 + 2 Exp[-(a/x)] * Cosh[2 b (y/x)] + 2 Exp[-(4 a/x)] * Cosh[4 b (y/x)]));

fSEqAux2[a_, b_, x_, y_] :=
  ((Exp[-(a/x)] * Sinh[2 b (y/x)] (1 + 4 Exp[-(3 a/x)] * Cosh[2 b (y/x)])) /
    (1 + 2 Exp[-(a/x)] * Cosh[2 b (y/x)] +
      2 Exp[-(4 a/x)] * Cosh[4 b (y/x)])) (*Abs[ ]*);

fbp0 = fSEqAux2[pAa, pAb, (4.2 / tempN), mesp[(4.2 / tempN)]];
lEA = (hEX / hAN);
deq = (1 + 2 * lEA) * (fbp0 * pAb) ^ 2.;

funSistemEq2[a_, b_, x_, y_] := wres[x] ^ 2 -
  Abs[(b^2 * fSEqAux2[a, b, x, y] (fSEqAux2[a, b, x, y] + 2 * lEA * fbp0) / deq)];

(*Manipulate[Plot[{funSistemEq1[a,b,x,mesp[x]], funSistemEq2[a,b,x,mesp[x]]},
  {a,0.0,0.5}, Frame->True], {x, (4.2/tempN), 1, 0.01},
  {b,-0.80,0.0,0.1}]* (* Mostra onde estão os zeros *)
```



```

Module[{rx, ra, rb, rab, tempMin = 4.20, tempMax = tempN, nptos = 100},
  rootsJD = {};
  fevalRoot = {};
  rD = {};
  rJ = {};
  rx = Range[(tempMin / tempN),
    (tempMax / tempN), Abs[(tempMax - tempMin) / (nptos * tempN)]];
  (**)
  Off[FindRoot::jsing];
  Do[
    rab = {ra, rb} /. FindRoot[{funSistemEq1[ra, rb, rx[[k]], mesp[rx[[k]]]],
      funSistemEq2[ra, rb, rx[[k]], mesp[rx[[k]]]]},
      {{ra, 0.25}, {rb, -0.5}}, PrecisionGoal -> 30];
    AppendTo[rootsJD, rab];
    AppendTo[rD, {rx[[k]], rab[[1]]}];
    (* Salvar os valores de D(T) *)
    AppendTo[rJ, {rx[[k]], rab[[2]]}];
    (* Salvar os valores de Jeff(T) *)
    AppendTo[fevalRoot, {rab[[1]], rab[[2]],
      funSistemEq1[rab[[1]], rab[[2]], rx[[k]], mesp[rx[[k]]]],
      funSistemEq2[rab[[1]], rab[[2]], rx[[k]], mesp[rx[[k]]]]}];
    (* Verificar se as raízes são verdadeiros zeros. *), {k, Length@rx}];
  On[FindRoot::jsing];
];

constanteAnisotropiaUniaialFeF2 =
  Table[{rD[[k, 1]], (rD[[k, 2]] / Min@rD[[All, 2]])}, {k, Length@rD}];

constanteEfetividadeExchangeFeF2 =
  Table[{rJ[[k, 1]], Abs[(rJ[[k, 2]] / Min@rJ[[All, 2]])]}, {k, Length@rJ}];
Export["constanteEfetividadeExchangeFeF2.dat",
  constanteEfetividadeExchangeFeF2, "Data"];

aniMCFeF2 = Import["anisotropiamagnetocristalinaFeF2.dat"];
rxx = Range[(4.2 / tempN), (tempN / tempN), ((tempN - 4.2) / (100 * tempN))];
kappa = Table[{rxx[[k]],
  ((rJ[[k, 2]]) * (fSeqAux2[rD[[k, 2]], rJ[[k, 2]], rxx[[k]], mesp[rxx[[k]]]) /
  (rJ[[1, 2]] * fbp0))}], {k, Length@rxx}];
aniMCFeF2Mod = Table[{aniMCFeF2[[k, 1]], aniMCFeF2[[k, 2]]^2},
  {k, Length@aniMCFeF2}];

Show[ListLinePlot[kappa, PlotStyle -> {Black, Thickness[0.005]},
  Frame -> True, AspectRatio -> 1, ImageSize -> Medium],
  ListPlot[aniMCFeF2Mod, PlotStyle -> {Red, PointSize[0.025]},
  Frame -> True, AspectRatio -> 1, ImageSize -> Medium]]

Export["kappaMedidoFeF2.dat", aniMCFeF2Mod];
Export["kappaCalculadoFeF2.dat", kappa];

Estimação da anisotropia magneto cristalina em T = 4.2 K.

kappaZero = (4 / 3) * (rJ[[1, 2]] / lEA) * (kB * tempN) * umErgaCM
  (* Anisotropia em T = 4.2 K*);
kappaZeroPorIon = 0.5 * (4 / 3) * (rJ[[1, 2]] / lEA) * (kB * tempN) * umErgaCM;

```

```

modelkappa(*modaniMCFeF2*) = 1 - y1 * t^x1 - y2 * t^x2 - y3 * t^x3;
fitkappa(*fitmodaniMCFeF2*) = FindFit[kappa(*aniMCFeF2*),
  {modelkappa(*modaniMCFeF2*), {x1 < 20, x2 < 10, x3 < 20, y1 > 0, y2 > 0, y3 > 0}},
  {x1, x2, x3, y1, y2, y3}, {t}, MaxIterations -> 1000,
  Method -> {"NMinimize", Method -> "NelderMead"}]
funkappa(*fmodaniMCFeF2*) = Function[{t},
  Evaluate[modelkappa / fitkappa(*modaniMCFeF2/.fitmodaniMCFeF2*)]];

ajustePolinomial =
Show[Plot[modelkappa /. fitkappa(*modaniMCFeF2/.fitmodaniMCFeF2*),
  {t, 0.0, 1.009899}, PlotRange -> {{0.0, 1.1}, {0.0, 1.1}},
  Frame -> True, PlotStyle -> {Thickness[0.005], Black},
  PlotLegends -> {"Modelo de ajuste: Equação (1)."}],
ListPlot[kappa(*aniMCFeF2*), PlotRange -> {{-0.01, 1.01}, {-0.01, 1.5}},
  Frame -> True, PlotStyle -> {PointSize[0.0175], Red},
  PlotLegends -> {"F. J. Litterst, et al. Phys. Rev. B 69, 014417 (2004)."}],
FrameTicksStyle -> Directive[Black, FontSize -> 22],
FrameLabel -> {Style["T/TN", Black, FontSize -> 22,
  FontFamily -> "Helvetica"], Style["κ(T)/κ(0)", Black, FontSize -> 22,
  FontFamily -> "Helvetica"]}, AspectRatio -> 1., ImageSize -> Large]

```

Renormalização da energia de mágnons em FeF₂

Definições básicas para os parâmetros e constates adicionais da renormalização

Parâmetros da estrutura cristalina.

```

pc = 3.309; (* Medida em Armstrong.*)
pa = 4.697; (* Medida em Armstrong.*)
ph = (pc / pa);

```

Parâmetros para definir a magnitude relativa das componentes do vetor de onda na primeira zona de Brillouin.

```

lz = 0.000017087620913101114 (* Valor associado a λ0 *);
lx = 1.065365576166345 (* Valor associado a λ1 *);
ly = 0.3154957570529768 (* Valor associado a λ2 *);
b0 = 0.5045950204112891 (* Valor absoluto de b em T0: b0=b(T0) *);

```

Valores dos campos magnéticos de Exchange, Anisotropia em T=4.2 K e Campo externo aplicado máximo.

```

chE0 = 598 623.2290421338 (* 554700. Campo de Exchange em T=4.2 K. *);
chA0 = 186 012.09832940117 (* Campo de Anisotropia em T=4.2 K. *);
chM0 = 500 000.0 (* Valor máximo do campo externo
  aplicado. Valor critico de existencia 392.0 kOe *);
crho1 = (chE0 / chM0) (* Valor do quaoceinte ρ1=HE0/H0(max). *);
crho2 = (chA0 / chM0) (* Valor do quaoceinte ρ1=HA0/H0(max). *);

```

Constantes derivadas: O valor do parâmetro que multiplica a todas as quantides integrais vai ser representado por "cL" e corresponde em nossa equações a:

```

cL = 0.5 * Pi * ((1z * Sqrt[1 + (1x^2 + 1y^2) / 1z^2])^3 / ph^2) (* Parâmetro CL);
1EA = (chE0 / chA0);
cd = (hb * chM0 * cgamFeF2) / (kB * tempN) (* Parâmetro  $\delta$ );
p1 = (b0 / (cd)) (* Valor do quaoceinte ( $b_0/\delta$ ). *);
p2 = (b0 / (cd * 1EA)) (* Valor do quaoceinte ( $b_0/\delta\lambda_{EA}$ ). *);

```

Definições das funções básicas para construir a equação transcendente que fornece os valores de campo magnético crítico para valores dados do campo magnético externo H_0 e temperatura T para o modo $k = 0$.

```

fGT[x_] := Cos[(1x * Pi * x) / 2.] * Cos[(1y * Pi * x) / 2.] (* Função  $\gamma_t$  *);
fBs[t_] := (1. - 0.6962792690676797 * t^10.717806209011531 -
0.1533526379862955 * t^1.563721349815222)
(* Função que defien uma aproximação para  $b(T)/b(T_0)$ . *);
fKpa[t_] := 1. - 0.46527723009725613 * t^8.720847858349048 - 0.23600929352920377 *
t^2.42231843455571 - 0.3311467039763509 * t^2.4223158148169524
(* Função que defien uma aproximação para  $\kappa(T)/\kappa(T_0)$ . *);

```

Funções para construir os coeficientes das transformações de Bogoliubov.

```

hEA[t_] := crho1 * fBs[t] + crho2 * fKpa[t];
fU0[hc_, t_] := Sqrt[0.5 * (1 + hEA[t] / hc)]
(* Coeficiente  $u_k$  de Bogoliubov em  $k=0$ . *);
fV0[hc_, t_] := Sqrt[Abs[0.5 * (hEA[t] / hc - 1)]] (**)
(* Coeficiente  $v_k$  de Bogoliubov em  $k=0$ . *);
fFk[hc_, t_, x_] := Sqrt[hc^2. + ((crho1 * fBs[t])^2.) * (1. - fGT[x]^2.)];
fUk[hc_, t_, x_] := Sqrt[0.5 * (1. + (hEA[t] / fFk[hc, t, x]))]
(* Coeficiente  $u_k$  de Bogoliubov em  $k \neq 0$ . *);
fVk[hc_, t_, x_] := Sqrt[Abs[0.5 * ((hEA[t] / fFk[hc, t, x]) - 1.)]]
(**) (* Coeficiente  $v_k$  de Bogoliubov em  $k \neq 0$ . *);
(*Manipulate[
Plot[fFk[hc, t, x], {x, 0.0, 1.}, Frame→True, PlotRange→{{0., 1.}, {0., 1.54}}],
{t, 0.0, 1., 0.0001}, {hc, 0.005, 1.4, 0.0001}]*)

```

Funções para definir os fatores de Bose-Einstin.

```

(*fFMk[ha_, hc_, t_, x_] := If[fFk[hc, t, x] ≥ ha, (fFk[hc, t, x] - ha)] *);
fNAk[ha_, hc_, t_, x_] := 1. / (Exp[cd * (fFk[hc, t, x] + ha) / t] - 1.);
fNBk[ha_, hc_, t_, x_] := 1. / (Exp[cd * Abs[(fFk[hc, t, x] - ha)] / t] - 1.);
(*Manipulate[(cd * (fFMk[ha, hc, t, x]) / t), {x, 0.0, 1., 0.01},
{t, 0.05, 1., 0.01}, {hc, 0.01, 1.4, 0.01}, {ha, 0.0, 1.4, 0.01}]*)
Manipulate[Plot[{fNBk[ha, hc, t, x], fNAk[ha, hc, t, x]}, {x, 0., 1.},
AxesOrigin → {0., 0.}, PlotRange → {{0.0, 1.}, Full}, PlotStyle → {Red, Blue}],
{hc, 0.0050, 1.4, 0.0001}, {ha, 0.0, 1.4, 0.001}, {t, 0.01, 1., 0.01}]

```

Definição das Funções Integrais da equação transcendental

```

fLD[hc_, t_] := With[{hcc = hc, tt = t},
  cL * NIntegrate[(x * x) * (fV[k][hcc, tt, x] * fV[k][hcc, tt, x]), {x, 0., 1.}]
  (*Integral de  $\Lambda_2$ *)];
fLUD[hc_, t_] := With[{hcc = hc, tt = t},
  cL * NIntegrate[(x * x) * (fGT[x] * fU[k][hc, t, x] - fV[k][hc, t, x]) * fV[k][hc, t, x],
  {x, 0., 1.}]] (*Integral de  $\Lambda_{12}$ *)];

fYUnoAB[ha_, hc_, t_] := With[{haa = ha, hcc = hc, tt = t}, cL * NIntegrate[
  (x * x) * (fU[k][hcc, tt, x]^2. + fV[k][hcc, tt, x]^2.) * (fNA[k][haa, hcc, tt, x] +
  fNB[k][haa, hcc, tt, x]), {x, 0., 1.}]]];
fYDosAB[ha_, hc_, t_] := With[{haa = ha, hcc = hc, tt = t}, cL * NIntegrate[
  (x * x) * (fGT[x] * fU[k][hc, t, x] * fV[k][hc, t, x]) * (fNA[k][ha, hc, t, x] +
  fNB[k][ha, hc, t, x]), {x, 0., 1.}]]];

fYQAB[ha_, hc_, t_] := With[{haa = ha, hcc = hc, tt = t},
  cL * NIntegrate[(x * x) * ( (fNA[k][ha, hc, t, x] * fU[k][hc, t, x]^2.) +
  (fNB[k][ha, hc, t, x] * fV[k][hc, t, x]^2.) ), {x, 0., 1.}]] (* $Y_5^{(\alpha)} + Y_4^{(\beta)}$ *)];
fYQCAB[ha_, hc_, t_] := With[{haa = ha, hcc = hc, tt = t},
  cL * NIntegrate[(x * x) * ( (fNA[k][ha, hc, t, x] * fV[k][hc, t, x]^2.) +
  (fNB[k][ha, hc, t, x] * fU[k][hc, t, x]^2.) ), {x, 0., 1.}]] (* $Y_4^{(\alpha)} + Y_5^{(\beta)}$ *)];

fEnerRenor[ha_, hc_, t_] := With[{haa = ha, hcc = hc, tt = t},
  (hc + p1 * (fBs[t] * fU0[hc, t] * fV0[hc, t]) * fYUnoAB[ha, hc, t] +
  p1 * fBs[t] * fYDosAB[ha, hc, t] * (fU0[hc, t] - fV0[hc, t])^2. +
  p1 * fBs[t] * fLUD[hc, t] * (fU0[hc, t] - fV0[hc, t])^2. (**) - ha -
  2. * (p1 * fU0[hc, t]^2. + 2. * p2 * fKpa[t] * fV0[hc, t]^2) * fYQAB[ha, hc, t] -
  2. * (p1 * fBs[t] * fV0[hc, t]^2. +
  2. * p2 * fKpa[t] * fU0[hc, t]^2) * fYQCAB[ha, hc, t] -
  4. * p2 * fLD[hc, t] * (fU0[hc, t] + fV0[hc, t])^2. (**))];

(*Manipulate[Plot[fEnerRenor[ha, hc, t], {hc, 0.01, 1.7}],
  {t, (4.2/tempN), 1.0, 0.1}, {ha, 0.0, 3.0, 0.0001}]]*)

(*FindRoot[fEnerRenor[1., ha, 4.2/tempN] == 0., {ha, 0.6, 0.4, 1.4}]]*)

Block[{nptos = 20, chM00 = 500.},
  Off[NIntegrate::inumr];
  hao = Range[0., chM00, (chM00 / nptos)];
  tap = Range[(4.2 / tempN), 1., Abs[tempN - 4.2] / (20 * tempN)];
  dadosHCSFfef2 = {};
  Do[
    hcroot = ha /. FindRoot[fEnerRenor[(hao[[k]] / 500.)
      (hao[[nptos - k + 2]] / chM00), ha, tap[[k]]] == 0., {ha, 0.95, 0.7, 1.4}];
    AppendTo[dadosHCSFfef2, {tap[[k]] * tempN, hcroot * 500.}], {k, nptos + 1}];
  On[NIntegrate::inumr];
]

TableForm[Table[{tempN * tap[[k]], fEnerRenor[(hao[[20 - k + 2]] / 500.),
  (dadosHCSFfef2[[k, 2]] / 500), tap[[k]]}], {k, 21}]]

dadosSF = Import["limitedeestabilidadAF.dat"];

```

```
ListPlot[{dadosSF, dadosHCSFfef2}, Frame → True,
  PlotRange → {{0, 60}, {0, 600}}, AspectRatio → 1]

Export["dadosSpinFlopTeorFeF2.dat", dadosHCSFfef2, "Data"]
```

Capítulo 4: Campo de Spin-Flop, seguindo o modelo de Tachiki.

Cálculos analíticos para a aplicação do modelo de tachiki para o antiferromagneto RbMnF_3

As funções a continuação, definem o ângulo que faz a magnetização com os eixos de simetrias $[111]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$ e $[1\bar{1}\bar{1}]$ respectivamente, ordenados como segue:

```
f[1][ψ_] := (1/2) (Sin[ψ] + Sqrt[2] Cos[ψ]);
f[3][ψ_] := (1/2) (Sin[ψ] - Sqrt[2] Cos[ψ]);
f[2][ψ_] := -f[1][ψ];
f[4][ψ_] := -f[3][ψ];
```

Definição das diferentes funções que formam parte da função de partição e a função de partição mesma.

```
δ[k_, θ_] := d (1 - f[k][θ] * f[k][θ]) ^ (1/2);
t[k_, θ_] := Cos[δ[k, θ]/2];
s[k_, θ_] := Sin[δ[k, θ]/2];
R[k_, θ_] := {(t[k, θ]/2)
  (5 t[k, θ]^4 - 10 t[k, θ]^2 s[k, θ]^2 + 5 s[k, θ]^4 - 3 t[k, θ]^2 + s[k, θ]^2),
  t[k, θ]^3 (t[k, θ]^2 - 4 s[k, θ]^2), t[k, θ]^5};
χ[k_, θ_] := γ f[k][θ];
γ[M_] := g (1/2 + M);
EnergiaM1[k_, M_, θ_] := 2 γ[M] - (γ[M]/4) χ[k, θ]^2 +
  γ[M] χ[k, θ] + ((a^2 R[k, θ][[M+1]]^2)/(2 γ[M] χ[k, θ]));
EnergiaM2[k_, M_, θ_] := 2 γ[M] - (γ[M]/4) χ[k, θ]^2 - γ[M] χ[k, θ] -
  ((a^2 R[k, θ][[M+1]]^2)/(2 γ[M] χ[k, θ]));
funcionParticion[k_, θ_] :=
  Log[Sum[(Cosh[EnergiaM1[k, M, θ]] + Cosh[EnergiaM2[k, M, θ]]), {M, 0, 2}]];
EneriaLivre[θ_] := Sum[funcionParticion[k, θ], {k, 1, 4}];

(Series[funcionParticion[1, ψ], {ψ, 0, 3}] // Simplify) // TraditionalForm
(Series[funcionParticion[2, ψ], {ψ, 0, 3}] // Simplify) // TraditionalForm
(Series[funcionParticion[3, ψ], {ψ, 0, 3}] // Simplify) // TraditionalForm
(Series[funcionParticion[4, ψ], {ψ, 0, 3}] // Simplify) // TraditionalForm
(Series[EneriaLivre[ψ], {ψ, 0, 3}] // Simplify) // TraditionalForm
```

Bloque de constantes y datos experimentales.

```

kb = 0.6950239541000001 (*cm^-1/K*);
ao = 0.529;
erg = 1.0 * 10^(-7); (* Julios*)
ergcm = 5.0341 * 10^(15);
unJul = 5.03445 * 10^(22); (* Un julio equivalente a cm^-1 *)
cpieps = 8.987551787368176 * 10^(9);
aRed = 2.125;
ce = 1.602176565 * 10^(-19);
atg = 10^(-10);
R32[z_, r_] :=
  ( (2. * Sqrt[2.] / (27. * Sqrt[135.])) (z / ao)^(7/2) ) r^2 Exp[-(z r) / (3.0 * ao)];
valInt = (NIntegrate[r^4 R32[25., r]^2, {r, 0., Infinity}]);
va = (cpieps * (36. * ce^2 * valInt) / (atg * aRed^3)) * unJul;

datos = {{2., 1.}, {10, 0.9814}, {20, .91766}, {30, .76358},
  {40, .53823}, {50, .3197}, {55, .2224}, {60, .15776},
  {62.5, .1349}, {65, .11226}, {70, .07346}, {75, .05221},
  {80, .04521}, {85, .03521}};

```

Angulos de la magnetización con el eje [001.]

```

f[1][ψ_] := (1/2) (Sin[ψ] + Sqrt[2] Cos[ψ]);
f[3][ψ_] := (1/2) (Sin[ψ] - Sqrt[2] Cos[ψ]);
f[2][ψ_] := -f[1][ψ];
f[4][ψ_] := -f[3][ψ];

```

Funciones que hacen parte del Argumento de la Función de Partición.

```

δ[k_, θ_] := d (1 - f[k][θ] * f[k][θ])^(1/2);
t[k_, θ_] := Cos[δ[k, θ] / 2];
s[k_, θ_] := Sin[δ[k, θ] / 2];
R[k_, θ_] := {(t[k, θ] / 2)
  (5 t[k, θ]^4 - 10 t[k, θ]^2 s[k, θ]^2 + 5 s[k, θ]^4 - 3 t[k, θ]^2 + s[k, θ]^2),
  t[k, θ]^3 (t[k, θ]^2 - 4 s[k, θ]^2), t[k, θ]^5};
χ[k_, θ_] := γ f[k][θ];
γ[M_] := g (1/2 + M);
EnergiaM1[k_, M_, θ_] := 2 γ[M] - (γ[M] / 4) χ[k, θ]^2 +
  γ[M] χ[k, θ] + ((a^2 R[k, θ][[M+1]]^2) / (2 γ[M] χ[k, θ]));
EnergiaM2[k_, M_, θ_] := 2 γ[M] - (γ[M] / 4) χ[k, θ]^2 - γ[M] χ[k, θ] -
  ((a^2 R[k, θ][[M+1]]^2) / (2 γ[M] χ[k, θ]));
funcionParticion[k_, θ_] := Log[
  Sum[(Cosh[β EnergiaM1[k, M, θ]] + Cosh[β EnergiaM2[k, M, θ]]), {M, 0, 2}]];
EnergiaLivres[θ_] := Sum[funcionParticion[k, θ], {k, 1, 4}];

```

constante de anisotropía.

```
ff[d_] := (D[EnergiaLivre[θ], {θ, 2}]) /. {θ -> 0, y -> d};
Kp1[d_, a_, T_, α_, λ_] := ff[d] /. {Cos[d / (2 Sqrt[2])] -> 1,
    Sin[d / (2 Sqrt[2])] -> d / (2 Sqrt[2]), β -> kb T, g -> (α λ)};
K1[a_, T_, α_, λ_, h_] := Kp1[d, a, T, α, λ] /. d -> (α λ) / h;
Manipulate[Plot[K1[a, T, α, λ, 6.80], {T, 2., 150.}, Frame -> True],
    {λ, 1., 50., 0.50}, {α, -2.0, 2.5, 0.05}, {a, 10., 100.0, 1.}]
```

Capítulo 5 : Taxas de Relaxação de Magnons

Taxas de relaxação de 4-Magnons.

```
dirWIN = "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con
    _mathematica";
SetDirectory[dirWIN];
```

Dados para ajustar as taxas de relaxação que contem a taxas de relaxação em processos normal e umklapp

```
datos = {{0.005`, 0.052104982`, 0.`, 0.052104982`},
    {0.01`, 0.081787538`, 0.`, 0.081787538`},
    {0.015`, 0.082813797`, 0.`, 0.082813797`}, {0.02`, 0.090993714`,
    0.`, 0.090993714`}, {0.025`, 0.10286322`, 0.`, 0.10286322`},
    {0.03`, 0.11599736`, 0.`, 0.11599736`}, {0.035`, 0.13122545`,
    0.`, 0.13122545`}, {0.04`, 0.15489391`, 0.`, 0.15489391`},
    {0.045`, 0.17772631`, 0.`, 0.17772631`}, {0.05`, 0.20696787`,
    0.`, 0.20696787`}, {0.055`, 0.23903857`, 0.`, 0.23903857`},
    {0.06`, 0.27227487`, 0.`, 0.27227487`}, {0.065`, 0.3116588`, 0.`, 0.3116588`},
    {0.07`, 0.35977181`, 0.`, 0.35977181`},
    {0.075`, 0.40909426`, 0.`, 0.40909426`},
    {0.08`, 0.47051464`, 0.`, 0.47051464`}, {0.085`, 0.55102141`,
    0.`, 0.55102141`}, {0.09`, 0.61188122`, 0.`, 0.61188122`},
    {0.095`, 0.67044059`, 0.`, 0.67044059`}, {0.1`, 0.73674892`, 0.`, 0.73674892`},
    {0.105`, 0.80699668`, 0.`, 0.80699668`}, {0.11`, 0.88630072`,
    0.`, 0.88630072`}, {0.115`, 0.97482992`, 0.`, 0.97482992`},
    {0.12`, 1.0853967`, 0.`, 1.0853967`}, {0.125`, 1.1719036`, 0.`, 1.1719036`},
    {0.13`, 1.2653741`, 0.`, 1.2653741`}, {0.135`, 1.3677821`, 0.`, 1.3677821`},
    {0.14`, 1.4740505`, 0.`, 1.4740505`}, {0.145`, 1.6098984`, 0.`, 1.6098984`},
    {0.15`, 1.723116`, 0.`, 1.723116`}, {0.155`, 1.8400455`, 0.`, 1.8400455`},
    {0.16`, 1.9692068`, 0.`, 1.9692068`}, {0.165`, 2.1224953`, 0.`, 2.1224953`},
    {0.17`, 2.2561615`, 0.`, 2.2561615`}, {0.175`, 2.3820551`, 0.`, 2.3820551`},
    {0.18`, 2.532376`, 0.`, 2.532376`}, {0.185`, 2.7137421`, 0.`, 2.7137421`},
    {0.19`, 2.8496362`, 0.`, 2.8496362`}, {0.195`, 3.0150689`, 0.`, 3.0150689`},
    {0.2`, 3.1986429`, 3.4448772`*^-7, 3.1986432`},
    {0.205`, 3.3842665`, 1.203198`*^-6, 3.3842677`},
    {0.21`, 3.5560302`, 3.0529863`*^-6, 3.5560333`},
    {0.215`, 3.7441885`, 6.080898`*^-6, 3.7441946`},
    {0.22`, 3.9424213`, 0.000010772479`, 3.9424321`},
    {0.225`, 4.1252774`, 0.000017707614`, 4.1252951`},
```

```

{0.23`, 4.3373613`, 0.000027150235`, 4.3373885`},
{0.235`, 4.5510224`, 0.000039087528`, 4.5510615`},
{0.24`, 4.7625623`, 0.000054884106`, 4.7626172`},
{0.245`, 4.9652465`, 0.000074973469`, 4.9653215`},
{0.25`, 5.1974475`, 0.000097874661`, 5.1975453`},
{0.255`, 5.4369342`, 0.0001280583`, 5.4370622`},
{0.26`, 5.6854132`, 0.00017933081`, 5.6855925`},
{0.265`, 5.9025413`, 0.00020719644`, 5.9027484`},
{0.27`, 6.1439276`, 0.00024493581`, 6.1441725`},
{0.275`, 6.3849229`, 0.00032412034`, 6.385247`},
{0.28`, 6.6469038`, 0.00036378125`, 6.6472676`},
{0.285`, 6.9189309`, 0.00049812284`, 6.919429`},
{0.29`, 7.182119`, 0.00050976484`, 7.1826288`},
{0.295`, 7.4743173`, 0.00082424006`, 7.4751415`},
{0.3`, 7.721839`, 0.00071073591`, 7.7225498`},
{0.305`, 7.9851334`, 0.00073928333`, 7.9858727`},
{0.31`, 8.2984982`, 0.00095507601`, 8.2994533`},
{0.315`, 8.58518`, 0.00096671393`, 8.5861467`},
{0.32`, 8.8527029`, 0.001235714`, 8.8539386`},
{0.325`, 9.1669986`, 0.0012179699`, 9.1682165`},
{0.33`, 9.4602334`, 0.0015845448`, 9.4618179`},
{0.335`, 9.7817861`, 0.0015016547`, 9.7832878`},
{0.34`, 10.075718`, 0.0019096685`, 10.077627`},
{0.345`, 10.405549`, 0.0018168751`, 10.407365`},
{0.35`, 10.731099`, 0.0022937997`, 10.733393`},
{0.355`, 11.07831`, 0.0021656595`, 11.080476`},
{0.36`, 11.378033`, 0.0026629889`, 11.380696`},
{0.365`, 11.691242`, 0.0025099072`, 11.693752`},
{0.37`, 12.078334`, 0.0030447357`, 12.081379`},
{0.375`, 12.406744`, 0.0047699304`, 12.411514`},
{0.38`, 12.755991`, 0.00340517`, 12.759396`},
{0.385`, 13.104005`, 0.004510867`, 13.108516`},
{0.39`, 13.420317`, 0.0037992857`, 13.424117`},
{0.395`, 13.787356`, 0.0046922756`, 13.792048`},
{0.4`, 14.150433`, 0.0048590308`, 14.155292`},
{0.405`, 14.532352`, 0.0049210694`, 14.537273`},
{0.41`, 14.85637`, 0.0066707128`, 14.863041`},
{0.415`, 15.258971`, 0.0052483472`, 15.264219`},
{0.42`, 15.631072`, 0.0063300608`, 15.637402`},
{0.425`, 15.965286`, 0.0075159867`, 15.972802`},
{0.43`, 16.366156`, 0.0064563232`, 16.372613`},
{0.435`, 16.691393`, 0.0078818935`, 16.699275`},
{0.44`, 17.085085`, 0.0081522387`, 17.093237`},
{0.445`, 17.516275`, 0.007691531`, 17.523967`},
{0.45`, 17.872041`, 0.0093976673`, 17.881439`},
{0.455`, 18.224`, 0.0094782028`, 18.233478`},
{0.46`, 18.579439`, 0.0089069256`, 18.588346`},
{0.465`, 18.955229`, 0.010661326`, 18.96589`},
{0.47`, 19.360104`, 0.011361295`, 19.371465`},
{0.475`, 19.828664`, 0.010337065`, 19.839001`},
{0.48`, 20.136484`, 0.011529471`, 20.148014`},
{0.485`, 20.545747`, 0.014197875`, 20.559945`},
{0.49`, 21.003404`, 0.013256065`, 21.01666`},

```



```

{0.495`, 21.343188`, 0.012561119`, 21.355749`},
{0.5`, 21.788032`, 0.014362654`, 21.802394`},
{0.505`, 22.137217`, 0.015357679`, 22.152574`},
{0.51`, 22.545067`, 0.014718477`, 22.559786`},
{0.515`, 22.945736`, 0.01479832`, 22.960534`},
{0.52`, 23.351579`, 0.016760042`, 23.368339`},
{0.525`, 23.754422`, 0.018539702`, 23.772962`},
{0.53`, 24.145262`, 0.018219689`, 24.163481`},
{0.535`, 24.533387`, 0.017774459`, 24.551162`},
{0.54`, 24.93107`, 0.01864032`, 24.94971`},
{0.545`, 25.324863`, 0.020991094`, 25.345854`},
{0.55`, 25.660499`, 0.022339494`, 25.682839`},
{0.555`, 26.056398`, 0.021043161`, 26.077441`},
{0.56`, 26.482839`, 0.021395794`, 26.504235`},
{0.565`, 26.831438`, 0.022805567`, 26.854244`},
{0.57`, 27.171943`, 0.024551196`, 27.196494`},
{0.575`, 27.426544`, 0.025214158`, 27.451758`},
{0.58`, 27.91553`, 0.026633499`, 27.942163`},
{0.585`, 28.358168`, 0.025626138`, 28.383794`},
{0.59`, 28.726865`, 0.026756261`, 28.753621`},
{0.595`, 29.099347`, 0.027410555`, 29.126758`},
{0.6`, 29.399512`, 0.028540217`, 29.428052`},
{0.605`, 29.732377`, 0.031123942`, 29.763501`},
{0.61`, 30.14597`, 0.032074241`, 30.178045`},
{0.615`, 30.491299`, 0.033485781`, 30.524785`},
{0.62`, 30.85215`, 0.034852088`, 30.887003`},
{0.625`, 31.159358`, 0.034947854`, 31.194306`},
{0.63`, 31.543953`, 0.037842731`, 31.581796`},
{0.635`, 31.898974`, 0.037620604`, 31.936594`},
{0.64`, 32.227456`, 0.039682853`, 32.267139`},
{0.645`, 32.542463`, 0.041572388`, 32.584035`},
{0.65`, 32.821785`, 0.041108723`, 32.862894`},
{0.655`, 33.077818`, 0.042464051`, 33.120282`},
{0.66`, 33.504966`, 0.043677047`, 33.548643`},
{0.665`, 33.771682`, 0.04507029`, 33.816752`},
{0.67`, 34.090058`, 0.046105746`, 34.136164`},
{0.675`, 34.387761`, 0.051599427`, 34.43936`},
{0.68`, 34.683606`, 0.052047271`, 34.735653`},
{0.685`, 34.95429`, 0.052823976`, 35.007114`},
{0.69`, 35.124929`, 0.056238111`, 35.181167`},
{0.695`, 35.40526`, 0.059325217`, 35.464585`},
{0.7`, 35.6785`, 0.060245203`, 35.738745`},
{0.705`, 35.895773`, 0.062214095`, 35.957987`},
{0.71`, 36.243328`, 0.066661074`, 36.309989`},
{0.715`, 36.496964`, 0.068409857`, 36.565374`},
{0.72`, 36.694774`, 0.069576412`, 36.76435`},
{0.725`, 36.935501`, 0.073517965`, 37.009019`},
{0.73`, 37.137197`, 0.075671674`, 37.212869`},
{0.735`, 37.380238`, 0.076575508`, 37.456814`},
{0.74`, 37.538812`, 0.082629193`, 37.621441`},
{0.745`, 37.71411`, 0.084667026`, 37.798777`},
{0.75`, 37.982164`, 0.086648888`, 38.068813`},
{0.755`, 38.112379`, 0.088910681`, 38.20129`},

```

```

{0.76`, 38.280509`, 0.095622462`, 38.376131`},
{0.765`, 38.43016`, 0.10251544`, 38.532676`},
{0.77`, 38.594142`, 0.10052139`, 38.694664`},
{0.775`, 38.715352`, 0.10396486`, 38.819317`},
{0.78`, 38.794224`, 0.11092752`, 38.905151`},
{0.785`, 38.888777`, 0.1168261`, 39.005603`},
{0.79`, 38.922357`, 0.11807764`, 39.040435`},
{0.795`, 38.976625`, 0.12081509`, 39.09744`},
{0.8`, 39.147821`, 0.12368465`, 39.271506`},
{0.805`, 39.178553`, 0.12875364`, 39.307307`},
{0.81`, 39.171347`, 0.13494801`, 39.306295`},
{0.815`, 39.222341`, 0.14307566`, 39.365417`},
{0.82`, 39.290083`, 0.14625765`, 39.436341`},
{0.825`, 39.271931`, 0.1457639`, 39.417695`},
{0.83`, 39.207511`, 0.15274091`, 39.360252`},
{0.835`, 39.229925`, 0.15529332`, 39.385218`},
{0.84`, 39.198664`, 0.16185655`, 39.360521`},
{0.845`, 39.133331`, 0.16753751`, 39.300869`},
{0.85`, 39.091445`, 0.17510847`, 39.266554`},
{0.855`, 39.011728`, 0.17680964`, 39.188538`},
{0.86`, 38.914182`, 0.18037355`, 39.094556`},
{0.865`, 38.785421`, 0.18576807`, 38.971119`},
{0.87`, 38.610628`, 0.19220527`, 38.802834`},
{0.875`, 38.510621`, 0.19823971`, 38.708861`},
{0.88`, 38.32383`, 0.20194142`, 38.525771`},
{0.885`, 38.144271`, 0.2082672`, 38.352538`},
{0.89`, 37.899348`, 0.21370728`, 38.113055`},
{0.895`, 37.639745`, 0.21838952`, 37.858134`},
{0.9`, 37.34359`, 0.21910217`, 37.562692`},
{0.905`, 37.043851`, 0.22447272`, 37.268323`},
{0.91`, 36.847838`, 0.22963469`, 37.077473`},
{0.915`, 36.474329`, 0.23391279`, 36.708242`},
{0.92`, 36.103097`, 0.23801741`, 36.341114`},
{0.925`, 35.757239`, 0.2428148`, 36.000053`},
{0.93`, 35.294728`, 0.24758552`, 35.542314`},
{0.935`, 34.863682`, 0.25331323`, 35.116995`},
{0.94`, 34.332812`, 0.25468376`, 34.587496`},
{0.945`, 33.850411`, 0.2574456`, 34.107857`},
{0.95`, 33.258136`, 0.26123815`, 33.519374`},
{0.955`, 32.597462`, 0.26399978`, 32.861461`},
{0.96`, 31.898058`, 0.26777962`, 32.165838`},
{0.965`, 31.100432`, 0.27097119`, 31.371403`},
{0.97`, 30.149571`, 0.27429541`, 30.423867`},
{0.975`, 28.961786`, 0.27752943`, 29.239316`},
{0.98`, 26.705354`, 0.27491279`, 26.980267`},
{0.985`, 25.060802`, 0.27760103`, 25.338403`},
{0.99`, 23.603498`, 0.27977012`, 23.883268`},
{0.995`, 22.383395`, 0.28241332`, 22.665808`},
{1., 21.104761`, 0.28520379`, 21.389965`}};

```

```

(* A função derTresPtos[x],
é uma implementação da regra de três pontos para *)
(* obter a derivada numérica de uma função continua no intervalo [a,b]. *)
derTresPtos[xdat_] := Module[{xdats = xdat, long},
  dim = Dimensions[xdats];
  long = dim[[1]];
  xder = {};
  Do[
    hp = (xdats[[k, 1]] - xdats[[k - 1, 1]]);
    hs = (xdats[[k - 1, 1]] - xdats[[k - 2, 1]]);
    xnum = hs * hs * xdats[[k + 1, 2]] +
      (hp * hp - hs * hs) * xdats[[k, 2]] - hp * hp * xdats[[k - 1, 2]];
    xden = hs * hp * (hs + hp);
    dyy = xnum / xden;
    AppendTo[xder, {xdats[[k, 1]], dyy}]
    , {k, 3, (long - 1)}]
  ]

(* Fator de correção na escala para
o eixo vertical da soma das taxas de relaxção de
4-mágnons nos processos umklapp e normal: fcvert=(36.5/39.87) *)

dimDat = Dimensions[datos];
datU = {};
datN = {};
datUN = {};
Do[
  AppendTo[datN, {datos[[k, 1]], 0.9154752947078004 * datos[[k, 2]]}];
  AppendTo[datU, {datos[[k, 1]], 45 * datos[[k, 3]]}];
  AppendTo[datUN, {datos[[k, 1]], datos[[k, 4]]} ],
  {k, 1, (dimDat[[1]])}]

derTresPtos[datUN]

```

```

buscandoMinimo[xarreglo_, yarray_] :=
Module[{xarray = xarreglo, yarray = yarray, long},
  datUNP = {};
  longXA = First[Dimensions[xarray]];
  longYA = First[Dimensions[yarray]];
  nVAMA = Min[Union[Abs[xarray[[All, 2]]]]];
  (*Numero de valor asoluto minimo en array*)
  Do[
    If[
      nVAMA == xarray[[k, 2]],
      vUbic = {k, xarray[[k, 1]], xarray[[k, 2]]}, {k, 1, longXA}];
  Do[
    If[
      yarray[[k, 1]] == vUbic[[2]], vFun = yarray[[k, 2]], {k, 1, longYA}];
  Do[
    If[yarray[[k, 1]] > 0.8,
      AppendTo[datUNP,
        {yarray[[k, 1]], 0.9154752947078004 * (vFun + (Abs[(vFun - yarray[[k, 2]])]) /
          (2 * longYA + 3 - vUbic[[1]] - k)) ^ 0.9123)}],
      AppendTo[datUNP, {yarray[[k, 1]], 0.9154752947078004 * yarray[[k, 2]]}],
      {k, 1, longYA}]]

buscandoMinimo[xder, datUN]

ListPlot[{datU, datN, datUNP}, Frame → True,
  PlotRange → {{0., 1.}, {0., 40.5}}, PlotStyle → {Blue, Red, Black},
  FrameStyle → Directive[Black, FontSize → 20], AspectRatio → 1,
  FrameLabel → {Style["2k/kZB", FontSize → 24, Black, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ηk", FontSize → 24, Black, FontFamily → "Helvetica"]}, ImageSize → Large]

h = BSplineFunction[datUNP];
s = BSplineFunction[datU];
r = BSplineFunction[datN];

Plot[{r[x][[2]], s[x][[2]], h[x][[2]]}, {x, 0.0, 1.}, Frame → True,
  PlotRange → {{0., 1.}, {0., 40.5}}, PlotStyle → {Green, Red, Black},
  FrameStyle → Directive[Black, FontSize → 20], AspectRatio → 1,
  FrameLabel → {Style["2k/kZB", FontSize → 24, Black, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ηk", FontSize → 24, Black, FontFamily → "Helvetica"]}, ImageSize → Large]

g1 = ListPlot[datN, PlotRange → {{0., 1.}, {0., 45.5}},
  Frame → True, Joined → True, AspectRatio → 1, ImageSize → Medium,
  FrameLabel → {"K", Style[Text["Relaxao Normal de 4-Magnons"]]]];
g2 = ListPlot[datU, PlotRange → {{0., 1.}, {0., 45.5}}, Frame → True,
  Joined → True, AspectRatio → 1, ImageSize → Medium,
  FrameLabel → {"K", Style[Text["Relaxao Umklapp de 4-Magnons"]]]];
g3 = ListPlot[datUN, PlotRange → {{0., 1.}, {0., 45.5}}, Frame → True,
  AspectRatio → 1, Joined → True, ImageSize → Medium,
  FrameLabel → {"K", Style[Text["Relaxao U+N de 4-Magnons"]]]];
g4 = ListPlot[{datU, datN, datUNP}, PlotRange → {{0., 1.}, {0., 45.5}},
  Frame → True, Joined → True, ImageSize → Medium, AspectRatio → 1,
  FrameLabel → {"K", Style[Text["Relaxao U+N de 4-Magnons"]]]];

GraphicsGrid[{{g1, g2}, {g3, g4}}]

```

```

jV = Dimensions[datUNP];
jmax = jV[[1]];
dadosjavier = {};
Do[AppendTo[dadosjavier,
  {datN[[j, 1]], datN[[j, 2]], datU[[j, 2]], datUNP[[j, 2]]}], {j, 1, jmax}];
Grid@{dadosjavier, Alignment -> "."};

Export["dadosjaviernew2.dat", dadosjavier];

```

Cálculo das taxas de relaxação de 3-mágnons no material ferrimagnético YIG.

```

directorioWindows =
  "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con
    _mathematica";
(*directorioLinux=
  "/home/javier/Dropbox/datos_tesis/fisica_computacional_con_mathematica";*)
SetDirectory[directorioWindows];

```

Função auxiliar para ajustar à função seno no intervalo $[0, \pi]$, tal que $\text{sen}(\theta_2)$ seja substituída pela nova função de ajuste $P_a(\cos(\theta_2))$

```

listaDeCoresAjuste = {Black, Blue, Orange};

dadosSeno = Table[{x, Sqrt[1 - Cos[x]^2]}, {x, 0, Pi, Pi/100}];
(*Tabela de dados para o ajuste de sen(θ2) no intervalo [0,π].*)

(*Modelo de ajuste usado para ajustar sen(θ2) no intervalo [0,π].*)
coef = {1, a[1], a[2]};
baseCos = {1, Cos[x]^2, Cos[x]^4};
modeloASin = coef.baseCos;

```

A seguir definimos os dois polinômios de Taylor $P_2(x)$ e $P_{14}(x)$ da função $f(x) = (1 - x^2)^{1/2}$ usadas para comparar nossa aproximação a $\text{sen}(\theta_2)$ no intervalo $[0, \pi]$ com eles.

```

p2[x_] := Normal@Series[Sqrt[1 - y^2], {y, 0, 2}] /. y -> Cos[x];
p14[x_] := Normal@Series[Sqrt[1 - y^2], {y, 0, 14}] /. y -> Cos[x];

(* Função de ajuste *)
modajustSin = FindFit[dadosSeno,
  {modeloASin, {-1 < a[1] < 1, -2 < a[2] < 2}}, {a[1], a[2]}, {x}];
funajustSin = Function[{t}, Evaluate[modeloASin /. modajustSin]];
funajustSin[x]

```

```
ajusteSeno = Show[
  Plot[{funajustSin[x], p2[x], p14[x]}, {x, 0., Pi}, PlotRange → {Full, {0, 1}},
    PlotStyle → listaDeCoresAjuste, Frame → True, PlotRangeClipping → True,
    PlotLegends → {" $P_a(\cos\theta_2)$ ", " $P_2(\cos\theta_2)$ ", " $P_{14}(\cos\theta_2)$ "},
    ListPlot[dadosSeno, PlotRange → {Full, {0, 1}}, Frame → True,
      PlotStyle → {PointSize[0.01], Red}, PlotRangeClipping → True,
      PlotLegends → {" $\sin(\theta_2)$ "}, FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 18],
      AspectRatio → 1., ImageSize → Large, FrameLabel → {{None, None},
        {None, Style["\nModelo de ajuste para a função Sen( $\theta_2$ ) com  $0 \leq \theta_2 \leq \pi$ \n",
          Black, FontSize → 14]}}]

Export["ajusteSeno.png", ajusteSeno];
```

Parâmetros e funções comuns no cálculo das taxas de relaxação

Parâmetros fundamentais do material e constantes físicas.

```
(*-----*)
cteγ = 2 * Pi * 2.81386 * 10^6.; (* Constante γ. *)
cteZ = 8.00; (* Número de vizinhos mais próximos. *)
cteR = 12.3760 10^(-8.0); (* Constante de rede. *)
hbar = 1.054570 10^(-27.0); (* Constante de planck dividida por 2π. *)
cteB = 1.38064880 10^(-16.0); (* Constante de Boltzmann. *)
cteMs = 1.7800 10^3.0; (* Magnetização de saturação. *)
cteSS = 14.200; (* Spin meio por unidade de volume. *)
wa = 8.949838917494797 * 10^12.; (*  $\omega_a = 2zSJ/\hbar$ . *)
pa = 1.0000000000000000; (* Parâmetro de ajuste a *)
pb = 6.572300852340632 * 10^-9; (* Parâmetro de ajuste b *)
pc = -0.7736253978982386; (* Parâmetro de ajuste c *)
(*-----*)
umTera = 10^12.0; (* Um Tera. *)
umGiga = 10^9.0; (* Um Giga. *)
umMega = 10^6.0; (* Um Mega. *)
umKilo = 10^3.; (* Um Kilo. *)
(*-----*)
tempC = 559.269;
hcapp = 1.0 * 10^3;
vsig = (0.4557618392999071 / 4.);
(*-----*)
```

Constantes derivadas.

```
wM = 4.00 * Pi * cteMs * cteγ; (* 4πγMs *)
cCf = hbar * (Pi * cteγ) ^2. / (16. * cteR ^3.); (* Coef da tasa de confluencia*)
cCs = (cCf / 2.); (* Coef da tasa de splitting*)
api = (cteR / Pi);
api2 = (cteR / Pi) ^2.;
pia = (Pi / cteR);
pia2 = (Pi / cteR) ^2.;
omegaZB = 8.949838917494797 * 10 ^12.;
omegaA = (tempC * cteB * vsig) / hbar;
coefTau = (omegaA / (128.00 * cteSS * cteSS));

funFreqWk[h_, z_, s_] := Sqrt[
  (cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * z] ^2.) (cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * z] ^2.
    + wM * Sin[s] ^2.); (* Expressão exata para a frequência ωk. *)

funFreqAproxWk[h_, z_, s_] :=
  cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * z] ^2. + 0.5 * wM * Sin[s] ^2.;
  (* Expressão aproximada para a frequência ωk. *)

(*funTCf[tp_, h_, y_, q_] := Sinh[(0.5 * hbar * funFreqWk[h, y, q]) / (cteB * tp)]; *)
funTCf[tp_, h_, y_, q_] := Sinh[(0.5 * hbar * funFreqWk[h, y, q]) / (cteB * tp)];
```

Coeficiente do Hamiltoniano de 3 - Mágnons

```
funCTM[u_, q_, v_, t_] := 0.25 * Sin[2. q] ^2. +
  u * Sqrt[Abs[1. - u * u]] * Sin[2. q] * Cos[v - t] + u * u * (1. - u * u);
```

Funções próprias do integrando.

```
(*funWK2[h_, x_, u_] := cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * x] ^2. + 0.5 * wM * (1. - u * u); *)
funWK2[h_, x_, u_] := Sqrt[
  (cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * x] ^2.) (cteγ * h + 2.0 * wa * Sin[0.5 * Pi * x] ^2.
    + wM * (1. - u ^2.))];
funI1[tp_, h_, x_, u_] := Csch[0.5 * hbar * funWK2[h, x, u] / (cteB * tp)];
```

Intervalos de temperatura e vetor de onda

Taxas de relaxação num processo de confluência

Definições das funções básicas usadas para aproximar à frequência ω_k , o argumento da função delta de Dirac, e a magnitude do vetor de onda total $|k_1 + k_2|$ para o processo de confluência.

Antes de iniciar nossas estimações numéricas faremos um convênio de variáveis entre a notação matematica tradicional e as variáveis para fazer nossas computações. Isto significa que em forma geral $k_1 \rightarrow y$, $k_2 \rightarrow x$, $u \rightarrow \text{Cos}(\theta_2)$, $q \rightarrow \theta_1$, $\varphi_1 \rightarrow v$, $\varphi_2 \rightarrow t$. Quando não existe claridade se a variável usada é com subíndice 1 ou 2, usaremos a notação: $k_1, k_2 \rightarrow z$, $\theta_1, \theta_2 \rightarrow s$ e finalmente $\varphi_1, \varphi_2 \rightarrow f$.

Também toda função numérica terá o prefixo *fun* por exemplo para ω_k usamos como possível nome a *funFreqWk*.

Frequências exatas e aproximadas

```
Manipulate[Plot[
  {(funFreqWk[h, x, Pi / 2.] / umTera), (funFreqAproxWk[200., x, Pi / 2.] / umTera)},
  {x, 0., 1.0}, PlotRange → {{0., 0.5}, {0., 28.5}},
  PlotRangeClipping → True, PlotStyle → {Red, Black},
  Frame → True, PlotLegends → {Panel[" $\omega_k$ "], Panel[" $\omega_k^{(a)}$ "]},
  ImageSize → Medium, AspectRatio → 1], {h, 100., 3500., 100.}]
```

Frequências para diferentes valores de campo

Frequências para diferentes valores de campo no intervalo $0 \leq x \leq 0.03$

```
graficosCampoUA = Table[Plot[(funFreqAproxWk[y, x, Pi / 2.] / umTera),
  {x, 0.0, 0.5}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0025], Black},
  PlotRange → {{-0.0001, 0.03}, {-0.0001, 0.085}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 18],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 100., 3500., (3400. / 7)}];
(**)
graficosCampoUB = Plot[
  {(funFreqWk[100., x, Pi / 2.] / umTera), (funFreqWk[3500., x, Pi / 2.] / umTera)},
  {x, 0.0, 0.5}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {{Thickness[0.005], Red}, {Thickness[0.005], Red},
    {Thickness[0.001], Black}}, PlotRange → {{-0.0001, 0.03}, {-0.0001, 0.085}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 16],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style[" $\omega$ (THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 20], ImageSize → Large];
(* Show[graficosCampoUA, graficosCampoUB] *)
Export["freqApproxCampU.png", Show[graficosCampoUA, graficosCampoUB]];
```


Frequencias para diferentes valores de campo no intervalo $0 \leq x \leq 0.1$

```
graficosCampo1 = Table[Plot[(funFreqAproxWk[y, x, Pi / 2.] / umTera),
  {x, 0.0, 0.1}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}}, PlotStyle →
  {Thickness[0.0025], Black}, PlotRange → {{-0.0001, 0.1}, {-0.0001, 0.5}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kzB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["ω (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 100., 3500., (3400. / 7)}];

(**)
graficosCampo2 = Plot[
  {(funFreqWk[100., x, Pi / 2.] / umTera), (funFreqWk[3500., x, Pi / 2.] / umTera)},
  {x, 0.0, 0.1}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {{Thickness[0.005], Red}, {Thickness[0.005], Red}},
  PlotRange → {{-0.0001, 0.1}, {-0.0001, 0.5}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kzB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["ω (THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large];
Export["freqAproxCampD.png", Show[graficosCampo1, graficosCampo2]];
```

Frequencias para diferentes valores de campo no intervalo $0 \leq x \leq 0.5$

```
grafCampouno = Table[Plot[(funFreqAproxWk[y, x, Pi / 2.] / umTera),
  {x, 0.0, 0.5}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0025], Black}, PlotRange → {{-0.0001, 0.5}, Full},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kzB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["ω (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 100., 3500., (3400. / 7)}];

(**)
grafCampodos = Plot[
  {(funFreqWk[100., x, Pi / 2.] / umTera), (funFreqWk[3500., x, Pi / 2.] / umTera)},
  {x, 0.0, 0.5}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {{Thickness[0.005], Red}, {Thickness[0.005], Red}},
  PlotRange → {{-0.0001, 0.5}, Full},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kzB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
  Style["ω (THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large];
Export["freqAproxCampT.png", Show[grafCampouno, grafCampodos]];
```

Frequências para diferentes valores de campo no intervalo $0 \leq x \leq 1$

```
graphCamp1 = Table[Plot[(funFreqAproxWk[y, x, Pi / 2.] / umTera),
  {x, 0.0, 1.}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {Thickness[0.0025], Black}, PlotRange → {{-0.0001, 1.}, Full},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω (THz)", Black, FontSize → 24, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  ImageSize → Large], {y, 100., 3500., (3400. / 7)}];

(**)
graphCamp2 = Plot[
  {(funFreqWk[100., x, Pi / 2.] / umTera), (funFreqWk[3500., x, Pi / 2.] / umTera)},
  {x, 0.0, 1.}, AspectRatio → 1., AxesOrigin → {0., 0.}, Frame → True,
  FrameTicks → {{Automatic, Automatic}, {Automatic, Automatic}},
  PlotStyle → {{Thickness[0.005], Red}, {Thickness[0.005], Red}},
  PlotRange → {{-0.0001, 1.}, Full}, PlotRangeClipping → True,
  FrameTicks → Directive[Black, 20],
  FrameLabel → {Style["k/kZB", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["ω (THz)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], ImageSize → Large];
Export["freqAproxCampC.png", Show[graphCamp1, graphCamp2]];
```

Funções requeridas para constroir o integrando da taxa de relaxação no processo de confluência.

Funções auxiliares: $\Lambda_0(k_1, k_2)$, $\Lambda_1(k_1, k_2)$ e $\Lambda_2(k_1, k_2)$.

```
funVL0[y_, x_] :=
  (api2 / (x + y) ^ 2.) * (1. + (2.0 * x * y) / (x + y) ^ 2. + (2. * x * y) ^ 2. / (x + y) ^ 4.);
funVL1[y_, x_] := ((api2 * x * y) / (x + y) ^ 4.) * (1. + 4.0 * (x * y) / (x + y) ^ 2.);
funVL2[y_, x_] := ((4. * api2) * (x * y) ^ 2. / (x + y) ^ 6.);
```

Funções auxiliares: $J_0(\lambda)$, $J_1(\lambda)$ e $J_2(\lambda)$.

```
funJ0[y_, x_, q_, v_, t_] :=
  pia2 * (x * x + (y * Sin[q]) ^ 2. + 2. * pa * x * y * Sin[q] * Cos[v - t]);
funJ1[y_, x_, q_, v_, t_] := 2. * pia2 * pb * x * y * Sin[q] * Cos[v - t];
funJ2[y_, x_, q_, v_, t_] := pia2 * (2. * pc * x * y * Sin[q] * Cos[v - t] - x * x);
```

Funções auxiliares: $L_0(\lambda)$, $L_1(\lambda)$ e $L_2(\lambda)$.

```
funL0[y_, x_, q_, v_, t_] := funVL0[y, x] -
  2. * pa * funVL1[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t] + funVL2[y, x] * (Sin[q] Cos[v - t]) ^ 2.;
funL1[y_, x_, q_, v_, t_] := pa * funVL2[y, x] * Sin[2. * q] Cos[v - t] -
  2. * funVL1[y, x] * (Cos[q] + pb * Sin[q] * Cos[v - t]);
funL2[y_, x_, q_, v_, t_] := funVL2[y, x] *
  (Cos[q] ^ 2. + pb * Sin[2. * q] * Cos[v - t] - (Sin[q] Cos[v - t]) ^ 2.) -
  2. * pc * funVL1[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t];
```

Funções auxiliares: $N_0(\lambda)$, $N_1(\lambda)$ e $N_2(\lambda)$.

```
funN0[y_, x_, q_, v_, t_] := funJ0[y, x, q, v, t] * funL0[y, x, q, v, t];
funN1[y_, x_, q_, v_, t_] := (funJ0[y, x, q, v, t] * funL1[y, x, q, v, t]
+ funJ1[y, x, q, v, t] * funL0[y, x, q, v, t]);
funN2[y_, x_, q_, v_, t_] := (funJ0[y, x, q, v, t] * funL2[y, x, q, v, t] +
funJ1[y, x, q, v, t] * funL1[y, x, q, v, t]
+ funJ2[y, x, q, v, t] * funL0[y, x, q, v, t]);
```

Funções auxiliares para definir $\gamma_{k_s} = \cos(\pi k_s)$.

Funciones auxiliares: $X_i^{(c)}(k_1, k_2)$

```
funXC0[y_, x_] :=
pia * (x + y) * (1. - (x * y) / (x + y) ^ 2. - (0.5 * x * x * y * y) / (x + y) ^ 4.);
funXC1[y_, x_] := pia * ((x * y) / (x + y)) * (1. + 0.5 * ((x * y) / (x + y) ^ 2.));
funXC2[y_, x_] := 0.5 * pia * ((x * y) ^ 2. / (x + y) ^ 3.);

funKS[y_, x_, q_, v_, t_] := funXC0[y, x] +
pa * funXC1[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t] - funXC2[y, x] * (Sin[q] * Cos[v - t]) ^ 2.;
funGKS[y_, x_, q_, v_, t_] := Cos[Pi * funKS[y, x, q, v, t]];
```

Funções auxiliares: $\bar{N}_0(\lambda)$, $B(\lambda)$ e $C(\lambda)$.

```
funBN0[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
((2. * wa) / wM) * (Cos[Pi * x] - funGKS[y, x, q, v, t]) + funN0[y, x, q, v, t] -
((2. * funFreqAproxWk[h, y, q]) / wM) - 1. (*  $\bar{N}_0(\lambda)$  *);

funBLam[y_, x_, q_, v_, t_] := -0.5 * funN1[y, x, q, v, t] / (1. + funN2[y, x, q, v, t]);
(*  $B(\lambda)$  *)

funCLam[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
funBN0[h, y, x, q, v, t] / (1. + funN2[y, x, q, v, t]); (*  $C(\lambda)$  *)
```

Funções auxiliares: Δ , U_0 e U_1 .

```
funDisc[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
Sqrt[Abs[(funBLam[y, x, q, v, t] ^ 2. - funCLam[h, y, x, q, v, t])]]; (*  $\Delta(\lambda)$  *)

funU0[h_, y_, x_, q_, v_, t_] := funBLam[y, x, q, v, t] + funDisc[h, y, x, q, v, t];
(*  $U_0(\lambda)$  *)

funU1[h_, y_, x_, q_, v_, t_] := funBLam[y, x, q, v, t] - funDisc[h, y, x, q, v, t];
(*  $U_1(\lambda)$  *)
```

Função do integrando da taxa de relaxação num processo de confluência

A seguir definiremos três funções básicas: uma que define o coeficiente que caracteriza a intensidade da interação de 3-Magnons, e as outras duas que ao integrando mesmo da taxa de relaxação.

Funções próprias do integrando.

```

scalC = 0.001;
Off[NIntegrate::levtime];
Off[NIntegrate::mtdfb];
Off[NIntegrate::slwcon];
Off[NIntegrate::ncvb];
Off[NIntegrate::eincr];

funWKS[h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] := cteγ * h + wa * (1. - funGKS[y, x, q, v, t]) +
  0.5 * wM * (funN0[y, x, q, v, t] + u * funN1[y, x, q, v, t]
    + u * u * funN2[y, x, q, v, t]); funIS1[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] :=
  CsCh[0.5 * hbar * funWKS[h, y, x, q, v, t, u] / (cteB * tp)];

funI2[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] :=
  (funCTM[u, q, v, t] * funIS1[tp, h, y, x, q, v, t, u] * funI1[tp, h, x, u]);

funInteg[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  (x * x) * (funI2[tp, h, y, x, q, v, t, scalC * funU0[h, y, x, q, v, t]]
    + funI2[tp, h, y, x, q, v, t, scalC * funU1[h, y, x, q, v, t]]) /
  (Abs[1. + funN2[y, x, q, v, t]] Abs[funDisc[h, y, x, q, v, t]]);

funIConf[tp_, h_, y_, q_, v_] := NIntegrate[funInteg[tp, h, y, x, q, v, t],
  {x, 0., 1.}, {t, 0., 2. Pi}, PrecisionGoal → 10, AccuracyGoal → 6,
  Method → {"MultidimensionalRule", "Generators" → 9}];

Métodos de integração N-dimensional:
1) Method → {"GaussKronrodRule", "LobattoKronrodRule"}
2) Method → "UnitCubeRescaling"
3) Method → {"MultidimensionalRule", "Generators" → 9}
4) Method → {"GlobalAdaptive", "SingularityHandler" → "DuffyCoordinates"}

funTR3MC[tp_, h_, y_, q_, v_] := cCf * funTCf[tp, h, y, q] * funIConf[tp, h, y, q, v];

```

Integrações de $I_{conf}(k)$

```

tasRel3MagConf[hcamp_, atetha_, aphi_] :=
Block[{hfm = hcamp, ate = atetha, af = aphi, tmax, tmin, tpas,
  vecX, vecT, vecHF, nomeArquivo, dTax3MC, ddTax3MC, datox3MC,
  i, j, k, nf = 5, nXMax = 35, nTMax = 35, umTHz = 10^12.},
(**)
If[(500 ≤ hfm ≤ 4000) && (0 ≤ ate ≤ Pi / 2.) && (0 ≤ af ≤ Pi),
Continue, MessageDialog[
  Text[Style["Erro: Valores não permitidos para os parâmetros  $H_0$ ,  $\theta$  e  $\varphi$ .",
    FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
Abort[]
];
tmin = 1.;
tmax = 331.;
tpas = (300.0 / nTMax);
vecX = Range[0., 1., (1. / nXMax)];
vecT = Range[tmin, tmax, tpas];
vecHF = hfm * Range[0.0, 1.0, (1.0 / nf)];
(* Para uma faixa uniforme de campo magnético aplicado*)
nomeArquivo = {};
Do[AppendTo[nomeArquivo, StringJoin[ToString["rel3magConf"],
  ToString[k], ToString[".dat"]]], {k, 1, nf + 1}];
Do[
  dTax3MC[k] = Table[{vecX[[i]], vecT[[j]],
    (Abs[funTR3MC[vecT[[j]], vecHF[[k]], 0.50 * vecX[[i]], ate, af]] / umTHz)},
    {i, nXMax + 1}, {j, nTMax + 1}];
  datox3MC[k] = Table[If[dTax3MC[k][[i, j, 3]] ≤ 1.0, {vecX[[i]],
    vecT[[j]], dTax3MC[k][[i, j, 3]]}], {i, nXMax + 1}, {j, nTMax + 1}];
  ddTax3MC[k] = Flatten[datox3MC[k], 1];
  Export[nomeArquivo[[k]], ddTax3MC[k], "Data", {k, 1, nf + 1}]

tasRel3MagConf[3500., Pi / 2., Pi / 4.]

(* nXMax=50;
vecX=Range[0.,1.,(1./nXMax)];
tmin=1.;
tmax=331.;
tpas=(300.0/nXMax);
vecT=Range[tmin,tmax,tpas];
hfm = 10^3.;
nf=5;
vecHF=hfm*Range[30.0,330.0,(300.0/nf)]; *)

(* tet=Range[0,Pi/2.,Pi/40.];
phi = Range[0,Pi,Pi/20.];*)

(* datox3MC=Table[{tet[[j]],vecX[[i]],
  (Abs[funTR3MC[vecT[[1]],vecHF[[1]],vecX[[i]],tet[[j]],Pi/4.]]/umTera)},
  {i,nXMax+1},{j,Length@phi}]*

```

Taxas de relaxação num processo de splittiting

Funções auxiliares $\Lambda_0^{(s)}(k_1, k_2)$, $\Lambda_1^{(s)}(k_1, k_2)$ e $\Lambda_2^{(s)}(k_1, k_2)$ do processo de splitting para aproximar k_d^{-2} .

```
funVLS0[y_, x_] := api2 * ( ( 1. / (y - x) ^ 2.) - (2.0 * x * y / (y - x) ^ 4.)
+ (4.0 * (x * y) ^ 2. / (x - y) ^ 6.) );
funVLS1[y_, x_] := api2 * ( (x * y) / (y - x) ^ 4. - 4.0 * ((x * y) ^ 2. / (y - x) ^ 6.) );
funVLS2[y_, x_] := (4. * api2) * ((x * y) ^ 2. / (y - x) ^ 6.);
```

Funções auxiliares: $J_0^{(s)}(\lambda)$, $J_1^{(s)}(\lambda)$ e $J_2^{(s)}(\lambda)$ do processo de splitting.

```
funJS0[y_, x_, q_, v_, t_] :=
pia2 * (x * x + (y * Sin[q]) ^ 2. - 2. * pa * x * y * Sin[q] * Cos[v - t]) ;
funJS1[y_, x_, q_, v_, t_] := -2. * pia2 * pb * x * y * Sin[q] * Cos[v - t] ;
funJS2[y_, x_, q_, v_, t_] := -pia2 * (x * x + 2. * pc * x * y * Sin[q] * Cos[v - t]) ;
```

Funções auxiliares: $L_0^{(s)}(\lambda)$, $L_1^{(s)}(\lambda)$ e $L_2^{(s)}(\lambda)$ do processo de splitting.

```
funLS0[y_, x_, q_, v_, t_] :=
funVLS0[y, x] + 2. * pa * funVLS1[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t] +
funVLS2[y, x] * (Sin[q] Cos[v - t]) ^ 2.;
funLS1[y_, x_, q_, v_, t_] := pa * funVLS2[y, x] * Sin[2. * q] Cos[v - t] +
2. * funVLS1[y, x] * (Cos[q] + pb * Sin[q] * Cos[v - t]) ;
funLS2[y_, x_, q_, v_, t_] := funVLS2[y, x] *
(Cos[q] ^ 2. + pb * Sin[2. * q] * Cos[v - t] - (Sin[q] Cos[v - t]) ^ 2.) +
2. * pc * funVLS1[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t] ;
```

Funções auxiliares: $N_0^{(s)}(\lambda)$, $N_1^{(s)}(\lambda)$ e $N_2^{(s)}(\lambda)$.

```
funNS0[y_, x_, q_, v_, t_] := funJS0[y, x, q, v, t] * funLS0[y, x, q, v, t] ;
funNS1[y_, x_, q_, v_, t_] := (funJS0[y, x, q, v, t] * funLS1[y, x, q, v, t]
+ funJS1[y, x, q, v, t] * funLS0[y, x, q, v, t]) ;
funNS2[y_, x_, q_, v_, t_] := (funJS0[y, x, q, v, t] * funLS2[y, x, q, v, t] +
funJS1[y, x, q, v, t] * funLS1[y, x, q, v, t]
+ funJS2[y, x, q, v, t] * funLS0[y, x, q, v, t]) ;
```

Funções auxiliares para definir $\gamma_{k_d} = \cos(\pi k_d)$.

```
funZS[y_, x_] := pia * ((y - x) + (x * y) / (y - x) - 0.5 * ((x * y) ^ 2. / (y - x) ^ 3.)
+ 0.5 * ((x * y) ^ 3. / (y - x) ^ 5.)) ;
funQS[y_, x_] := pia * (((x * y) ^ 2. / (x - y) ^ 3.) - ((x * y) / (y - x))
- 1.5 * ((x * y) ^ 3. / (y - x) ^ 5.)) ;
funKD[y_, x_, q_, v_, t_] := funZS[y, x] + funQS[y, x] * Sin[q] * Cos[v - t] ;
funGKD[y_, x_, q_, v_, t_] := Cos[Pi * funKD[y, x, q, v, t]] ;
```

Funções auxiliares: $\overline{N}_0^{(s)}(\lambda)$, $B^{(s)}(\lambda)$ e $C^{(s)}(\lambda)$.

```
funBNS0[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
Sin[q] ^ 2. + ((2. * wa) / wM) * (Cos[Pi * x] + funGKD[y, x, q, v, t]
- Cos[Pi * y]) - (2. * (wa + cteγ * h) / wM) -
funNS0[y, x, q, v, t] - ((2. * cteγ * h) / wM) - 1. (*  $\overline{N}_0(\lambda)$  *) ;
```

```

funBLamS[y_, x_, q_, v_, t_] :=
  -0.5 * funNS1[y, x, q, v, t] / (funNS2[y, x, q, v, t] - 1.); (*B(λ)*)
funCLamS[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  funBNS0[h, y, x, q, v, t] / (funNS2[y, x, q, v, t] - 1.) (*C(λ)*)

```

Funções auxiliares: $\Delta^{(s)}$, $U_0^{(s)}$ e $U_1^{(s)}$.

```

funDiscS[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  Sqrt[Abs[funBLamS[y, x, q, v, t]^2. + funCLamS[h, y, x, q, v, t]]] (*Δ(λ)*)
funUS0[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  funBLamS[y, x, q, v, t] + funDiscS[h, y, x, q, v, t];
funUS1[h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  funBLamS[y, x, q, v, t] - funDiscS[h, y, x, q, v, t];

```

Função do integrando da taxa de relaxação num processo de Splitting

A seguir definiremos três funções básicas: uma que define o coeficiente que caracteriza a intensidade da interação de 3-Magnons, e as outras duas que ao integrando mesmo da taxa de relaxação.

```

scals = 0.001;

funWKD[h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] := cteγ * h + wa * (1. - funGKD[y, x, q, v, t]) +
  0.5 * wM * (funNS0[y, x, q, v, t] + u * funNS1[y, x, q, v, t]
  + u * u * funNS2[y, x, q, v, t]); funID1[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] :=
  Csch[0.5 * hbar * funWKD[h, y, x, q, v, t, u] / (cteB * tp)];

funID2[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_, u_] :=
  (funCTM[u, q, v, t] * funID1[tp, h, y, x, q, v, t, u] * funI1[tp, h, x, u]);

funIntSplit[tp_, h_, y_, x_, q_, v_, t_] :=
  (x * x) * (funID2[tp, h, y, x, q, v, t, scals * funUS0[h, y, x, q, v, t]]
  + funID2[tp, h, y, x, q, v, t, scals * funUS1[h, y, x, q, v, t]]) /
  (Abs[funNS2[y, x, q, v, t] - 1.] Abs[funDiscS[h, y, x, q, v, t]]);

funISplit[tp_, h_, y_, q_, v_] := NIntegrate[funIntSplit[tp, h, y, x, q, v, t],
  {x, 0., 1.}, {t, 0., 2. Pi}, PrecisionGoal → 10, AccuracyGoal → 6,
  Method → {"MultidimensionalRule", "Generators" → 9}];

Off[NIntegrate::levtime];
Off[NIntegrate::mtdfb];
Off[NIntegrate::slwcon];
Off[NIntegrate::ncvb];
Off[NIntegrate::eincr];

iSpX = Table[{vecX[[k]], funISplit[330., 1500., vecX[[k]], Pi / 2., 0.0]},
  {k, 1, Length@vecX}];

tasiSpX =
  Table[{vecX[[k]], 0.5 * cCf * funTCf[330., 1500., vecX[[k]], Pi / 2.] * iSpX[[k]]},
  {k, 1, Length@vecX}];

iSpT = Table[funISplit[vecTemp[[k]], 1500., 0.5, Pi / 2., 0.0],
  {k, 1, Length@vecTemp}]; (* *)

```

```

ListLinePlot[Table[{vecTemp[[k]],
  Abs@((2. / (cCf * funTCf[vecTemp[[k]], 1500., 0.5, Pi / 2.] * vecTemp[[k]])) *
  Re@trelConfT[[k, 2]])}, {k, 1, Length@vecTemp}], PlotRange -> {Full, Full}]

tasiSpT = Table[
  {vecTemp[[k]], 0.5 * cCf * funTCf[vecTemp[[k]], 1500., 0.5, 0.0] * iSpT[[k]]},
  {k, 1, Length@vecTemp}]

GraphicsGrid[{{ListLinePlot[Re[tasiSpX], Frame -> True,
  PlotRange -> {Full, Full}, ImageSize -> Medium], ListLinePlot[Re[tasiSpT],
  Frame -> True, PlotRange -> {Full, Full}, ImageSize -> Medium]}}]

```

Taxas de relaxação τ_k^{-1} em campos magnéticos intensos

```

vLH = ((cteγ * hbar) / (cteB * tempC));
vargy[h_, t_] := vLH * h + vsig * (1 - t);

```

funciones básicas que definen los γ_k .

```

fgam[x_] := Cos[x * Pi];
fsumxy[x_, y_, q_] := Sqrt[x^2. + y^2. + 2. * x * y * Cos[q]];
fgamSum[x_, y_, q_] := fgam[fsumxy[x, y, q]];
fUnoGamSum[x_, y_, q_] := (1. + fgamSum[x, y, q]);

```

A seguir, identificaremos a variável x com o vetor de onda k e a variável k_2 vai ser identificada com a letra y . Então, usaremos este convênio até o final das computações numéricas.

Conjunto de expressões definidas na eq (5.113) do corpo da tese.

```

funGOne[x_, y_, q_] := (fgam[x] + fgam[y] + fgamSum[x, y, q]) / fUnoGamSum[x, y, q];
funGTwo[x_, y_, q_] := ((fgam[x] + fgam[y]) / fUnoGamSum[x, y, q]) -
  Sqrt[(2 - fUnoGamSum[x, y, q]) / fUnoGamSum[x, y, q]];
funGThree[x_, y_, q_] := (2. * fUnoGamSum[x, y, q]) /
  Sqrt[4. * fUnoGamSum[x, y, q]^2. -
  (fgamSum[x, y, q]^2. + 2. * (fgam[x] + fgam[y] - 1))^2.];
funGFour[x_, y_, q_] := (2. * fgam[x]^2. + fgam[x] + fgam[y] -
  (fgamSum[x, y, q] * fgamSum[x, y, q] / 2.) - 3.) +
  (fgam[x] + fgam[y] + (fgamSum[x, y, q] * fgamSum[x, y, q] / 2.) - 1.) *
  (1. - (4. * fgamSum[x, y, q] / fUnoGamSum[x, y, q]));

```


Funções para que definem o integrando da taxa de relaxação de 4-mágnons em un campo magnético muito intenso: equação (5.119).

```
fInTRel[camp_, temp_, x_, y_, q_] :=
  ( (x * x * funGThree[x, y, q]) / Abs[fUnoGamSum[x, y, q]]) *
  ( (Abs[funGFour[x, y, q]] * Abs[funGFour[x, y, q]] *
    (ArcCos[funGTwo[x, y, q]] * ArcCos[funGTwo[x, y, q]]) *
    Csch[vargy[camp, fgam[y]] / (2. * temp)]) *
  Csch[vargy[camp, funGOne[x, y, q]] / (2. * temp)] *
  Csch[vargy[camp, funGTwo[x, y, q]] / (2. * temp)];

integTasRel[camp_, temp_, x_] := NIntegrate[fInTRel[camp, temp, x, y, q],
  {y, 0., 1.0}, {q, 0., Pi}, Exclusions -> {Pi / 2.}, AccuracyGoal -> 6,
  PrecisionGoal -> 10, Method -> "UnitCubeRescaling" ];

TasRel[camp_, temp_, x_] := ((coefTau) / Pi) *
  Sinh[vargy[camp, fgam[x]] / (2. * temp)] * integTasRel[camp, temp, x];
```

Cálculo das superfícies $\tau_k^{-1}(k, T)$ para campo magnético fixo.

A seguir calcularemos as superfícies $\tau_k^{-1}(k, T)$ para os valores de campo magnético H_0 iguais a: 0 kOe, 70 kOe, 150 kOe, 200 kOe, 250 kOe e 300 kOe respectivamente. Vamos desenvolver um módulo de programa que calculará uma matriz cúbica de dimensões $N \times N \times M$. Típicamente os valores tomados para N e M são 51 e 6 respectivamente.

```

rel4Magnons[hfielMax_, nptoField_] :=
Block[{hfm = hfielMax, nf = nptoField, vecHField, intTemp, intVetK,
  dadosTaxas, datosTaxas, surf4magnons, haux, tmin, tmax, tpas, i, j, k,
  ik, datox, nomeArquivo, nMax = 50, umTHz = 10^12.0, tempMax = 559.269},
  (**)
  If[ (* Inicio do Conditional No:1. *)
    hfm > 300,
    MessageDialog[Text[Style["Erro: Excedido o valor máximo permtido para H0."
      , FontColor → Red, FontSize → Large, Bold]]];
    Abort[(* Fim do Conditional No:1. *)
  ];
  tmin = (1.0 / tempMax);
  tmax = (331.0 / tempMax);
  tpas = (33.0 / (5. * tempMax));
  (*vecHField=haux*Range[0.0,1.0,(1.0/nf)];*)
  (* Faixa uniforme de campo magnético aplicado. *)
  haux = 10^3.;
  vecHField = haux * {0., 0.001, 70., 200., 300.};
  intVetK = Range[0., 1., (1. / nMax)];
  (* Faixa de valores de k para a integração. *)
  intTemp = Range[tmin, tmax, tpas];
  (* Faixa de temperaturas consderadas. *)
  (**)
  nomeArquivo = {};
Do[AppendTo[nomeArquivo, StringJoin[ToString["rel4magHINonUniform"],
  ToString[k], ToString[".dat"]]], {k, 1, nf}];
  (**)
  Do[
    dadosTaxas[k - 1] = Table[{intVetK[[i]], intTemp[[j]],
      (Abs[TasRel[vecHField[[k]], intTemp[[j]], (0.4 * intVetK[[i]])] / umTHz)},
      {i, nMax + 1}, {j, nMax + 1}];
    (**)
    datox[k - 1] = Table[If[dadosTaxas[k - 1][[i, j, 3]] ≤ 0.06, {intVetK[[i]],
      intTemp[[j]], dadosTaxas[k - 1][[i, j, 3]]}], {i, nMax + 1}, {j, nMax + 1}];
    dadosTaxas[k - 1] = Flatten[datox[k - 1], 1];
    (**)
    Export[nomeArquivo[[k - 1]], dadosTaxas[k - 1], "Data"];
    , {k, 2, nf + 1}]]
rel4Magnons[300, 4]

```

Capítulo 6: Propriedades termicas de Magnosns em YIG aplicando campos magnéticos externos muito intensos.

Parâmetros do YIG e constantes adicionais

Endereço das pastas de arquivos

Pasta WINDOWS para salvar os arquivos de Dados nos procedimentos numéricos desenvolvidos.

```
dirWIN = "C:\\Users\\Javier\\Dropbox\\datos_tesis\\fisica_computacional_con  
_matematica";
```

```
SetDirectory[dirWIN];
```

```
(*-----  
*)  
umTera = 10^12.0 ;           (* Um Tera. *)  
umGiga = 10^9.0 ;           (* Um Giga. *)  
umMega = 10^6.0 ;           (* Um Mega. *)  
umKilo = 10^3.;             (* Um Kilo. *)  
cteD = 5.1700 10^(-9.0);     (* Constante D. *)  
cteγ = 2 * Pi * 2.800 10^6.0 ; (* 2*Pi* Constante γ. *)  
cteZ = 8.00 ;               (* No de vecinos mas próximos. *)  
cR = 1.23760 × 10^(-7.0);    (* Constante de red. *)  
hbar = 1.054570 × 10^(-27.0); (* Constante de planck entre 2π. *)  
kB = 1.38064880 × 10^(-16.0); (* constante de Boltzmann. *)  
cteMs = 1.7500 10^3.0 ;     (* Magnetización de saturación. *)  
cteSS = 14.200 ;            (* Espin medio por unidade de volumen. *)  
tempC = 559.269;  
umErgcm = 5.0341 × 10^15.; (* Erg → cm-1 *)  
vsig = (0.4557618392999071 / 4.);  
(*-----  
*)
```

Algumas quantidades funções e constantes úteis, comuns para as propriedades térmicas: Magnetização, Calor específico, Conductividade térmica, Livre caminho médio e Velocidade média dos mágnons.

```
wA = 8.949838917494797 * 10^12.;  
omegaA = (tempC * kB * vsig) / hbar;  
lambdaZ = (2.00 * hbar * wA) / (kB * tempC);  
cteJJ = (cteD / (2.0 * cteSS * cR * cR));  
coefTau = (omegaA / (128.00 * cteSS * cteSS));  
cCterm = (2 * kB * cteSS * cteSS * Pi * Pi) / (3 * omegaA * cR);  
cvelmed = (cR * omegaA);  
clmed = (128 * cR * Pi * cteSS * cteSS);
```

Funções para definir os argumentos das funções hiperbólicas e exponenciais das quanti-

dades de transporte.

```
vLH = ((cteγ * hbar) / (kB * tempC));
vargy[h_, t_] := vLH * h + 2 * Pi * vsig * (1 - t);

c3m = 0.9;
c4m = 0.9;
tRP[q_, temp_] :=
  5 * (1 + c3m * 2.5 * q * temp + c4m * (7.6 q^2 - 4.9 q^3) * (temp^2 / 90)) * 10^7.;
```

Função que define o Integrando do denominador para o livre caminho médio e também da velocidade média dos mágnons no YIG.

```
funIntegDenLCMVMed[camp_, temp_, t_] := Exp[(vsig * t) / (2 temp)] *
  ((ArcCos[t] * ArcCos[t]) / Sqrt[1 - t * t]) Csch[vargy[camp, temp] / (2 temp)];

intDenLCMVMed[camp_, temp_] :=
  NIntegrate[funIntegDenLCMVMed[camp, temp, y], {y, 0, 1}, PrecisionGoal → 10,
    AccuracyGoal → 6, Method → {"GlobalAdaptive", "MaxErrorIncreases" → 5000,
      Method → "GaussKronrodRule"}, MaxRecursion → 5000];
```

Ajuste do vetor de onda da primeira zona de Brillouin e da constante de exchange usando medidas de magnetização espontânea.

Dados experimentais da magnetização espontânea em função da temperatura

Dados de E. E. Anderson. Phys. Rev. 175, A1581 (1964).

```
datosmagnetizationYIG = {{3.13316`, 1}, {64.2298`, 0.982699`},
  {78.329`, 0.972318`}, {92.4282`, 0.961938`}, {104.961`, 0.951557`},
  {115.927`, 0.941176`}, {122.193`, 0.941176`}, {130.026`, 0.930796`},
  {144.125`, 0.920415`}, {158.225`, 0.903114`}, {164.491`, 0.892734`},
  {180.157`, 0.882353`}, {194.256`, 0.861592`}, {211.488`, 0.84083`},
  {228.721`, 0.816609`}, {256.919`, 0.775087`}, {269.452`, 0.754325`},
  {288.251`, 0.730104`}, {303.916`, 0.705882`}, {321.149`, 0.67474`},
  {339.948`, 0.640138`}, {352.48`, 0.622837`}, {363.446`, 0.598616`},
  {374.413`, 0.584775`}, {383.812`, 0.570934`}, {404.178`, 0.536332`},
  {419.843`, 0.512111`}, {433.943`, 0.477509`}, {441.775`, 0.460208`},
  {454.308`, 0.446367`}, {465.274`, 0.422145`}, {476.24`, 0.394464`},
  {484.073`, 0.373702`}, {498.172`, 0.349481`}, {512.272`, 0.314879`},
  {518.538`, 0.297578`}, {524.804`, 0.276817`}, {529.504`, 0.252595`},
  {538.903`, 0.214533`}, {543.603`, 0.179931`}, {549.869`, 0.141869`},
  {554.569`, 0.114187`}, {557.702`, 0.0415225`}, {559.269`, 0}};
```

Dados de P. Hansen, K. Witter and W. Tolksdorf. Phys Rev. B, 27, 6608, (1983).

```

datosmagnetizationYIG2 =
  {{0, 1.00332}, {8.09859, 1.00332}, {20.2465, 0.996678},
   {36.4437, 0.993355}, {48.5915, 0.990033}, {68.838, 0.983389},
   {89.0845, 0.9701}, {110.681, 0.956811}, {130.927, 0.936877},
   {149.824, 0.916944}, {170.07, 0.893688}, {188.967, 0.86711},
   {209.214, 0.840532}, {228.11, 0.813953}, {249.707, 0.787375},
   {269.953, 0.754153}, {288.85, 0.727575}, {309.096, 0.694352},
   {330.692, 0.66113}, {349.589, 0.631229}, {369.836, 0.598007},
   {388.732, 0.564784}, {408.979, 0.528239}, {429.225, 0.488372},
   {449.472, 0.448505}, {468.369, 0.405316}, {489.965, 0.362126},
   {510.211, 0.312292}, {529.108, 0.249169}, {541.256, 0.182724},
   {549.354, 0.122924}, {554.754, 0.0664452}, {557.453, 0.0000332226}};

```

Tratamento dos dados experimentais por meio dos modelos de ajuste da seção 6.2

```

datAYIG = Table[{(datosmagnetizationYIG[[k, 1]] / datosmagnetizationYIG[[42, 1]]),
  datosmagnetizationYIG[[k, 2]]},
  {k, 1, First@Dimensions[datosmagnetizationYIG]};

datAYIG2 = Table[{(datosmagnetizationYIG2[[k, 1]] /
  datosmagnetizationYIG2[[First@Dimensions[datosmagnetizationYIG2], 1]]),
  datosmagnetizationYIG2[[k, 2]]},
  {k, 1, First@Dimensions[datosmagnetizationYIG2]};

magnetizacionYIG =
  ListPlot[{datAYIG, datAYIG2}, Frame → True, Axes → False, AspectRatio → 1.,
    PlotStyle → {{PointSize[0.015], Red}, {PointSize[0.015], Blue}},
    FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
    FrameLabel → {Style["T/Tc", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
      Style["M(T)/M(0)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
    PlotLegends → {"E. E. Anderson. Phys. Rev. 175, A1581 (1964).",
      "P. Hansen, K. Witter and W. Tolksdorf.\n Phys
      Rev. B, 27, 6608, (1983)."}, ImageSize → Large];

Export["magnetizacionYIG.png", magnetizacionYIG];

Off[NIntegrate::zeroregion];
Off[NIntegrate::inumri];
Off[NIntegrate::inumr];
Off[FindRoot::nlnum];
Off[FindRoot::precw];
Off[FindRoot::lstol];

```

Métodos de otimização não linear para ajustar os dados usando os modelos da seção 6.2:

- 1.) NelderMead.
- 2.) DifferentialEvolution.
- 3.) SimulatedAnnealing.
- 4.) RandomSearch.

```

base = {1., t^e[1], t^e[2], t^e[3], t^e[4]};
coefmodel = {1., a[1], a[2], a[3], a[4]};
modelo = coefmodel.base;
modelFitYIG = FindFit[datAYIG,
  {modelo, {1. < e[1] < 1.5, 2. < e[2] < 2.5, 3. < e[3] < 3.5, 4. < e[4] < 4.5}},
  {a[1], a[2], a[3], a[4], e[1], e[2], e[3], e[4]}, {t},
  MaxIterations → 1000, Method → {"NMinimize", Method → "NelderMead"}];
modelofunYIG = Function[{t}, Evaluate[modelo /. modelFitYIG]];

modelofunYIG[t];

ajustePolinomial = Show[Plot[modelo /. modelFitYIG,
  {t, -0.01, 1.01}, PlotRange → {{0., 1.01}, {0., 1.01}},
  Frame → True, PlotStyle → {Thickness[0.005], Black},
  PlotLegends → {"Modelo de ajuste: Equação 6.6."}],
  ListPlot[datAYIG2, PlotRange → {{-0.01, 1.01}, {-0.01, 1.01}},
  Frame → True, PlotStyle → {PointSize[0.0175], Red},
  PlotLegends → {"E. E. Anderson. Phys. Rev. 175, A1581 (1964)."}],
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22],
  FrameLabel → {Style["T/Tc", Black, FontSize → 22,
    FontFamily → "Helvetica"], Style["M(T)/M(0)", Black, FontSize → 22,
    FontFamily → "Helvetica"]}, AspectRatio → 1., ImageSize → Large];

Export["ajustePolinomial.png", ajustePolinomial];

```

Ajustando el valor de σ dado un valor de τ

```

modelPolyYIG[t_] := 1. + 0.2974648646099118 t1.5 -
  5.376254477637134 t2.5 + 8.859911550828615 t3.5 - 4.678824911673392 t4.5;

fUMagAjuste[t_] := (ArcCos[t] * ArcCos[t]) / Sqrt[1 - t * t];
fDMagAjuste[σ_, τ_, t_] := Exp[(σ / τ) * (1 - t)] - 1;
intfMSAjuste[σ_, τ_, t_] := fUMagAjuste[t] / fDMagAjuste[σ, τ, t];

fMSAjuste[σ_, τ_] := 1 - (3.2071667977478535) *
  NIntegrate[intfMSAjuste[σ, τ, t], {t, 0, 1}, WorkingPrecision →
    $MachinePrecision, Method → "DoubleExponential", MaxRecursion → 100];

datSigma =
  Table[{τ, (σ /. FindRoot[(modelPolyYIG[τ] - fMSAjuste[σ, τ]) == 0, {σ, 0.5},
    WorkingPrecision → $MachinePrecision])}, {τ, 0.01, 1., 0.01}];

fcteSigma = ((kB * datosmagnetizationYIG[[44, 1]]) / (2.0 * cteZ * cteSS));
tc = datosmagnetizationYIG[[44, 1]];
jEffSigma[σ_] := umErgcm * fcteSigma * σ;

datjEffSigma = Table[{(tc * datSigma[[k, 1]]), jEffSigma[datSigma[[k, 2]]]},
  {k, 1, First@Dimensions@datSigma}];

jeffexchange = ListPlot[datjEffSigma, PlotRange → {{0., 560.}, {0., 25.}},
  PlotStyle → {PointSize[0.01], Red}, PlotRangeClipping → True,
  FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], AspectRatio → 1.,
  FrameLabel → {Style["T(K)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
    Style["Jeff (cm-1)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
  Axes → False, Frame → True, ImageSize → Large]

```

```

Export["jeffexchange.png", jeffexchange];
Export["datjEffSigma.dat", datjEffSigma, "Data"];

datfMSAjuste =
  Table[{(datosmagnetizationYIG[[42, 1]] * datSigma[[k, 1]]), fMSAjuste[
    datSigma[[k, 2]], datSigma[[k, 1]]}], {k, 1, First@Dimensions@datSigma}};

Show[Plot[modelPolyYIG[t / datosmagnetizationYIG[[42, 1]]],
  {t, 0., datosmagnetizationYIG[[42, 1]]}, PlotRange -> {{0., 560.}, {0., 1.015}},
  Frame -> True, PlotStyle -> {Thickness[0.005], Black}],
ListPlot[datosmagnetizationYIG, PlotRange -> {{0., 560.}, {0., 1.015}},
  PlotStyle -> {PointSize[0.02], Red},
  FrameTicksStyle -> Directive[Black, FontSize -> 22],
  Axes -> False, Frame -> True, ImageSize -> Large],
FrameTicksStyle -> Directive[Black, FontSize -> 18], AspectRatio -> 1.,
FrameLabel -> {Style["T/Tc", Black, FontSize -> 22, FontFamily -> "Helvetica"],
  Style["M(T)/M(0)", Black, FontSize -> 22, FontFamily -> "Helvetica"]},
PlotLabel -> Style["Ajuste com σ re-calculado", FontSize -> 18, Black],
ImageSize -> Large]

```

Ajustando los datos a la fuerza bruta

A continuación nuevamente vamos a ajustar la expresión de la magnetización espontánea relativa obtenida teóricamente pero esta vez usando los datos experimentales de **P. Hansen, K. Witter and W. Tolksdorf. Phys Rev B, 27, 6608, (1983)**. ahora nuestra expresión integral tiene la siguiente forma:

$$I(\tau) = 1 - \left(\frac{b}{2\pi^2} \right) \int_0^1 \frac{\text{ArcCos}^2(t)}{\sqrt{1-t^2}} \frac{dt}{e^{\sigma(1-t)/(\tau+\lambda)} - 1}, \quad (2)$$

$$b > 0, \sigma > 0, \lambda \rightarrow 0^+$$

```

modAjuste2 = 1 - (b / (2 * Pi * Pi)) * NIntegrate[
  intfMSAjuste[4 * Pi * β, τ, t], {t, 0, 1}, Method -> "DoubleExponential",
  MaxRecursion -> 100, PrecisionGoal -> 8, AccuracyGoal -> 4];

modelFitting2 = FindFit[datAYIG, {modAjuste2, {b > 0, β > 0}}, {b, β}, {τ},
  MaxIterations -> 1000, Method -> {"NMinimize", Method -> "NelderMead"}];
funFitting2 = Function[{τ}, Evaluate[modAjuste2 /. modelFitting2]];

ajusteMSuno = Show[
  Plot[funFitting2[τ], {τ, 0.001, 1.01}, PlotRange -> {{0., 1.025}, {0.0, 1.025}},
  AspectRatio -> 1., PlotRangeClipping -> True, Frame -> True,
  PlotStyle -> Red, PlotLegends -> {"Modelo de Ajuste: Equação 6.9."}],
ListPlot[datAYIG, AspectRatio -> 1., Frame -> True, PlotStyle -> {Black},
  PlotLegends -> {"E. E. Anderson Phys. Rev. 175. A1581 (1964)."}],
FrameLabel -> {Style["T/Tc", Black, FontSize -> 22, FontFamily -> "Helvetica"],
  Style["M(T)/M(0)", Black, FontSize -> 22, FontFamily -> "Helvetica"]},
FrameTicksStyle -> Directive[Black, FontSize -> 22], ImageSize -> Large]

Export["ajusteMSuno.png", ajusteMSuno];

```

Calor específico de mágnons em campos magnéticos muito intensos.

Funciones Básicas para definir el calor específico.

```

calEspM = 357.529775668473
(* Coeficiente de proporcionalidade da eq (6.17) *);
fCCEM1 = (calEspM / (10^3.25))
(* Factor de correção para  $C_v(T)$  no sistema SI (6.17) *);
fCCEM1A = (calEspM / (10^3.3525))
(* Factor de correção para  $C_v(T)$  no sistema SI (6.17) *);
fCCEM2 = (calEspM * 0.00065)
(* Factor de correção para  $C_{H_0}(T)$  no sistema SI (6.17) *);

datosExp3 = {{1.99135430606951`, 0.00108986022620636`},
  {2.42949343085999`, 0.00165756902257125`},
  {2.91353284491423`, 0.0019680347705833`}, {3.39757225896847`,
  0.00217205511927693`}, {4.44076065132675`, 0.00268654121598261`},
  {5.41301223300467`, 0.00371551340939399`}, {6.55217395745992`,
  0.00398162690769003`}, {8.00846495319207`, 0.00526784214945424`},
  {9.19769972048052`, 0.00691774583888972`}, {12.0143083798479`,
  0.00841685187929076`}, {14.0297483538841`, 0.00851442682866597`}};

(* Dados experimentais do calor especifico de magnos em
YIG usando campos muito intensos. *)

fargCosInv[t_] := (ArcCos[t] * ArcCos[t]) / Sqrt[1 - t * t];
fargCsch[h_, t_,  $\tau$ ] := Csch[vargy[h, t] / (2  $\tau$ )] * Csch[vargy[h, t] / (2  $\tau$ )] ;
integCS[h_, t_,  $\tau$ ] :=
  (1 /  $\tau^2$ ) * ((vargy[h, t] * vargy[h, t]) * fargCosInv[t] * fargCsch[h, t,  $\tau$ ])

intCS[h_,  $\tau$ ] := NIntegrate[integCS[h, t,  $\tau$ ], {t, 0, 1}, PrecisionGoal  $\rightarrow$  10,
  AccuracyGoal  $\rightarrow$  6, Method  $\rightarrow$  {"GlobalAdaptive", "MaxErrorIncreases"  $\rightarrow$  1000,
  Method  $\rightarrow$  "GaussKronrodRule"}, MaxRecursion  $\rightarrow$  5000];

```

Calor específico em função da temperatura

```

calorEspecificol =
  Table[{ $\tau$  * tempC, fCCEM1 * intCS[0.,  $\tau$ ]}, { $\tau$ , 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];
calorEspecifico2 = Table[{ $\tau$  * tempC, fCCEM1 * intCS[70 * umKilo,  $\tau$ ]},
  { $\tau$ , 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];
calorEspecifico3 = Table[{ $\tau$  * tempC, fCCEM1 *
  Abs[intCS[0.,  $\tau$ ] - intCS[70 * umKilo,  $\tau$ ]}, { $\tau$ , 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];
calorEspecifico4 = Table[{ $\tau$  * tempC, fCCEM1 * intCS[300 * umKilo,  $\tau$ ]},
  { $\tau$ , 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];

```



```

calorEspecificoYIG1 =
  Show[ListLinePlot[{calorEspecifico1, calorEspecifico2, calorEspecifico3},
    Frame → True, PlotRange → {{0., 20.}, {0., 0.06}}, PlotRangeClipping → True,
    PlotStyle → {{Blue, Thickness[0.005]}, {Red, Thickness[0.005]},
      {Black, Thickness[0.005]}}, ImageSize → Large, PlotLegends →
      {Style["H0 = 0 kOe", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
        Style["H0 = 70 kOe", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
        Style["Diferencia", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]}],
    ListPlot[{datosExp3}, Frame → True, PlotRange → {{0., 20.}, {0., 0.06}},
      PlotRangeClipping → True, PlotStyle → {{Blue, PointSize[0.02]}},
      PlotLegends → {Style["Dados Experimentais", Black,
        FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]}, ImageSize → Large],
    FrameLabel → {Style["T(K)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
      Style["Cv(J K-1 kg-1)", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"]},
    FrameTicksStyle → Directive[Black, FontSize → 22], AspectRatio → 1]

Export["calorEspecificoYIGTeorico1.dat", calorEspecifico1, "Data"];
Export["calorEspecificoYIGTeorico2.dat", calorEspecifico2, "Data"];
Export["calorEspecificoYIGTeoricoDiferencia.dat", calorEspecifico3, "Data"];

```

Calor específico para o intervalo de temperaturas $0 \leq T \leq 300 \text{ K}$

```

calorEspecifico1A =
  Table[{τ * tempC, fCCEM1A * intCS[0., τ]}, {τ, 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];
calorEspecifico2A = Table[{τ * tempC, fCCEM1A * intCS[70 * umKilo, τ]},
  {τ, 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];
calorEspecifico3A = Table[{τ * tempC, fCCEM1A * intCS[300 * umKilo, τ]},
  {τ, 0.0001, 1.0, 0.9999 / 500}];

ListLinePlot[{calorEspecifico1A, calorEspecifico2A, calorEspecifico3A},
  Frame → True, PlotRange → {{0., 300.}, {0., 0.80}}, PlotRangeClipping → True,
  PlotStyle → {{Blue, Thickness[0.005]}, {Red, Thickness[0.005]},
    {Black, Thickness[0.005]}}, ImageSize → Large, PlotLegends →
    {Style["H0 = 0 kOe", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
      Style["H0 = 70 kOe", Black, FontSize → 22, FontFamily → "Helvetica"],
      Style["H0 = 300 kOe", Black, FontSize → 22,
        FontFamily → "Helvetica"]}, AspectRatio → 1]

Export["calorEspecificoYIGTeorico1A.dat", calorEspecifico1A, "Data"];
Export["calorEspecificoYIGTeorico2A.dat", calorEspecifico2A, "Data"];
Export["calorEspecificoYIGTeorico3A.dat", calorEspecifico3A, "Data"];

```

Calor específico em função do campo magnético

```

Plot[{fCCEM2 * intCS[h, 10. / tempC], fCCEM2 * intCS[h, 8. / tempC],
  fCCEM2 * intCS[h, 3. / tempC]}, {h, 1., 300. * umKilo}, Frame → True,
  PlotStyle → {Red, Blue, Black}, Axes → False, PlotRange → {Full, {0., 0.03}},
  PlotRangeClipping → True, FrameTicksStyle → Directive[Black, 18],
  AspectRatio → 1, FrameTicks → {{Automatic, None},
    {Map[{#, SetAccuracy[#, umKilo, 3]} &, Range[1., 300. * umKilo,
      Abs[300. * umKilo - 1.] / 6]], None}}, ImageSize → Large]

```

```
calorEspecificoYIGenFuncionDeH0 = Table[
  {h, fCCEM2 * intCS[h * umKilo, 10. / tempC], fCCEM2 * intCS[h * umKilo, 8. / tempC],
    fCCEM2 * intCS[h * umKilo, 3. / tempC]}, {h, 1., 301., 3.}];

Export["calorEspecificoYIGenFuncionDeH0.dat",
  calorEspecificoYIGenFuncionDeH0, "Data"];
```

Funções básicas para calcular a velocidade média dos mágnons no YIG usando a equação 6.34

```
fargCosInv[t_] := (ArcCos[t] * ArcCos[t]) / Sqrt[1 - t * t];
fargCsch[h_, τ_, t_] := Csch[vargy[h, t] / (2 τ)];
integSup[h_, τ_, t_] :=
  Exp[(vsig * t) / (2 τ)] (ArcCos[t] * ArcCos[t]) * fargCsch[h, τ, t];
integInf[h_, τ_, t_] := Exp[(vsig * t) / (2 τ)] * fargCosInv[t] * fargCsch[h, τ, t];

intSup[h_, τ_] := NIntegrate[integSup[h, τ, t], {t, 0, 1}, PrecisionGoal → 8,
  AccuracyGoal → 4, Method → "DoubleExponential", MaxRecursion → 100];
intInf[h_, τ_] := NIntegrate[integInf[h, τ, t], {t, 0, 1}, PrecisionGoal → 8,
  AccuracyGoal → 4, Method → "DoubleExponential", MaxRecursion → 100];

velMedMAG[h_, τ_] := cvelmed * (intSup[h, τ] / intInf[h, τ]);

(* Block[{umKilo=10^3., hFMin=30., hFMax=330.,
  nptsHF=50, tempMin=1., tempMax=331., tempC=559.269, nptsTemp=50},
  xFHApp=umKilo*Range[hFMin, hFMax, Abs[(hFMax-hFMin)/nptsHF]];
  xTemp=Range[(tempMin/tempC), Abs[(tempMax-tempMin)/(nptsTemp*tempC)]];
  (* velMagTemricos={};
  AppendTo[velMagTemricos, tempC*xTemp];
  Do[
    AppendTo[velMagTemricos,
      Table[(velMedMAG[xFHApp[[i]], xTemp[[j]]]/100000.), {j, 1, Length@xTemp}]]
    , {i, 1, Length@xFHApp}];
  Export["velMagTemricos.dat", velMagTemricos, "Data"]; *)
  velMagTemrmic=Table[
    {xFHApp[[i]], tempC*xTemp[[j]], (velMedMAG[xFHApp[[i]], xTemp[[j]])/100000.)},
    {j, 1, Length@xTemp}, {i, 1, Length@xFHApp}];
  Export["velMagTemrmic.dat", Flatten[velMagTemrmic, 1], "Data"];
] *)

(*ListPlot3D[velMagTemricos, Frame→True] *)
(* ListPlot3D[Flatten[velMagTemrmic, 1],
  PlotRange→{{1, 3 10^5}, {1., 331.}, {0., 10.}}, Boxed→True,
  ColorFunction→"Rainbow", ImageSize→Large] *)
```

Ajuste polinomial da superfície τ_k^{-1}

coeficientes dos polinômios de ajuste

```

p00 = 0.0004461;
p10 = -0.02069 ;
p01 = -0.01506;
p20 = 0.187; p11 = 0.5411; p02 = 0.1016;
p30 = -0.5288 ;
p21 = -4.385 ;
p12 = -1.062;
p03 = -0.4702;
p40 = 0.5381;
p31 = 8.317;
p22 = 5.594;
p13 = 0.04205;
p04 = 1.127;
p50 = -0.1813;
p41 = -2.093;
p32 = 19.02;
p23 = -8.921;
p14 = 1.986;
p05 = -0.9898;

```

```

a00 = 0.0001335;
a10 = 0.009098;
a01 = -0.004316 ;
a20 = -0.1297;
a11 = 0.08563;
a02 = -0.01973;
a30 = 0.4401;
a21 = 0.12 ;
a12 = -0.3724 ;
a03 = 0.1707 ;
a40 = -0.5416 ;
a31 = -0.9746 ;
a22 = 0.5947;
a13 = 0.1835; a04 = -0.2874 ;
a50 = 0.2215;
a41 = 0.8056 ;
a32 = 0.5486;
a23 = -0.6898;
a14 = 0.253;
a05 = 0.1245 ;

```

```
b00 = 0.0004086 ;  
b10 = -0.008113 ;  
b01 = 0.005564 ;  
b20 = -0.01144 ;  
b11 = 0.117 ;  
b02 = -0.1182 ;  
b30 = 0.1568 ;  
b21 = -0.3311 ;  
b12 = -0.01576 ;  
b03 = 0.431 ;  
b40 = -0.2585 ;  
b31 = -0.1114 ;  
b22 = 0.7498 ;  
b13 = -0.8141 ;  
b04 = -0.5086 ;  
b50 = 0.1205 ;  
b41 = 0.3342 ;  
b32 = 0.0006451 ;  
b23 = -0.2049 ;  
b14 = 0.8594 ;  
b05 = 0.1507 ;  
  
c00 = 0.0007245 ;  
c10 = -0.02202 ;  
c01 = -0.0009084 ;  
c20 = 0.1477 ;  
c11 = 0.07045 ;  
c02 = -0.04938 ;  
c30 = -0.4 ;  
c21 = -0.0872 ;  
c12 = -0.2451 ;  
c03 = 0.3303 ;  
c40 = 0.4658 ;  
c31 = -0.04923 ;  
c22 = -0.02926 ;  
c13 = 0.4361 ;  
c04 = -0.7213 ;  
c50 = -0.1927 ;  
c41 = 0.04618 ;  
c32 = 0.676 ;  
c23 = -0.2824 ;  
c14 = -0.1511 ;  
c05 = 0.5062 ;
```

```

polyAjusPTR4M1[x_, y_] := p00 + p10 * x + p01 * y + p20 * x^2 + p11 * x * y +
  p02 * y^2 + p30 * x^3 + p21 * x^2 * y + p12 * x * y^2 + p03 * y^3 + p40 * x^4 +
  p31 * x^3 * y + p22 * x^2 * y^2 + p13 * x * y^3 + p04 * y^4 + p50 * x^5 +
  p41 * x^4 * y + p32 * x^3 * y^2 + p23 * x^2 * y^3 + p14 * x * y^4 + p05 * y^5 (**);
(**)
polyAjusPTR4M2[x_, y_] := a00 + a10 * x + a01 * y + a20 * x^2 + a11 * x * y +
  a02 * y^2 + a30 * x^3 + a21 * x^2 * y + a12 * x * y^2 + a03 * y^3 + a40 * x^4 +
  a31 * x^3 * y + a22 * x^2 * y^2 + a13 * x * y^3 + a04 * y^4 + a50 * x^5 +
  a41 * x^4 * y + a32 * x^3 * y^2 + a23 * x^2 * y^3 + a14 * x * y^4 + a05 * y^5 (**);
(**)
polyAjusPTR4M3[x_, y_] := b00 + b10 * x + b01 * y + b20 * x^2 + b11 * x * y +
  b02 * y^2 + b30 * x^3 + b21 * x^2 * y + b12 * x * y^2 + b03 * y^3 + b40 * x^4 +
  b31 * x^3 * y + b22 * x^2 * y^2 + b13 * x * y^3 + b04 * y^4 + b50 * x^5 +
  b41 * x^4 * y + b32 * x^3 * y^2 + b23 * x^2 * y^3 + b14 * x * y^4 + b05 * y^5;
(**)
polyAjusPTR4M4[x_, y_] := c00 + c10 * x + c01 * y + c20 * x^2 + c11 * x * y +
  c02 * y^2 + c30 * x^3 + c21 * x^2 * y + c12 * x * y^2 + c03 * y^3 + c40 * x^4 +
  c31 * x^3 * y + c22 * x^2 * y^2 + c13 * x * y^3 + c04 * y^4 + c50 * x^5 +
  c41 * x^4 * y + c32 * x^3 * y^2 + c23 * x^2 * y^3 + c14 * x * y^4 + c05 * y^5;

```

Conductividade Termica de Magnons em YIG em campos magneticos Intensos.

```

condtermexperimental = {{2.02464023956302`, 0.947194050033808`},
  {3.14804080915895`, 1.1606490872211`},
  {5.00470702250789`, 1.79580797836376`}, {6.0952046465508`,
  1.82704530087897`}, {8.12108600845812`, 2.21751183231914`},
  {10.0858619000527`, 2.73292765382015`}, {15.0589070993518`,
  2.6131845841785`}, {20.0836569273772`, 2.00926301555105`}};
(* Valores da condutividade termica experimental *)

```

Comparação da conductividade térmica de magnons em YIG experimental com o resultado teorico fornecido pela equação ().

```

(* Parâmetros relacionados com o coeficiente de
  proporcionalidade para a conductividade Térmica de Mágnons *)
cCTM = (1.4621165757401255 * 10^10.);
ca = 2.4027542006925123 * 10^-7;
cb = 0.122232491524185;
(* Fatores de conversão e ajuste *)
fcor1 = 10^-1.034567905;
fcor2 = 1.56787 * (10^-1.034567905);
fcorN1 = 1.5145 * 10^-0.8873125;
fcorN2 = 1.37645 * 10^-0.8055;
fcorN3 = 1.285 * 10^-0.77873125;
Funciones del inetgrando.
fargCH[h_, t_, x_] := (ca / t) * h + (0.5 * Pi * cb / t) * (1 - Cos[0.5 * Pi * x]);
fargCE[h_, x_] := (ca * h) + 0.5 * Pi * cb * (1 - Cos[0.5 * Pi * x]);
vmag[x_] := (1 - Cos[0.5 * Pi * x] * Cos[0.5 * Pi * x]);

```

```

integKM[h_, t_, x_] := ((x * x * vmag[x] * (fargCE[h, x] * fargCE[h, x]) *
  (Csch[0.5 * fargCH[h, t, x]] * Csch[0.5 * fargCH[h, t, x]])) / tRP[x, t]);
(**)
condTermic[h_, t_] := (cCTM / t^2.) *
  NIntegrate[integKM[h, t, x], {x, 0, 1}, PrecisionGoal → 12,
    AccuracyGoal → 8, Method → "DoubleExponential", MaxRecursion → 20]; (**)

nMax = 300; (* Numero de Pontos para subdividir o intervalo de temperatura *)
tpMax = 300.0; (* Temperatura Máxima. *)
tmin = (0.050 / tpMax);
tmax = (tpMax / tpMax);
tpas = ((tmax - tmin) / nMax);
vt = Range[tmin, tmax, tpas];

(*Cond Term *)

cTermic1 =
  Table[{vt[[i]] * tpMax, fcor1 * condTermic[70. * umKilo, vt[[i]]]}, {i, nMax + 1}];
cTermic2 = Table[{vt[[i]] * tpMax, fcor1 * condTermic[0., vt[[i]]]}, {i, nMax + 1}];
cTermic3 = Table[{vt[[i]] * tpMax, fcor2 * Abs@
  (condTermic[70 * umKilo, vt[[i]]] - condTermic[0., vt[[i]]])}, {i, nMax + 1}];

Export["cTermic1.dat", cTermic1, "Data"];
Export["cTermic2.dat", cTermic2, "Data"];
Export["cTermic3.dat", cTermic3, "Data"];

Show[ListLinePlot[{cTermic1, cTermic2, Abs@cTermic3}, Frame → True,
  PlotStyle → {Red, Blue, Black}, PlotRange → {{0., 21.}, {0., 20.}},
  PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large,
  PlotLegends → {"H = 0 kOe", "H = 70 kOe", "Diferencia"}],
ListPlot[condtermexperimental, Frame → True, PlotRange → {{0., 21.}, {0., 20.}},
  PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large,
  PlotStyle → {Orange, PointSize[0.025]}, PlotLegends → {"Dados"}],
FrameLabel → {Style["Temperatura", Black, FontSize → 22],
  Style["Condutividade Termica", Black, FontSize → 22]}, AspectRatio → 1]

```

Condutividade térmica de magnons em YIG para diferentes valores de campo magnético aplicado usando a equação ().

```

fargCHN[h_, t_, x_] := (ca / t) * h + (Pi * cb / t) * (1 - Cos[0.5 * Pi * x]);
fargCEN[h_, x_] := (ca * h) + Pi * cb * (1 - Cos[0.5 * Pi * x]);
vmagN[x_] := (1 - Cos[0.5 * Pi * x] * Cos[0.5 * Pi * x]);

integKMN[h_, t_, x_] := ((x * x * vmagN[x] * (fargCEN[h, x] * fargCEN[h, x]) *
  (Csch[0.5 * fargCHN[h, t, x]] * Csch[0.5 * fargCHN[h, t, x]])) / tRP[x, t]);
condTermicN[h_, t_] := (cCTM / t^2.) *
  NIntegrate[integKMN[h, t, x], {x, 0, 1}, PrecisionGoal → 12,
    AccuracyGoal → 10, Method → "DoubleExponential", MaxRecursion → 20];

```

```

cTermicN1 = Table[{vt[[i]] * tpMax,
  fcorN1 * Exp[-2.35 * vt[[i]]] * condTermicN[0., vt[[i]]]}, {i, nMax + 1}];
cTermicN2 = Table[{vt[[i]] * tpMax, fcorN2 * Exp[-1.9735 vt[[i]]] *
  condTermicN[70. * umKilo, vt[[i]]]}, {i, nMax + 1}];
cTermicN3 = Table[{vt[[i]] * tpMax, fcorN3 * Exp[-1.2015 vt[[i]]] *
  condTermicN[300. * umKilo, vt[[i]]]}, {i, nMax + 1}];

ListLinePlot[{cTermicN1, cTermicN2, cTermicN3}, Frame → True,
  PlotStyle → {Red, Blue, Black}, PlotRange → {{0., 300.}, {0., 32.}},
  PlotRangeClipping → True, ImageSize → Large,
  PlotLegends → {"H = 0 kOe", "H = 70 kOe", "H = 300 kOe"}, AspectRatio → 1]

Export["conductividaTermicaentre0e300kN1.dat", cTermicN1, "Data"];
Export["conductividaTermicaentre0e300kN2.dat", cTermicN2, "Data"];
Export["conductividaTermicaentre0e300kN3.dat", cTermicN3, "Data"];

```