

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Diego Conceição Carvalho

**Solução de problemas padrão por meio de simulação
micromagnética**

Juiz de Fora

2024

Diego Conceição Carvalho

Solução de problemas padrão por meio de simulação micromagnética

Dissertação apresentada ao Programa Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Juiz de Fora

2024

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Conceição Carvalho, Diego.

Solução de problemas padrão por meio de simulação micromagnética /
Diego Conceição Carvalho. – 2024.

109 f. : il.

Orientador: Pablo Zimmermann Coura

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto
de Ciências Exatas. Programa Pós-Graduação em Física, 2024.

1. Magnetização. 2. Simulação Micromagnética. 3. Vórtices. 4.
Skyrmions e Antiskyrmions. 5. Landau-Lifshitz-Gilbert
I. Zimmermann Coura, Pablo, orient. II. Título.

Diego Conceição Carvalho

Solução de problemas padrão por meio de simulação micromagnética

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física.

Aprovada em 25 de setembro de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Vagson Luiz de Carvalho Santos

Universidade Federal de Viçosa

Prof. Dr. Sócrates de Oliveira Dantas

Universidade Federal de Juiz de Fora

Juiz de Fora, 05/09/2024.



Documento assinado eletronicamente por **Pablo Zimmermann Coura, Membro**, em 25/09/2024, às 16:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vagson Luiz de Carvalho Santos, Usuário Externo**, em 25/09/2024, às 16:59, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Socrates de Oliveira Dantas, Professor(a)**, em 26/09/2024, às 12:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1967762** e o código CRC **27FE8AA5**.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Adalberto de França e Rocilda do Carmo por todo apoio dado a mim no início e durante esta jornada em uma cidade totalmente desconhecida. À minha namorada Cecília Sávia por estar comigo em todo este tempo e aos meus velhos amigos de graduação.

Ao meu orientador Pablo Zimmermann Coura por sua excepcional orientação e didática; à todo o quadro de professores da UFJF, em especial ao professor Fernando Sato, sempre muito prestativo às minhas questões tanto em relação aos *clusters* quanto aos ensinamentos de Fortran 90.

Agradeço também a todo o quadro de funcionários gerais da universidade, incluindo zeladores, cozinheiras do RU, motoristas dos circulares, seguranças e técnicos administrativos, especialmente ao já aposentado Domingos e ao atual Gustavo.

Ao meu grupo de pesquisa, colegas e amigos pessoais que fiz durante esses 2 anos de convivência. Antônio Kaeliton, Rodrigo Leal, André Lucas, Yuri Sonco, Henrique Santiago, Alexandro de Oliveira, Allan Corrêa, Jhonnes Toledo, Isaac Santece, Lucas Brugger, Mateus Couto, Marlon Modesto, Benny Guedes e aos elos femininos de nosso grupo Andrezza Áreas, Anna Luiza e, em especial, Ana Lídia Miranda. Muito obrigado a todos vocês.

Por fim, deixo um agradecimento à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de estudos, ao laboratório de Física Computacional por fornecer as máquinas que usei para realizar minhas simulações e à UFJF pelo apoio financeiro em eventos dos quais participei.

“Em algum lugar, alguma coisa incrível está esperando para ser descoberta.”

(CARL SAGAN)

RESUMO

Até o uso prático do magnetismo em escala industrial, como aplicado em nossos dispositivos eletrônicos, é essencial conhecer ou prever o comportamento das propriedades e grandezas magnéticas. Nesse contexto, a simulação micromagnética se apresenta como uma ferramenta indispensável nesse processo de pesquisa, que posteriormente será meticolosamente validada e aprimorada por meio de técnicas laboratoriais. Para contribuir com o arcabouço teórico no campo da pesquisa em micromagnetismo, nosso grupo, denominado Grupo de Física da Matéria Condensada (GFMC), com foco em simulação micromagnética, tem se dedicado há pelo menos meia década à escrita e ao constante aprimoramento de nosso próprio *software* escrito em linguagem de programação Fortran 90 para analisar a evolução temporal da magnetização em sistemas discretizados. Esses sistemas podem ser unidimensionais (nanofios), bidimensionais (nanofitas planas ou curvas) ou tridimensionais (bulks). Atualmente, o programa já inclui interações de troca, anisotropia, campo externo, interação Dzyaloshinskii-Moriya e interação dipolar, o que o torna altamente competitivo em comparação a simuladores bem estabelecidos que utilizam o campo desmagnetizante, além de já ser capaz de trabalhar com correntes spin-polarizadas. A principal proposta deste trabalho é resolver os chamados problemas-padrão em micromagnetismo para validar o *software* e dar-lhe mais credibilidade em novas pesquisas neste campo. Estamos dedicados a estudar a influência de uma corrente spin-polarizada em vórtices magnéticos em cuboides de Permalloy-79, bem como investigar os casos estáticos de skyrmions e antiskyrmions em sistemas uni, bi e tridimensionais. Nossos resultados mostraram grande concordância com os valores esperados, o que indica que tanto o método de discretização; o tratamento por interação dipolar como alternativa ao campo desmagnetizante e a resolução numérica da equação de movimento que governa o micromagnetismo (Landau-Lifshitz-Gilbert) estão sendo corretamente implementados.

Palavras-chave: Magnetização; Simulação Micromagnética; Vórtices; Skyrmions e Antiskyrmions; Landau-Lifshitz-Gilbert.

ABSTRACT

Until the practical use of magnetism on an industrial scale, as applied in our electronic devices, it is essential to know or predict the behavior of magnetic properties and quantities. In this context, micromagnetic simulation presents itself as an indispensable tool in this research process, which will later be meticulously validated and improved through laboratory techniques. To contribute to the theoretical framework in the field of micromagnetism research, our group, called the Condensed Matter Physics Group (CMPG), with a focus on micromagnetic simulation, has been dedicated for at least half a decade to the writing and constant improvement of our own software written in Fortran 90 programming language to analyze the temporal evolution of magnetization in discretized systems. These systems can be one-dimensional (nanowires), two-dimensional (planar or curved nanoribbons), or three-dimensional (bulks). Currently, the program already includes exchange interactions, anisotropy, external field, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, and dipolar interaction, which makes it highly competitive compared to well-established simulators that use the demagnetizing field, in addition to already being capable of working with spin-polarized currents. The main proposal of this work is to solve the so-called standard-problems in micromagnetism to validate the software and give it more credibility in new research in this field. We are dedicated to studying the influence of a spin-polarized current on magnetic vortices in Permalloy-79 cuboids, as well as investigating the static cases of skyrmions and antiskyrmions in one-, two-, and three-dimensional systems. Our results have shown great agreement with the expected values, which indicates that both the discretization method; the treatment by dipolar interaction as an alternative to the demagnetizing field and the numerical resolution of the equation of motion governing micromagnetism (Landau-Lifshitz-Gilbert) are being correctly implemented.

Keywords: Magnetization; Micromagnetic Simulation; Vortices; Skyrmions and Antiskyrmions; Landau-Lifshitz-Gilbert.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1 – Escalas típicas de objetos tecnológicos e seres biológicos em nosso cotidiano. Saímos desde a escala dos milímetros, onde encontram-se os microarranjos de DNA, até seu limite onde temos o fio de cabelo humano e vamos até a escala menor que um nanômetro, onde concentram-se as dimensões típicas de átomos.	17
Figura 1.2 – Diagrama que representa o armazenamento e leitura de dados em uma superfícies magnética. Os retângulos menores representam as microrregiões magnéticas. Entre uma microrregião e outra onde os entes magnéticos estão alinhados, precisamos inverter o campo magnético nas bordas.	18
Figura 1.3 – Representação esquemática de um vórtice magnético a esquerda de (a) e imagem de microscopia, a direita de (a). Em (b) está evidenciado <i>switching</i> elétrico no núcleo do vórtice, ou seja, o mecanismo de inversão do alinhamento dos entes magnéticos.	20
Figura 1.4 – Imagem esquemática de uma pista de corrida <i>skyrmion-antiskyrmion</i> . As informações são codificadas no tipo de partícula magnética, ou seja, um <i>skyrmion</i> representa o <i>bit</i> “1” e um <i>antiskyrmion</i> representa o <i>bit</i> “0”. Ao aplicar uma corrente, as partículas magnéticas podem ser movidas em direção a uma cabeça de leitura/gravação.	20
Figura 2.1 – Representação clássica da órbita de Bohr de um elétron ao redor de seu núcleo. O vetor momento angular \vec{L} surge a partir do movimento em si, enquanto o vetor momento de dipolo magnético \vec{m}_L surge devido a carga elétrica circundante na área orientada \vec{A} que compreende a órbita.	23
Figura 2.2 – Interação spin-órbita entre os momentos angulares \mathbf{L} e \mathbf{S}	25
Figura 2.3 – Cilindro imantando, sendo em (a), a representação correntes de Ampère em um material magnético e em (b), a corrente superficial no cilindro.	26
Figura 2.4 – Material diamagnético. O vetor \vec{m} indica o sentido dos momentos de dipolo magnético como resposta a um campo externo aplicado ao qual amostra está sujeita.	28
Figura 2.5 – Material paramagnético. O vetor \vec{m} indica o sentido dos momentos de dipolo magnético como resposta a um campo externo aplicado ao qual amostra está sujeita.	29
Figura 2.6 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material ferromagnético.	30
Figura 2.7 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material ferrimagnético.	30
Figura 2.8 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material antiferromagnético abaixo da temperatura de Néel T_N	31

Figura 2.9 – Representação da interação de troca em uma rede com N spins. Em destaque temos a representação da interação de um único spin (em vermelho) interagindo unicamente com seus vizinhos (em azul).	31
Figura 2.10 – Na figura (a) temos a representação de uma rede de <i>spins</i> onde todos interagem entre si. Uma configuração inicial qualquer onde há apenas dois <i>spins</i> interagindo pode ser vista na figura (b), sendo o estado de mínima energia alcançado na figura (c). O vetor \vec{r}_{ij} denota a distância relativa entre \vec{m}_i e \vec{m}_j	33
Figura 2.11 – Regras de Moriya para sistema com interação DM. As siglas CI, PR e ER significam Centro de Inversão, Plano de Reflexão e Eixo de Rotação, respectivamente. As linhas em azul que ligam os íons magnéticos (representados em rosa) indicam o caminho AB, e o ponto C é o ponto ao qual nos baseamos para determinar tais regras.	35
Figura 2.12 – Orientação do vetor DM a partir da organização de <i>spins</i> vizinhos. Em (a) temos um espiral de rotação no sentido horário (Néel tail-to-tail) e em (b) no anti-horário (Néel head-to-head).	37
Figura 2.13 – Representação de dois íons magnéticos presentes em uma interface de Cobalto/Platina (referente ao caso (b) da Fig. (2.11)). O versor normal \hat{n} é um vetor unitário que sai do metal pesado em direção ao material ferromagnético, estando associado à direção de z e o vetor \mathbf{r}_{ij} leva em conta as posições dos dois íons magnéticos da Platina em relação a um átomo de Cobalto.	38
Figura 2.14 – Campo desmagnetizante no interior de uma amostra magnética finita na presença de um campo magnético externo.	41
Figura 2.15 – Ilustração para um sistema do tipo válvula de <i>spin</i> . Em (a) tem-se os dois ferromagnetos com a mesma orientação da magnetização, conferindo uma baixa resistência elétrica; em (b), orientações contrárias de magnetização conferem uma alta resistência elétrica para a corrente polarizada em <i>spins up</i>	42
Figura 2.16 – Em (a), uma representação de <i>skyrmion</i> do tipo Néel, onde a mudança na direção da magnetização ocorre somente em um plano; em (b), uma representação de <i>skyrmion</i> do tipo Bloch, onde a direção da magnetização ocorre em todo o espaço. O raio do <i>skyrmion</i> (r_{sk}) correspondente é definido como a distância entre o centro da estrutura até a faixa onde os momentos magnéticos não possuem projeção na direção \hat{z} , sendo representados pela cor verde escuro.	44
Figura 2.17 – Em (a), as coordenadas esféricas para o vetor momento magnético e em (b) a representação para um <i>skyrmion</i> tipo Bloch, com $Q = 1$, $\nu = 1$ e $\Theta = \pi/2$	45

Figura 2.18 – <i>Skyrmions</i> em sistemas tipo <i>bulk</i> , sendo em (a) a modulação cônica quiral de m_r e em (b) as vistas superior e inferior da amostra. Em (c) m_r para as superfícies e centro da amostra.	46
Figura 2.19 – Vista superior de estruturas de <i>skyrmions</i> e <i>antiskyrmions</i> . Em (a), as configurações iniciais com a cor preta indicando $m_z = -1$ e em (b), as estruturas já estabilizadas a partir dos estados iniciais, onde a faixa escura representa r_{sk}	47
Figura 2.20 – Domínios magnéticos em uma amostra de ferro (Fe). As cores adotadas apenas representam as direções de magnetização.	48
Figura 2.21 – Configurações de domínios magnéticos em um nanodisco. Na primeira ilustração a esquerda temos uma estrutura multidomínios. No centro, um estado intermediário, conhecido como vórtice magnético. Mais a direita, uma estrutura multidomínio. O valor do diâmetro corresponde aos valores críticos onde tais configurações são mais estáveis energeticamente. . .	49
Figura 2.22 – Vista lateral de uma das camadas do cuboide de Permalloy-79. Observamos uma tendência dos momentos magnéticos se alinharem na direção fora do plano no centro do vórtice. Isto é um efeito natural do sistema que busca minimizar a energia local.	49
Figura 2.23 – As quatro combinações possíveis a partir dos valores de polaridade e quiralidade. Nas figuras (a) e (b) temos uma diferença quanto ao sentido de rotação (quiralidade) e nas figuras (c) e (d), quanto ao sentido dos momentos magnéticos no núcleo do vórtice (polaridade), representado pela seta em cinza.	50
Figura 3.1 – Em (a), temos o caso de sistema não-amortecido ($\alpha = 0$); em (b), um ilustração de um sistema amortecido, ($\alpha > 0$).	52
Figura 3.2 – Em (a) temos a representação de um sistema magnético real, com vários momentos por célula, já em (b) temos uma média desses momentos magnéticos.	53
Figura 4.1 – Nanofio com movimentação dos momentos magnéticos restrita ao plano x - z , correspondendo ao caso interfacial. Na subfigura (a) temos o estado inicial e em (b) o sistema já relaxado ao equilíbrio, estado ao qual buscamos determinar o ângulo de inclinação dos momentos magnéticos dispostos nas bordas, ou seja, em $\pm L/2$	65
Figura 4.2 – Nanofio com movimentação dos momentos magnéticos em todo o espaço 3D, correspondendo ao caso do tipo <i>bulk</i> . Na subfigura (a) temos o estado inicial e em (b) o sistema já relaxado ao equilíbrio, estado ao qual buscamos determinar o ângulo de inclinação dos momentos magnéticos dispostos nas bordas, ou seja, em $\pm L/2$	66

Figura 4.3	– Componentes de \hat{m}_i ao longo do eixo x para um sistema tipo Néel (a) e do tipo Bloch (b) no estado relaxado. Em ambos os gráficos estão unificadas as informações dos dois materiais utilizados na simulação e índice i sobre o vetor \mathbf{m} pode indicar x, y e z . A linha tracejada em vermelho marcam as bordas do sistema em $\pm L/2$, com $L = 100$ nm.	69
Figura 4.4	– Definição do raio do <i>skyrmion</i> (r_{sk}) no estado relaxado para os três tipos de estruturas abordadas (<i>skyrmions</i> tipo Néel e Bloch e <i>antiskyrmions</i>). Os pontos de intersecção das linhas tracejadas indicam o raio do <i>skyrmion</i> , que é definido no ponto onde $\hat{m}_z = 0$. Simetricamente, temos a mesma informação de raios, portanto, fizemos essa consideração fixando a dimensão y	72
Figura 4.5	– Perfil da componente m_r do momento magnético no raio do <i>skyrmion</i> . As linhas tracejadas em preto apenas marcam pontos de 90 graus no gráfico.	73
Figura 4.6	– <i>Skyrmion</i> do tipo Néel <i>head-to-head</i> com $\nu = 1$, $\lambda = 0$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	74
Figura 4.7	– <i>Skyrmion</i> do tipo Néel <i>tail-to-tail</i> com $\nu = 1$, $\lambda = \pi$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	75
Figura 4.8	– <i>Skyrmion</i> do tipo Bloch com $\nu = 1$, $\lambda = -\pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	76
Figura 4.9	– <i>Skyrmion</i> do tipo Bloch com $\nu = 1$, $\lambda = \pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	77
Figura 4.10	– <i>Antiskyrmion</i> com $\nu = -1$, $\lambda = 0$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	78
Figura 4.11	– <i>Antiskyrmion</i> com $\nu = -1$, $\lambda = \pi$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	79
Figura 4.12	– <i>Antiskyrmion</i> com $\nu = -1$, $\lambda = -\pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	80
Figura 4.13	– <i>Antiskyrmion</i> com $\nu = -1$, $\lambda = \pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.	81
Figura 4.14	– Modulação de <i>skyrmions</i> ao longo da espessura da amostra. Em (a) um sistema de <i>skyrmions</i> confinados em um cilindro de FeGe e em (b), a modulação de <i>skyrmions</i> em bicamadas antiferromagnéticas.	82
Figura 4.15	– À esquerda, o <i>bulk</i> de FeGe completo em seu estado inicial. À direita, o sistema de coordenadas esféricas para dois <i>spins</i> isoladamente.	83
Figura 4.16	– Fixamos a direção y em 0 e analisamos algumas fatias de z . Em (a), temos a base inferior e em (b) a base superior. Observamos em preto que a componente radial tem seu máximo próximo a região onde m_z é 0. O comportamento invertido de m_r também é observado. A linha tracejada em azul indica o ponto em x onde encontramos o raio do <i>skyrmion</i> , sendo definida no ponto onde a componente $m_z \approx 0$ ou exatamente nula. O índice i indica as componentes r , ϕ e z	84

Figura 4.17 – Comportamento das componentes da magnetização em termos de coordenadas esféricas para o centro simétrico da amostra de FeGe. Destacamos o gráfico em preto, , que representa m_r , onde o vemos nulo em toda a extensão do cilindro, assim como espera-se na teoria.	85
Figura 4.18 – Superfície inferior do <i>bulk</i> vista de cima do centro do <i>skyrmion</i> até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.	86
Figura 4.19 – Superfície superior do <i>bulk</i> vista de cima do centro do <i>skyrmion</i> até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.	87
Figura 4.20 – Superfície localizada no centro simétrico em $z=11$ vista de cima do centro do <i>skyrmion</i> até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.	88
Figura 4.21 – <i>Skyrmions</i> em sistemas do tipo <i>bulk</i> , com o centro escuro indicando o alinhamento dos momentos magnéticos em $-z$ e a componente m_r evoluindo da base inferior para a superior da amostra.	89
Figura 4.22 – Estado inicial global do cuboide de Permalloy-79 sem aplicação ação das interações de troca e dipolar. Os momentos de dipolo magnético estão organizados de maneira a propiciar a formação de um vórtice após agirem as devidas interações no estado posterior. A figura mostra apenas um “recorte” do cuboide, com limites entre $-15a$ e $+15a$, passando pela célula localizada no ponto 0.	91
Figura 4.23 – Mínimo de energia local para o cuboide de Permalloy-79. Neste estado, já houve ação das interações de troca e dipolar, ou seja, já rodamos os duzentos mil passos na LLG.	92
Figura 4.24 – Posição final do vórtice magnético no cuboide de Permalloy-79 no estado de mínimo de energia global. O círculo em azul envolve o vórtice magnético no ponto do deslocamento líquido do vórtice nas direções x e y	93
Figura 4.25 – A linha em azul representa a trajetória do centro do vórtice magnético quando este é submetido a ação de uma corrente spin-polarizada na direção \hat{x} . As linhas tracejadas no ponto (0,0) marcam o ponto inicial do vórtice e o outro conjunto de linhas marcam o ponto final do vórtice no estado já relaxado.	94
Figura 4.26 – Média da componente da magnetização x (a) e y (b) no intervalo 4,5 – 6,5 s para diferentes valores de \mathbf{j} e ξ	96
Figura 4.27 – Média das componentes da magnetização x (a) e y (b) para o tempo de simulação de 9 ns. O ponto destacado pela intersecção das retas pontilhadas em vermelho evidencia o máximo valor obtido da magnetização, que para (a) ocorreu em 0,66 ns, com o valor de $\langle \mathbf{M}_x \rangle = 288,54$ kA/m e no tempo 0,33 ns para (b), com o valor de $\langle \mathbf{M}_y \rangle = 162,13$ kA/m.	97

Figura 4.28 – Os gráficos representam a diferença entre a componente x (em vermelho) e y (em azul) do $set_{(3)}$ em relação ao set $set_{(0)}$ 98

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Parâmetros magnéticos utilizados pelos autores supracitados. Os valores explicitados na segunda coluna são correspondentes ao material artificial, já a terceira coluna referem-se à amostra de Pt/Co/AlOx.	64
Tabela 4.2 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material Pt/Co/AlOx para $a = 1$ nm.	68
Tabela 4.3 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material artificial.	68
Tabela 4.4 – Erros percentuais obtidos a partir dos valores das componentes x , y e z da magnetização em unidades reduzidas para ambos os materiais utilizados tanto no caso interfacial quanto no <i>bulk</i>	70
Tabela 4.5 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material Pt/Co/AlOx para $a = 0,1$ nm.	71
Tabela 4.6 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material artificial para $a = 0,1$ nm.	71
Tabela 4.7 – Parâmetros magnéticos para um <i>bulk</i> de FeGe.	83
Tabela 4.8 – Parâmetros magnéticos e de simulação utilizados em um cuboide de Permalloy-79. Apenas os valores de \mathcal{A}_{ex} e \mathcal{M}_s são do material utilizado, os demais valores se referem a fatores externos, como intensidade da corrente superficial na direção \hat{x} (j_x), assim como sua polaridade (P), grau de não adiabaticidade (ξ) e o amortecimento de Gilbert (α). A partir desses parâmetros obtemos $\ell_{ex} \approx 5,7$ nm.	90
Tabela 4.9 – Média das magnetizações M_x e M_y no estado relaxado obtidas por diferentes autores a partir de diferentes ferramentas de simulação micromagnética no tempo $t = 14$ ns. Todos estes valores foram obtidos a partir de \mathbf{j} e ξ sem os incrementos de 5%.	99

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

GFMC	Grupo de Física da Matéria Condensada
HD's	Hard Disk Drives
PC's	Personal Computers
SI	Sistema Internacional
MRAM's	Magneto-resistive Random Access Memorys
GMR	Magnetorresistência Gigante
STT	Spin Transfer Torque
SOC	Spin-Orbit Coupling
LLG	Landau-Lifshitz-Gilbert
RK1	Runge-Kutta de Primeira Ordem
DM	Dzyaloshinskii-Moriya
PR	Plano de Reflexão
ER	Eixo de Rotação
CS	Centro de Simetria
CEPP	Corrente Elétrica Perpendicular ao Plano
PD	Paredes de Domínio
PDV's	Paredes de Domínio do Tipo Vórtice
PDT's	Paredes de Domínio Transversais
PDTA's	Paredes de Domínio Transversais Assimétricas
MFM	Microscopia de Força Magnética
T_c	Temperatura de Curie
T_N	Temperatura de Néel
Cu	Cobre
Ag	Prata
Au	Ouro
Al	Alumínio
Ba	Bário
Fe	Ferro
Pt	Platina
Co	Cobalto
Fe	Ferro
FeO	Óxido de Ferro
CoO	Óxido de Cobalto
Co/Pt	Cobalto/Platina
Pt/Co/AlO _x	Platina/Cobalto/Óxido de Alumínio
Ni ₈₁ Fe ₁₉	Permalloy-79
Fe ₃ O ₄	Magnetita

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	PROPRIEDADES DOS MATERIAIS MAGNÉTICOS	23
2.1.1	Momento de dipolo magnético	23
2.1.2	Correntes de Magnetização	26
2.1.3	Susceptibilidade magnética e classificação de materiais	28
2.1.3.1	Materiais magnéticos lineares: diamagnéticos e paramagnéticos	28
2.1.3.2	Magnetismo coletivo: ferromagnéticos, ferrimagnéticos e antiferromagnéticos	29
2.2	INTERAÇÕES MAGNÉTICAS	31
2.2.1	Interação de troca (<i>exchange</i>)	31
2.2.2	Interação dipolar	33
2.2.3	Interação de Dzyaloshinskii-Moriya	34
2.2.4	Interação de Zeeman	38
2.2.5	Interações anisotrópicas	39
2.2.5.1	Anisotropia magnetocristalina	40
2.2.5.2	Anisotropia de forma	40
2.3	CORRENTE ELÉTRICA POLARIZADA EM SPIN	42
2.4	<i>SKYRMIONS</i> E <i>ANTISKYRMIONS</i>	44
2.5	VÓRTICES MAGNÉTICOS	48
3	METODOLOGIA	51
3.1	DINÂMICA DE SPINS: EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT	51
3.2	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	53
3.3	LLG ADICIONADA DO TERMO DE CORRENTE POLARIZADA EM <i>SPIN</i>	55
3.4	HAMILTONIANAS MICROMAGNÉTICAS	57
3.5	CAMPO EFETIVO LOCAL	58
3.5.1	Hamiltoniana e Campo Efetivo com interação de Dzyaloshinskii-Moriya	61
3.5.2	Hamiltoniana e Campo Efetivo do problema-padrão #5 com corrente polarizada em <i>spin</i>	61
3.6	INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DA LLG MICROMAGNÉTICA	62
3.6.1	Método de Euler (Runge-Kutta de 1 ^a ordem)	63
3.6.2	Método de Adams-Bashforth (preditor)	63
4	RESULTADOS	64
4.1	ESTUDO ESTÁTICO DE <i>SKYRMIONS</i> E <i>ANTISKYRMIONS</i>	64

4.1.1	Caso unidimensional: inclinação da borda	64
4.1.1.1	Averiguação dos desvios entre os valores teóricos esperados e os obtidos via simulação	70
4.1.2	Caso bidimensional: perfil de magnetização de um <i>skyrmion</i> .	71
4.1.3	Caso tridimensional: modulação <i>skyrmion</i> ao longo da espessura	82
4.2	ESTUDO DINÂMICO DE VÓRTICES EM MATERIAIS ISOTRÓPICOS COM APLICAÇÃO DE CORRENTE POLARIZADA EM SPIN	90
4.2.1	Condições iniciais: análise do sistema magnético sem aplicação de corrente	91
4.2.2	Dinâmica: aplicação de corrente a partir do passo anterior . . .	93
4.2.3	Influência da mudança de parâmetros magnéticos na dinâmica do vórtice	95
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	100
	REFERÊNCIAS	102
	APÊNDICE A - Conservação do módulo do momento de dipolo magnético na LLG	108
	APÊNDICE B - Demonstração da forma explícita da LLG . .	109

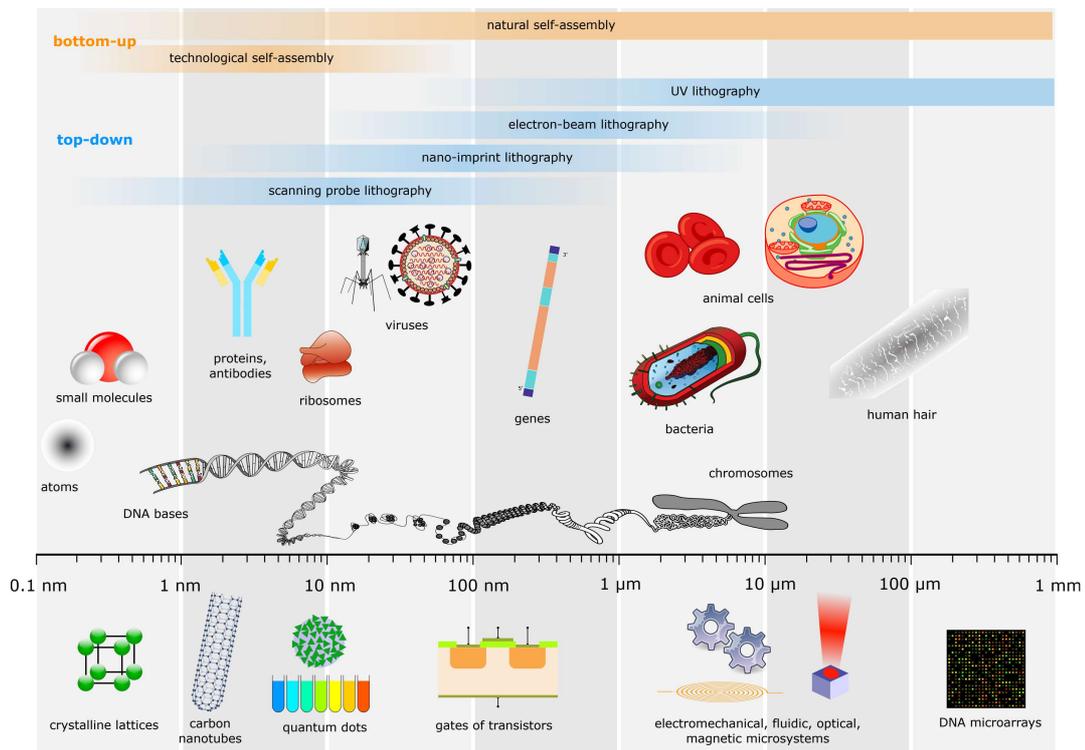
Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A busca por dispositivos cada vez menores, mais rápidos, compactos e eficientes energeticamente garantiram um notório avanço científico e tecnológico nos mais diversos setores de aplicação, como a Medicina, Indústria Aeroespacial, Eletrônica, Spintrônica, entre outras, sendo estes avanços creditados à nanociência e nanotecnologia. Essas duas grandes áreas viabilizaram a produção de dispositivos em escala atômica, cujo comprimento de uma típica ligação entre átomos de carbono está entre 0,12 – 0,15 nm [1].

Na Fig. (1.1) a seguir vemos os níveis de escalas de alguns seres biológicos e outros objetos tecnológicos que temos presentes em nosso cotidiano.

Figura 1.1 – Escalas típicas de objetos tecnológicos e seres biológicos em nosso cotidiano. Saímos desde a escala dos milímetros, onde encontram-se os microarranjos de DNA, até seu limite onde temos o fio de cabelo humano e vamos até a escala menor que um nanômetro, onde concentram-se as dimensões típicas de átomos.



Fonte: Imagem retirada da Wikipédia [2].

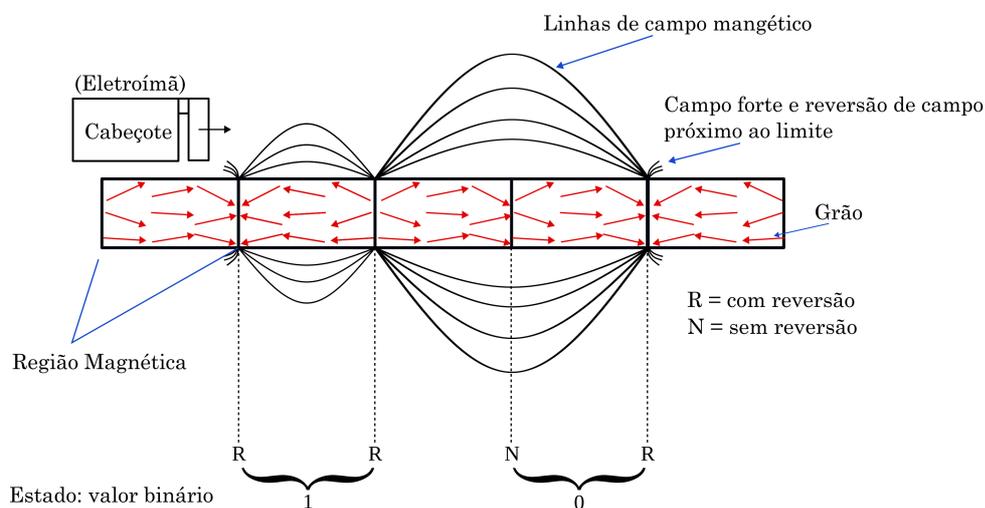
Toda a informação armazenada em mídias digitais e também todos os nossos dispositivos eletrônicos como PC's (*Personal Computers*), celulares, *tablets* aos quais hoje temos acesso têm seu funcionamento principal baseado a partir dos chamados “*bits*”, que são a informação mais básica em computação e em comunicações digitais. Os chamados *bits* podem assumir apenas dois únicos valores, 1 ou 0. As combinações e sequências destes

dois valores podem formar todos os números (a partir de operações binárias), palavras e símbolos conhecidos (a partir da tabela ASCII), possibilitando assim que interpretemos esta linguagem universal das máquinas em nossa linguagem humana.

No que tange ao funcionamento de circuitos digitais, os *bits* são representados a partir de estados de tensão elétrica, onde um nível de alta tensão pode representar 1 (ligado) já um nível de baixa tensão pode representar 0 (desligado). Nesse tipo de circuito, temos a interconexão de transistores, que são utilizados em pequenas escalas, dando origem ao que conhecemos como circuitos integrados. A partir desses dispositivos, podemos também criar portas lógicas que são a base da lógica *booleana*: AND, NAND, OR, NOR, XOR e NOT [3].

A respeito do armazenamento de mídias digitais, como no caso dos *Hard Disk Drives* (HD's) e mais recentemente das *Magneto-resistive Random Access Memorys* (MRAM's), a informação de estados do *bits* é atribuída aos sentidos do vetor de magnetização na região dos domínios magnéticos que compõem estes dispositivos de memória não-voláteis que são constituídos de peças aproximadamente bidimensionais. Vejamos a seguir na Fig. (1.2) como se dá o funcionamento de um HD.

Figura 1.2 – Diagrama que representa o armazenamento e leitura de dados em uma superfície magnética. Os retângulos menores representam as microrregiões magnéticas. Entre uma microrregião e outra onde os entes magnéticos estão alinhados, precisamos inverter o campo magnético nas bordas.



Fonte: Adaptado de New World Encyclopedia [4].

O crescente avanço da miniaturização e a necessidade constante de armazenar mais dados em menos espaço físico foram pontos-chave para sairmos de aparelhos que antes tinham o tamanho de uma geladeira e eram constituídos de dezenas de discos com 24 polegadas de diâmetro (60 cm) como é o caso do IBM 305 RAMAK Disk System, construído no ano de 1956 e com 5 MB de capacidade, e chegarmos até hoje, onde existem HD's com capacidades de dezenas de Terabytes em discos de 2,5 a 3,5 polegadas [5].

Novamente no que tange as aplicações práticas do controle da magnetização no armazenamento de dados digitais, o fenômeno da Magnetorresistência Gigante (GMR) descoberto em 1988 de forma independente por Albert Fert e Peter Grunberg ocorre em dispositivos multicamadas (filmes finos) em que a orientação da magnetização em cada uma dessas camadas influencia no aumento ou diminuição da resistência elétrica dos nanomagnetos devido ao espalhamento dos elétrons de condução, o que lhes rendeu o prêmio Nobel em 2007 [6, 7, 8]. Além deste fenômeno, a magnetorresistência de Lorentz e o efeito Hall são mais alguns exemplos de como as características magnéticas são capazes de influenciar nos comportamentos elétricos, sendo que até o ano de 1996 o Campo de Oersted era a única forma possível de controlar a magnetização a partir de uma corrente elétrica [8].

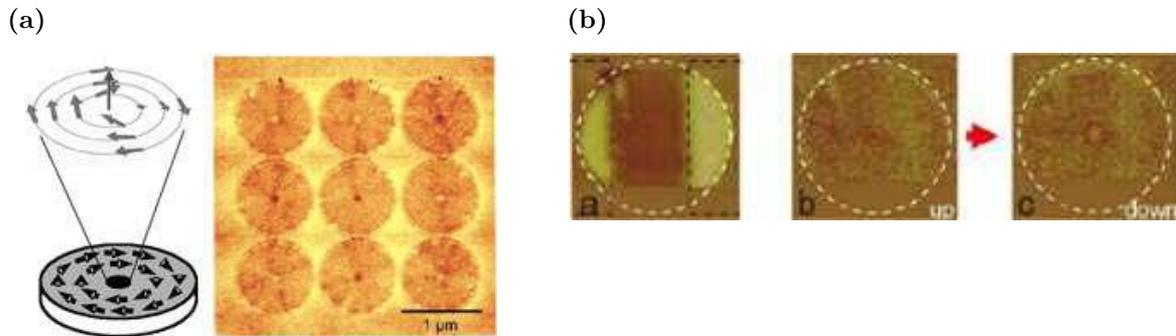
Atualmente sabemos que o efeito contrário também é possível, ou seja, uma corrente elétrica é capaz de alterar o estado da magnetização, sendo este efeito prático conhecido como *Spin Transfer Torque* (STT), em que uma corrente elétrica polarizada ao atravessar uma fina camada ferromagnética com orientação diferente de sua polarização gera um torque clássico que altera a magnetização local desta camada. Este efeito foi previsto por Luc Berger em 1984 [9] e verificado por Slonczewski J. C em 1996 [10] e dá nome à área conhecida hoje como spintrônica, que é análoga a eletrônica, mas ao invés de se basear na manipulação de cargas elétricas por campos elétricos, está embasada na manipulação de *spin* a partir de correntes elétricas polarizadas.

Um das estruturas mais potencialmente inovadoras para alcançar o objetivo de maior densidade de armazenamento de dados são os chamados nanomagnetos, onde as estruturas monodomínio podem não ser as únicas possíveis, surgindo, mesmo que artificialmente, estruturas magnéticas exóticas e complexas como vórtices, *skyrmions* e paredes de domínio PDVs (paredes de domínio do tipo vórtice), PDTs (paredes de domínio transversais) e PDTAs (paredes de domínio transversais assimétricas) [11, 12].

Os vórtices são estruturas circulares estáveis que apresentam diâmetros entre dezenas e centenas de nanômetros, sendo caracterizados por momentos magnéticos que rotacionam num plano em torno de um eixo. Estas estruturas são, em teoria, quadruplicamente degeneradas em razão de duas propriedades magnéticas independentes, a *quiralidade*, que indica o sentido horário ou anti-horário de rotação dos momentos no plano, e a *polaridade*, que indica em que sentido os momentos magnéticos se projetam para fora do plano (acima ou abaixo da espessura do nanodisco), o que pode permitir que vórtices guardem até 2 bits de dados [12].

Veamos a Fig. (1.3) a seguir:

Figura 1.3 – Representação esquemática de um vórtice magnético a esquerda de (a) e imagem de microscopia, a direita de (a). Em (b) está evidenciado *switching* elétrico no núcleo do vórtice, ou seja, o mecanismo de inversão do alinhamento dos entes magnéticos.

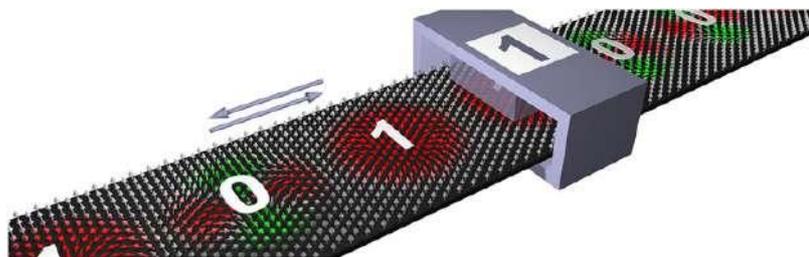


Fonte: Imagens retiradas de Ono *et al.* (2007) [13].

A figura acima destaca técnicas experimentais que detectam as propriedades dos vórtices. A Microscopia de Lorentz é capaz de detectar a *quiralidade* a partir da interação de um feixe de elétrons com os entes magnéticos do material, sendo um efeito da força de Lorentz (Fig. 1.3a). A *polaridade*, por sua vez, é determinada a partir da Microscopia de Força Magnética (MFM), que mede a atração e repulsão em regiões localizadas a partir de uma agulha magnetizada que varre a amostra e traça um relevo magnético (Fig. 1.3b).

Os chamados *skyrmions* e *antiskyrmions* são estruturas topologicamente estáveis que se apresentam como potenciais candidatos em gravação magnética, sendo, em princípio, associados aos estados lógicos **0** ou **1** [14, 15, 16]. Observemos a Fig. (1.4) a seguir:

Figura 1.4 – Imagem esquemática de uma pista de corrida *skyrmion-antiskyrmion*. As informações são codificadas no tipo de partícula magnética, ou seja, um *skyrmion* representa o *bit* “1” e um *antiskyrmion* representa o *bit* “0”. Ao aplicar uma corrente, as partículas magnéticas podem ser movidas em direção a uma cabeça de leitura/gravação.



Fonte: Retirado de Hoffmann *et al.* (2021) [16].

Essas estruturas aparecem em interfaces entre metais pesados e ferromagnetos, sendo completamente caracterizadas a partir de três propriedades: *quiralidade* (ou *polaridade*), nos indicando o sentido de orientação do momento magnético no centro da estrutura; *vorticidade*, que indica se estamos tratando de *skyrmions* (1) ou *antiskyrmions* (0) e *helicidade*, que traz diferentes informações a depender do caso específico de estudo. Por

exemplo, nos *skyrmions* do tipo Bloch, onde a movimentação dos momentos ocorre em todo o espaço, esta propriedade irá nos indicar o sentido de rotação dos momentos, se é horário ou anti-horário [17, 18].

Estas estruturas estáveis precisam ser alternadas entre uma e outra, o que pode ser feito via aplicação de campos magnéticos externos, correntes polarizadas em *spin* e mais recentemente, conforme mostraram Fehmi S. Yasin *et al.* [15], a partir de gradientes de temperatura sem aplicação de campos externos, onde utiliza-se calor residual.

A partir de toda essa discussão feita nesta introdução, vemos que o ramo de aplicação do micromagnetismo é bastante vasto, e, neste sentido, nosso grupo de pesquisa tem se dedicado, entre outras coisas, a analisar a influência da corrente elétrica polarizada na manipulação de *skyrmions*, *antiskyrmions* e vórtices magnéticos em diferentes geometrias como nanofios, nanofitas quadradas, circulares ou quadradas e também em *bulks*. Especificamente nesta dissertação, nos dedicamos em testar o *software* de simulação micromagnética (escrito em Fortran 90) desenvolvido por nosso grupo a partir da solução de problemas-padrão em micromagnetismo. Este problemas são amplamente conhecidos na comunidade acadêmica de micromagnetismo e são originalmente propostos pelo grupo μ MAG – Micromagnetic Modeling Activity Group [19], mas outros autores também os propõem. Por terem resultados já consolidados, servem de parâmetro de validação de novas ferramentas de simulação.

Nos dedicamos a resolver dois problemas-padrão, onde o primeiro é uma proposta de David Cortés-Ortuño *et al.* [17] e trata sobre estudo estático de *skyrmions* e *antiskyrmions* em três casos particulares: (i) um envolvendo apenas sistemas unidimensionais (nanofios) para determinar o comportamento do ângulo de inclinação do momento magnético nas bordas; (ii) outro envolvendo sistemas bidimensionais para encontrar as diferentes configurações magnéticas frente a variação de propriedades características do sistema como polaridade, vorticidade e helicidade, além de encontrar os chamados raios dos *skrymions* (r_{sk}) nos estados de mínima energia. Por fim um último problema (iii) que envolve *bulks* compostos por um empilhamento de *skyrmions* do tipo Bloch na presença de campos magnéticos externos, em que buscamos verificar o comportamento das componentes radial, azimutal e fora do plano do vetor momento magnético para diferentes faixas do sistema.

Um outro problema-padrão ao qual nos dedicamos a resolver intitula-se *Standard Problem #5*, sendo proposto por Massoud Najafi *et al.* [20] e trata do estudo da dinâmica de vórtices magnéticos inseridos em um cuboide de Permalloy-79 (Ni81Fe19) sujeito a aplicação de correntes polarizadas em *spin*. Buscamos também verificar a influência dos perfis de magnetização frente a variação de parâmetros característicos do problema como densidade de corrente superficial j e do grau de não-adiabaticidade ξ .

Esta dissertação está subdividida e organizada em 5 capítulos, sendo os subsequentes organizados da seguinte forma: (II) – Fundamentação Teórica, em que nos debruçamos

sobre a teoria acerca das interações magnéticas a partir de uma descrição clássica do vetor de magnetização, além de abordar matematicamente sobre as estruturas magnéticas estudadas; (III) – Metodologia, onde justificamos a redefinição de nosso sistema em células de trabalho discretizadas, ao qual evidenciam a necessidade de reformular nossas equações de interação magnéticas e campos efetivos locais. Ainda neste capítulo, destacamos os métodos de integração numérica utilizados em nosso programa para resolver a equação de movimento que rege nosso sistema, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). (IV) – Resultados, em que separamos em duas grandes seções, cada uma dedicada a discussão do problema-padrão com interação de Dzyaloshinskii-Moriya e do problema-padrão envolvendo a dinâmica de vórtices magnéticos. O quinto e último capítulo (V – Conclusões e Perspectivas Futuras) é dedicado a trazer uma visão geral sobre os resultados obtidos, destacando se os objetivos foram alcançados, além de trazer as perspectivas futuras de aplicação. Nesta parte do resultados ressaltamos a eficiência do nosso programa (que utiliza interação dipolar) frente a outros *softwares* do ramo que utilizam campos desmagnetizantes \mathbf{H}^{desmag} .

Capítulo 2

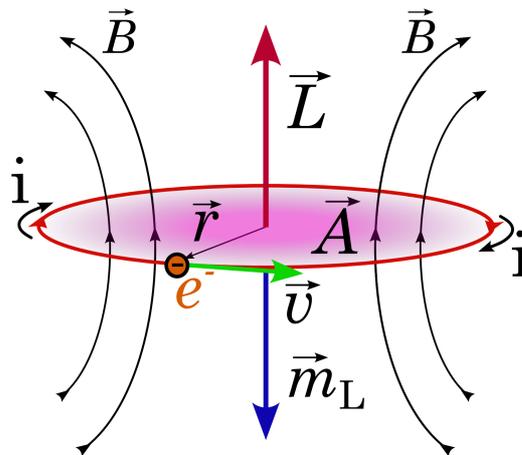
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 PROPRIEDADES DOS MATERIAIS MAGNÉTICOS

2.1.1 Momento de dipolo magnético

Além da massa m_e e carga elétrica $|e|$, os elétrons também possuem outra propriedade intrínseca denominada *momento de dipolo magnético de spin* (\mathbf{m}_s). Vamos tomar um modelo hipotético em que um elétron gira com velocidade v em uma órbita de Bohr de raio r , tal como na Fig. (2.1):

Figura 2.1 – Representação clássica da órbita de Bohr de um elétron ao redor de seu núcleo. O vetor momento angular \vec{L} surge a partir do movimento em si, enquanto o vetor momento de dipolo magnético \vec{m}_L surge devido a carga elétrica circundante na área orientada \vec{A} que compreende a órbita.



Fonte: Autoria própria (2023).

Vemos a partir da Fig. (2.1) que o momento magnético orbital \mathbf{m}_L encontra-se na mesma direção que o momento angular \mathbf{L} , porém aponta no sentido oposto. Esta carga em movimento circular gera uma corrente elétrica i , cujo módulo é dado por:

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}. \quad (2.1)$$

Se a área orientada desta órbita é $\mathbf{A} = \pi r^2 \hat{n}$, então o momento de dipolo magnético orbital (que é perpendicular ao plano da órbita) será tal que,

$$m_L = iA = i\pi r^2. \quad (2.2)$$

Vamos buscar uma associação direta entre m_L e L , sendo o momento angular, por definição, dado por $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, em que \mathbf{p} é o vetor momento linear. Tomando a Eq. (2.2) e substituindo o valor da corrente encontrada em (2.1), temos:

$$m_L = i\pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r} \cancel{\pi r^2} \left(\frac{m_e}{m_e} \right) = \frac{e}{2m_e} \underbrace{m_e v r}_L = \frac{e}{2m_e} L. \quad (2.3)$$

A partir da Eq. (2.3), vemos a relação entre m_L e L , e, dividindo ambos os lados por L , percebe-se uma relação de combinação entre constantes universais, cuja razão é escrita como:

$$\frac{m_L}{L} = g_l \frac{\mu_B}{\hbar}, \quad (2.4)$$

onde $\mu_B = e\hbar/2m_e = 9,27 \times 10^{-24} \text{ A}\cdot\text{m}^2$ é chamado de *Magnéton de Bohr* e constitui uma unidade natural de medida do momento de dipolo magnético atômico; o termo \hbar é a constante reduzida de Planck com valor de $h/2\pi = 1,05 \times 10^{-35} \text{ J}\cdot\text{s}$ e g_l é o fator *g orbital*, que para este caso toma-se como $g_l = 1$ [21].

Vetorialmente, a Eq. (2.4) fica como se segue:

$$\boxed{\mathbf{m}_L = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}} \quad (2.5)$$

Faremos agora um tratamento semi-clássico a este sistema. Por definição, a equação para o momento angular quântico é tal que,

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (2.6)$$

em que l é o número quântico associado ao momento angular orbital, que pode assumir os valores $(0, 1, 2, \dots, n-1)$, sendo n o número quântico principal que por sua vez pode assumir os valores $(1, 2, 3, \dots)$, e \hbar a constante reduzida de Planck. O *magnéton de Bohr* está associado ao menor valor possível de L , ou seja, quando $l = 0$, o que indica que estamos tomando a direção z do momento angular, logo, da (2.6), temos $L_z = \hbar$.

Substituindo a Eq.(2.6) em (2.3) para este caso especial, teremos que:

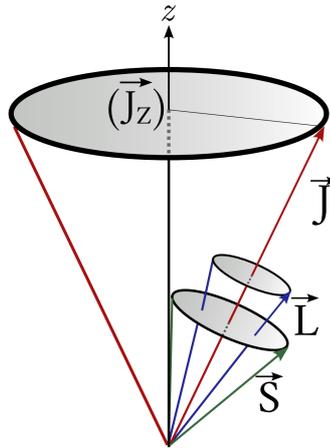
$$m_{L_z} = \frac{e}{2m_e} \sqrt{l(l+1)}\hbar = \frac{e}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{\hbar} \right) L_z = \left(\frac{e\hbar}{2m_e} \right) \frac{1}{\hbar} L_z, \quad (2.7)$$

e então:

$$m_{L_z} = \frac{\mu_B}{\hbar} L_z \equiv g_l \frac{\mu_B}{\hbar} L_z. \quad (2.8)$$

Até o presente momento consideramos apenas o momento angular orbital do elétron, no entanto, para obtermos uma descrição mais completa, devemos incluir também o momento angular de spin \mathbf{S} , que possui uma relação direta com \mathbf{L} . A Fig. (2.2) nos permite compreender isso. No sistema a seguir existe um campo magnético interno forte orientado por \mathbf{L} atuante sobre o elétron atômico que produz um torque sobre seu momento de dipolo magnético de *spin* (\mathbf{m}_s), cuja orientação é dada por \mathbf{S} , sendo este o vetor momento angular de *spin*.

Figura 2.2 – Interação spin-órbita entre os momentos angulares \mathbf{L} e \mathbf{S} .



Fonte: Adaptada de Eisberg e Resnick (1979) [21].

Como existe interação *spin-órbita*, então \mathbf{L} e \mathbf{S} se acoplam de modo que precessionam em torno de sua soma, e não em torno de z , que seria o movimento natural caso não houvesse essa interação, o que implica na variação das componentes x , L_x e S_x . Se sobre o elétron não atuarem torques externos, então seu momento angular total é dado por:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (2.9)$$

A soma expressa em (2.9) obedece a lei de conservação do momento angular na mecânica quântica, pois o vetor total \mathbf{J} assim como sua projeção em z são constantes enquanto J_x e J_y precessionam em torno de 0, pois as projeções de \mathbf{L} e \mathbf{S} em torno de \mathbf{J} são as mesmas durante o movimento de precessão em torno de sua soma [21].

O vetor momento angular de *spin* (\mathbf{S}) pode também ter seu módulo escrito como $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$, e, da mesma forma como prosseguimos anteriormente, podemos escrever que:

$$\mathbf{m}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}, \quad (2.10)$$

ou então:

$$\mathbf{m}_s = -\gamma_s \mathbf{S}, \quad (2.11)$$

onde γ_s é a razão giromagnética, e é dada por $\gamma_s = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} = g_s \frac{e}{2m_e} = 1,76 \times 10^{11}$ T/s (no S.I). De modo geral, os fatores g , são definidos pela regra de Hund, como [21]:

$$g_j = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (2.12)$$

Podemos escrever o momento angular total de um dado sistema a partir da soma vetorial de \mathbf{L} e \mathbf{S} como se segue:

$$\mathbf{m} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} = \gamma \mathbf{J}. \quad (2.13)$$

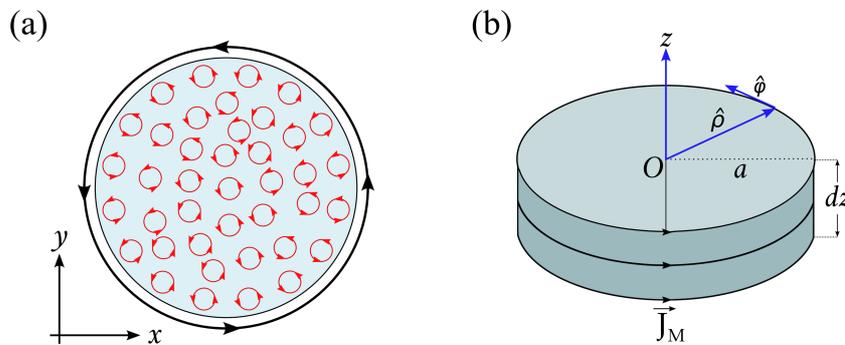
2.1.2 Correntes de Magnetização

Na seção anterior, definimos o vetor momento de dipolo magnético total, que pode ser denotado como \mathbf{m}_i para um sistema com N partículas. Definiremos agora o conceito de magnetização (\mathbf{M}), que é uma quantidade vetorial macroscópica resultante de correntes microscópicas, que pode ser interpretada como uma densidade a partir da soma dos momentos magnéticos em um elemento Δv , ou seja,

$$\mathbf{M} = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta v} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i. \quad (2.14)$$

Imaginemos que em uma barra cilíndrica magnetizada de forma uniforme na direção axial (\hat{z}) em que fluem correntes microscópicas circulares perpendiculares a \hat{z} , tal como na Fig. (2.3a) abaixo:

Figura 2.3 – Cilindro imantando, sendo em (a), a representação correntes de Ampère em um material magnético e em (b), a corrente superficial no cilindro.



Fonte: Adaptado de Nussenzveig (2015) [22].

Os círculos orientados em vermelho na Fig. (2.3a) representam as correntes microscópicas da barra cilíndrica. Na regiões interiores desta amostra, ocorre cancelamento

de correntes adjacentes aos pares, no entanto, nas superfícies das bordas do sistema não há compensação e tem-se uma corrente líquida resultante [22]. Isto está representado na Fig. (2.3b).

A esta densidade de corrente superficial denotaremos como \mathbf{J}_m , que aqui está na direção $\hat{\varphi}$. Temos então que

$$\mathbf{J}_m = \left(\frac{di}{dz} \right) \hat{\varphi}, \quad (2.15)$$

onde di e dz indicam quantidades infinitesimais de corrente e espessura, respectivamente. A magnetização infinitesimal é dada por

$$d\mathbf{M} = (di)\mathbf{A} = (di)\pi a^2 \hat{z}. \quad (2.16)$$

Substituindo a Eq. (2.15) na Eq. (2.16) e tomando seu módulo, temos que $|d\mathbf{M}| = |\mathbf{J}_m| \underbrace{(\pi a^2) dz}_{dv}$, o que é justamente o que nos diz a Eq. (2.14). Portanto, uma vez que $\hat{\varphi} = \hat{z} \times \hat{\rho}$, fica definida então a densidade de corrente superficial de magnetização

$$\mathbf{J}_m = \mathbf{M} \times \hat{\rho} \equiv \mathbf{M} \times \hat{n}. \quad (2.17)$$

onde \hat{n} é a normal externa à superfície do cilindro. As *correntes de magnetização* (\mathbf{J}_m) produzem o campo magnético \mathbf{B} , e este se soma ao campo produzido pelas correntes \mathbf{J} (correntes livres). No contexto da eletrodinâmica, define-se um campo auxiliar \mathbf{H} , na qual nos permite redefinir a Lei de Ampère para \mathbf{H} ($\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}$), advinda da seguinte relação [22]:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{J} + \mathbf{J}_m) = \mu_0\mathbf{J} + \mu_0\nabla \times \mathbf{M}. \quad (2.18)$$

de modo que podemos definir:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \left(\mathbf{B} - \mu_0\mathbf{M} \right). \quad (2.19)$$

Isso nos permite escrever o vetor indução magnética (\mathbf{B}) como:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}). \quad (2.20)$$

A partir de uma análise dimensional das grandezas \mathbf{B} e μ_0 já conhecidas na Eq. (2.20), com unidades de T e N/A² no S.I, respectivamente, concluímos então que \mathbf{H} e \mathbf{M} têm a mesma unidade, ou seja A/m, o que pode facilmente ser verificado uma vez que $[\mathbf{T}] \equiv \text{N/Am}$.

2.1.3 Susceptibilidade magnética e classificação de materiais

Da Eletrostática, temos que em meios dielétricos lineares, homogêneos e isotrópicos, vale a seguinte relação:

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{D} = \varepsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \varepsilon_0 k \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.21)$$

onde \mathbf{P} é o vetor polarização, \mathbf{D} o deslocamento elétrico, ε a permeabilidade elétrica do meio (subscrito indica no vácuo) e χ sendo definido como a susceptibilidade dielétrica.

Ocorre que em meios magnéticos com as mesmas características, vale que,

$$\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}, \quad (2.22)$$

onde agora χ_m é a chamada susceptibilidade magnética do meio. De forma semelhante a Eletrostática, temos que:

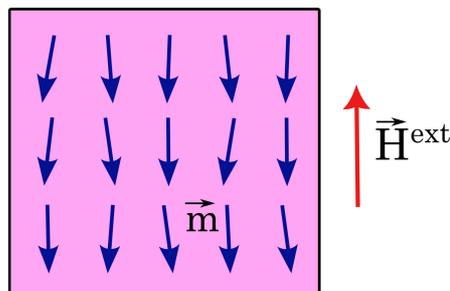
$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \mathbf{H} \equiv \mu \mathbf{H}, \quad (2.23)$$

onde $\mu_0 = \frac{\mu}{(1 + \chi_m)}$, com μ sendo a permeabilidade magnética do meio e $1 + \chi_m = k_m$. A depender de como μ , μ_0 e χ_m se comportam, podemos classificar os materiais em (i) *diamagnéticos*, (ii) *paramagnéticos*, (iii) *ferromagnéticos*, (iv) *ferrimagnéticos* ou (v) *antiferromagnéticos*.

2.1.3.1 Materiais magnéticos lineares: diamagnéticos e paramagnéticos

Os materiais diamagnéticos (i) são aqueles que $\mu < \mu_0$ e χ_m se comporta com uma constante negativa. Na presença de um campo externo \mathbf{H}^{ext} , os dipolos magnéticos se orientam em sentido contrário a ele, o que faz com que o campo magnético no interior da amostra seja menor que \mathbf{H}^{ext} . Veja uma ilustração deste efeito na Fig. (2.4) a seguir:

Figura 2.4 – Material diamagnético. O vetor \vec{m} indica o sentido dos momentos de dipolo magnético como resposta a um campo externo aplicado ao qual amostra está sujeita.

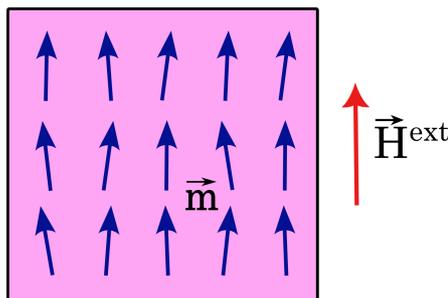


Fonte: Autoria própria (2023).

Como exemplos de diamagnéticos temos o cobre (Cu), prata (Ag) e o ouro (Au).

Os materiais paramagnéticos (ii) têm efeitos mais evidentes que os diamagnéticos (i), e estão associados a existência de dipolos magnéticos permanentes orientados no sentido de um campo \mathbf{H}^{ext} aplicado. São caracterizados por $\mu > \mu_0$ e $\chi_m = \chi_m(T)$, sendo χ_m positiva. A tendência ao alinhamento com \mathbf{H}^{ext} ocorre quando $T \rightarrow 0$, gerando um campo interno maior que este. Veja a ilustração deste efeito na Fig. (2.5).

Figura 2.5 – Material paramagnético. O vetor \vec{m} indica o sentido dos momentos de dipolo magnético como resposta a um campo externo aplicado ao qual amostra está sujeita.



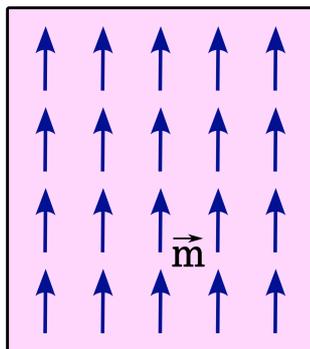
Fonte: Autoria própria (2023).

Como exemplos temos o alumínio (Al), a Platina (Pt) e bário (Ba). Tanto em (i) e em (ii), $|\chi_m| \ll 1$, (aproximadamente da ordem de 10^{-3} a 10^{-5}), o que nos permite classificá-los como materiais magnéticos lineares. Para estas classes de materiais, temos que $\mu \approx \mu_0$ e $\mathbf{B} \approx \mu_0 \mathbf{H}$ [22, 23].

2.1.3.2 Magnetismo coletivo: ferromagnéticos, ferrimagnéticos e antiferromagnéticos

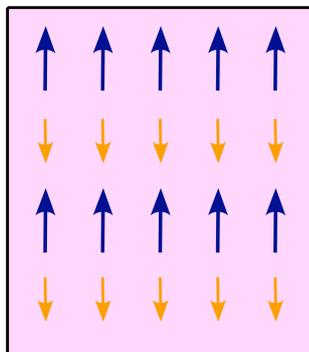
Existem ainda os materiais cuja magnetização não depende da aplicação de um campo externo, ou seja, apresentam “magnetização espontânea” abaixo de uma temperatura crítica, chamada temperatura de Curie (T_c). Aqui, a susceptibilidade magnética depende do campo, temperatura e da “história magnética” do material, ou seja, a forma como ele foi preparado.

Nos materiais ferromagnéticos (iii), – aos quais podemos exemplificar o Cobalto (Co) e o Ferro (Fe) –, temos que os momentos magnéticos tendem a uma única direção desde que a amostra esteja abaixo de T_c . Na Fig. (2.6) temos uma representação deste efeito.

Figura 2.6 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material ferromagnético.

Fonte: Autoria própria (2023).

Os (iv) ferrimagnetos também exibem “magnetização espontânea”, e, abaixo de T_c , têm seus momentos magnéticos com tendência a orientar-se de forma antiparalela e com diferentes intensidades, o que gera uma magnetização total diferente de zero. A magnetita (Fe_3O_4), que é um dos principais constituintes dos ímãs, é um bom exemplo de material ferrimagnético. Veja na Fig. (2.7) uma representação abaixo de um material ferrimagnético:

Figura 2.7 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material ferrimagnético.

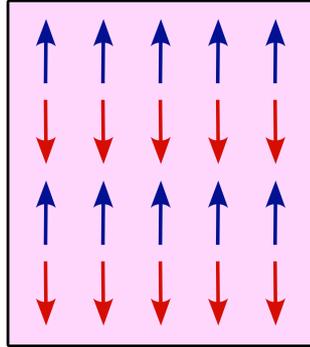
Fonte: Autoria própria (2023).

Os ferro e ferrimagnetos, apesar de não dependerem de um campo externo para manter sua magnetização, também são afetados na presença dele, exibindo a sua magnetização máxima (ou magnetização de saturação \mathcal{M}_s), ponto ao qual uma maior intensidade de campo não mais afeta a orientação dos momentos. Nestas duas últimas classes, temos que $\chi_m \gg 1$, o que os configuram como materiais não-lineares, ou seja, χ_m e μ variam com \mathbf{B} a partir de uma relação matemática não trivial. Em temperaturas acima de T_c os ferromagnéticos se tornam paramagnéticos [22, 24].

Na última classe (v), os antiferromagnetos, – aos quais podemos citar o óxido de Ferro (FeO) e óxido de Cobalto (CoO) –, também temos este comportamento de uma transição para efeitos paramagnéticos acima de uma determinada temperatura, a

chamada temperatura de Néel (T_N). Para temperaturas abaixo deste limite, o material não exibe propriedades magnéticas resultantes, o que ocorre devido ao fato dos momentos de dipolo orientarem-se em sentidos opostos e em intensidades iguais, resultando em uma magnetização líquida nula, mesmo em baixas temperaturas. Vejamos uma representação destes efeitos na Fig. (2.8):

Figura 2.8 – Ordenamento dos momentos de dipolo magnético em um material antiferromagnético abaixo da temperatura de Néel T_N .



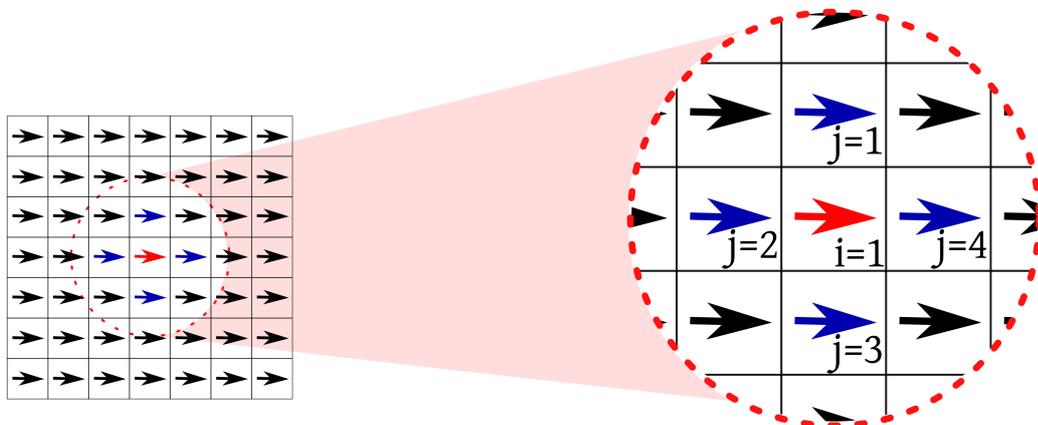
Fonte: Autoria própria (2023).

2.2 INTERAÇÕES MAGNÉTICAS

2.2.1 Interação de troca (*exchange*)

Consideremos uma rede arranjada com N spins (ver Fig. (2.9)), em que um spin qualquer S_i pode ter momento magnético $\pm \mathbf{m}$ [24]:

Figura 2.9 – Representação da interação de troca em uma rede com N spins. Em destaque temos a representação da interação de um único spin (em vermelho) interagindo unicamente com seus vizinhos (em azul).



Fonte: Autoria própria (2023).

Tem-se então que a interação de *exchange*, – assim definida pela possibilidade de que dois elétrons quaisquer da rede troquem de lugar –, ocorre somente entre os primeiros vizinhos [24], sendo esta então uma interação dita de curto alcance, cuja energia é dada por:

$$U^{exchange} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{2J_{ij}}{\hbar^2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.24)$$

A Eq. (2.24) é dita também como o modelo de Heisenberg isotrópico, e i e j representam os sítios dessa rede, e \mathbf{S}_i simboliza o operador de spin que se encontra na rede i ; o fator $J_{ij} \equiv 2J'_{ij}$ é chamada de constante de acoplamento de troca. O termo $(1/2)$ foi inserido para se evitar fazer dupla contagem de uma mesma interação e a notação $\langle i, j \rangle$ indica que estamos fazendo a soma entre os primeiros vizinhos.

Podemos reescrever a Eq. (2.24) em função do momento de dipolo, tomando as relações das Eqs. (2.10) e (2.11), isso nos dá que:

$$U^{exchange} = -\frac{1}{2g^2m_B^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j = -\frac{1}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j. \quad (2.25)$$

A partir de uma relação entre vetores unitários, e levando em conta que o módulo de cada um dos momentos de dipolo da rede discretizada não varia (ver demonstração no Apêndice A), ou seja, $m_i = m_j = m$, então podemos reescrever a Eq. (2.25) em termos de vetores unitários como:

$$U^{exchange} = -\frac{1}{2} \frac{m^2}{g^2m_B^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -\frac{1}{2} \left(\frac{m}{\hbar\gamma} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.26)$$

O termo σ (adimensional) pode ser tomado como uma constante que costuma ser condensada no termo J_{ij} , então a forma final da Eq. (2.26) fica:

$$U^{exchange} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij}^* \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.27)$$

O termo $J_{ij}^* = J_{ij}\sigma$ possui um valor constante J quando se está considerando primeiros vizinhos, e é nulo para todos os outros casos, assim, uma outra forma de reescrever a Eq. (2.27) é mostrada abaixo:

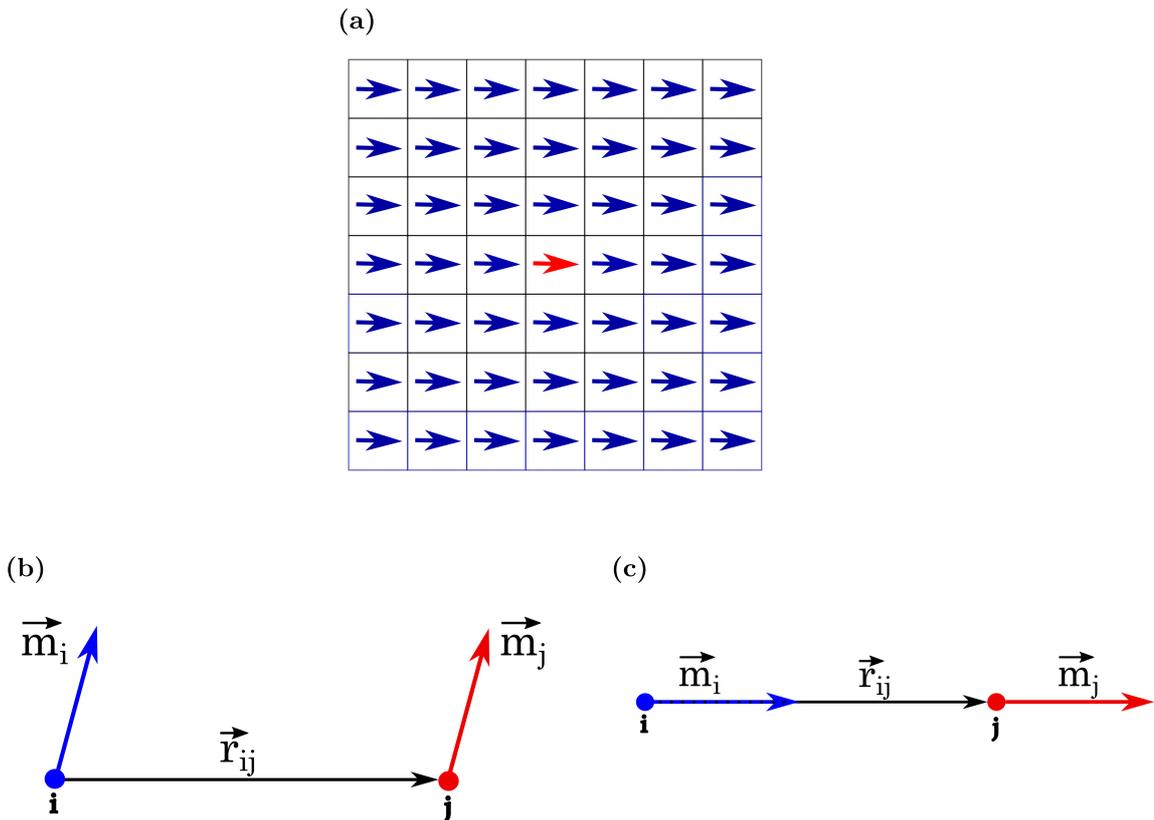
$$U^{exchange} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.28)$$

Em um material onde $J > 0$, temos uma minimização da energia de troca quando a orientação entre os momentos magnéticos for **paralela**, o que configura os materiais *ferromagnéticos*; e no caso em que $J < 0$, temos o estado mais favorável energeticamente quando a orientação dos spins for **antiparalela**, daí temos os *antiferromagnetos*.

2.2.2 Interação dipolar

A interação dipolar é uma interação clássica cuja intensidade cai com o cubo da distância. É dita de longa distância, uma vez que um spin localizado em um dado sítio não afeta somente os seus primeiros vizinhos, mas todos os *spins* que compõem a rede. Uma representação desta ideia pode ser vista na Fig. (2.10) a seguir:

Figura 2.10 – Na figura (a) temos a representação de uma rede de *spins* onde todos interagem entre si. Uma configuração inicial qualquer onde há apenas dois *spins* interagindo pode ser vista na figura (b), sendo o estado de mínima energia alcançado na figura (c). O vetor \vec{r}_{ij} denota a distância relativa entre \vec{m}_i e \vec{m}_j .



Fonte: Autoria própria (2024).

A energia desta interação é descrita pela seguinte relação:

$$U^{dipolar} = -\frac{\mu_0}{8\pi} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{3(\mathbf{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}{(r_{ij})^3} \right], \quad (2.29)$$

onde o versor \hat{r}_{ij} é dado por

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.30)$$

Da Eq. (2.29) vemos que o produto escalar entre os momentos \mathbf{m}_i e \mathbf{m}_j com \hat{r}_{ij} informa que estes tenderão a alinhar-se nessa direção, o que leva ao alinhamento mútuo dos momentos entre si. Já o segundo termo tende a alinhar \mathbf{m}_i e \mathbf{m}_j na mesma direção.

2.2.3 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

A interação de troca antissimétrica de Dzyaloshinskii-Moriya também ocorre entre primeiros vizinhos, sendo um efeito de acoplamento spin-órbita presente em materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos com simetria de inversão quebrada, sendo necessária (mas não suficiente) para a geração dos chamados *skyrmions* e *antiskyrmions* (que serão discutidos na Sec. (2.4)) [17, 25, 26, 27]. No entanto, diferente da interação de troca, esta favorece um alinhamento perpendicular entre \hat{m}_i e \hat{m}_j [23]. Em um sistema com N spins, a energia proveniente da interação entre dois primeiros vizinhos localizados nos sítios i e j (de forma generalizada) é tal que:

$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \mathbf{D}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j), \quad (2.31)$$

onde \mathbf{D}_{ij} é o vetor antissimétrico (ou seja, vale $\mathbf{D}_{ij} = -\mathbf{D}_{ji}$) de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) que depende da simetria do material, \hat{m}_i e \hat{m}_j são os momentos magnéticos situados nos sítios i e j , respectivamente [26]. Novamente, o fator $1/2$ foi adicionado para evitar contagem em duplicidade. O vetor de DM pode ser dado por $\mathbf{D}_{ij} = D\hat{d}_{ij}$, em que:

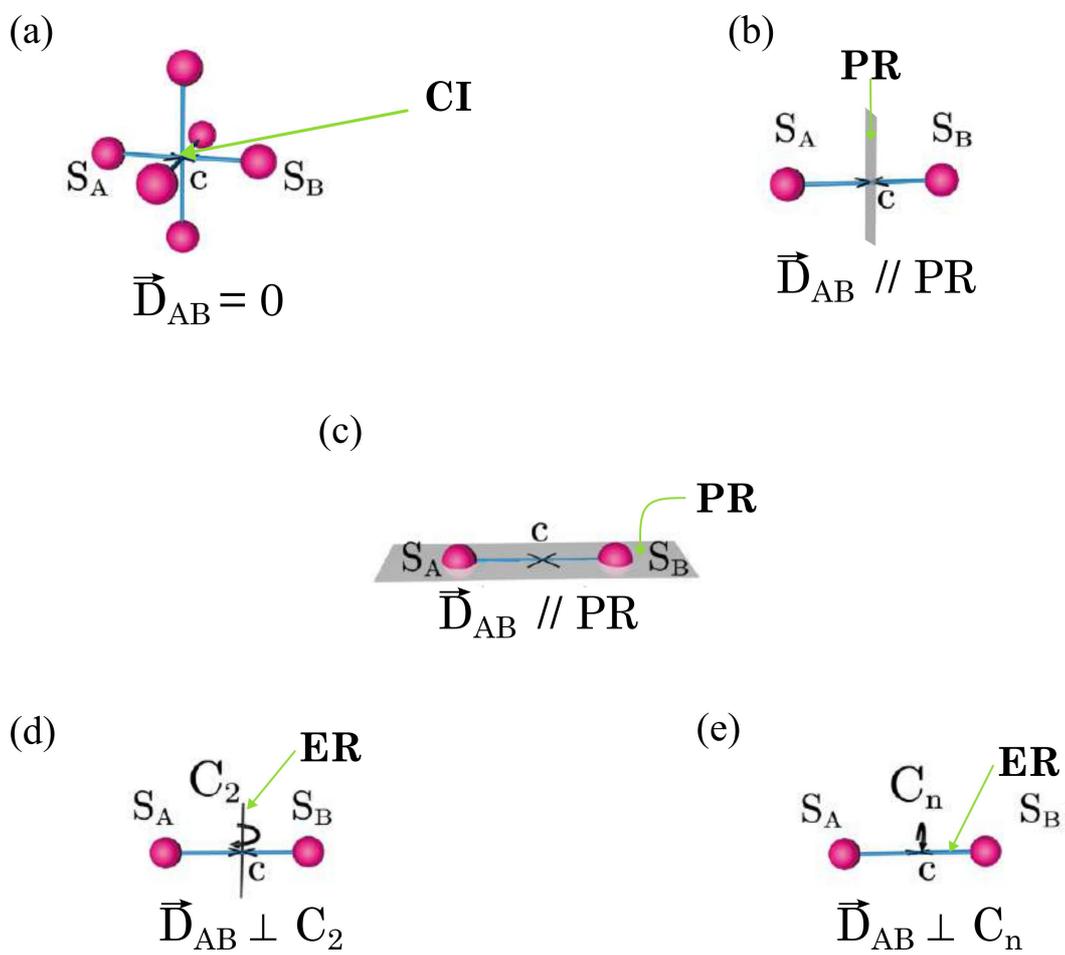
$$\hat{d}_{ij} = \hat{r}_{ij} \times \hat{z}. \quad (2.32)$$

sendo estes vetores unitários ortogonais entre si.

Vale ressaltar que a interação DM somente ocorre quando se existe um grande acoplamento spin-órbita (SOC). As considerações de Moriya definem cinco possibilidades para a direção do vetor \mathbf{D}_{ij} a partir de \hat{z} [26, 27], cujas definições se sustentam em simetrias de cristais, onde três conceitos básicos são importantes de destacar: (i) – **Plano de Reflexão**, que constitui um plano imaginário que divide o cristal em duas metades simétricas; (ii) – **Eixo de Rotação**, que é uma linha imaginária que passa pelo centro do cristal e o terceiro conceito cristalográfico conhecido como (iii) – **Centro de Simetria**, que é um ponto no cristal onde qualquer linha imaginária que passe por ele encontra pontos idênticos em distâncias iguais em direções opostas.

Vamos imaginar dois *spins* \mathbf{S}_A e \mathbf{S}_B distantes por uma linha reta AB que os une, tal como na Fig. (2.11):

Figura 2.11 – Regras de Moriya para sistema com interação DM. As siglas CI, PR e ER significam Centro de Inversão, Plano de Reflexão e Eixo de Rotação, respectivamente. As linhas em azul que ligam os íons magnéticos (representados em rosa) indicam o caminho AB, e o ponto C é o ponto ao qual nos baseamos para determinar tais regras.



Fonte: Adaptada de FERT *et al.*, (2023) [26].

A partir da bissetriz que passa pelo ponto \mathbf{C} , que está no ponto médio entre \mathbf{A} e \mathbf{B} , podemos definir:

- (a) $\mathbf{D}_{AB} = 0$, se existe um centro de inversão em \mathbf{C} entre os pontos \mathbf{A} e \mathbf{B} , ou seja, não temos interação DM;
- (b) $\mathbf{D}_{AB} \perp \mathbf{AB}$ ou $// \mathbf{PR}$ quando este é perpendicular \mathbf{AB} e passa por \mathbf{C} ;
- (c) $\mathbf{D}_{AB} \perp \mathbf{PR}$ quando este contiver \mathbf{A} e \mathbf{B} ;
- (d) $\mathbf{D}_{AB} \perp \mathbf{ER}$, se este eixo de rotação duplo (*two-fold*) for perpendicular a \mathbf{AB} e passar por \mathbf{C} ;
- (e) $\mathbf{D}_{AB} \parallel \mathbf{AB}$, se existe um eixo de rotação *n-fold* ($n \geq 2$) ao longo de \mathbf{AB} .

Utilizando termos cristalográficos, definem-se os materiais com simetrias de classe T , O , D_{2d} e C_{nv} , cuja diferenciação afeta diretamente na expressão para calcular a energia do sistema. A classe T refere-se às **simetrias tetraédricas**, cujo sólido é composto por tetraedros com quatro faces triangulares equiláteras que preservam suas propriedades quando rotacionado de torno de qualquer um dos seus eixos de simetria. Já a classe O referem-se **simetrias octaédricas**, que constituem sólidos geométricos com oito faces triangulares equiláteras. Um sistema com simetria O possui as mesmas propriedades quando rotacionado em torno de qualquer um de seus eixos de simetria. O subscrito n em C_{nv} indica a rotação necessária para sobrepor uma figura a si mesma. Por exemplo, imaginemos uma estrutura com o tipo de rotação C_{2v} , como $n = 2$ (Prismas Trigonais Monoencapuzados), então a rotação necessária para esta sobreposição é de $360^\circ/2 = 180^\circ$, onde o 2 no denominador corresponde ao valor de n . O subscrito “v” é apenas por questão de nomenclatura e nos diz que a estrutura possui um conjunto especial de planos de simetria que estão diretamente relacionados com o eixo de rotação principal. A classe D_{2d} está associada à formação de antiskyrmions, sendo que possuem três eixos de rotação característicos: 2 do tipo C_2 e 1 também do tipo C_2 que é perpendicular aos outros dois primeiros. Esta classe de simetria está associadas aos Dodecaedros, que constituem o grupo de **simetria diédrico** [28].

Os materiais que apresentam as simetrias do tipo T e O têm sua energia de DM descritas por:

$$U_{T,O}^{(DM)} = D\mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{m}). \quad (2.33)$$

Já a classe dos materiais do tipo D_{2d} , que são associados à formação de antiskyrmions, tem sua energia dada por:

$$U_{D_{2d}}^{(DM)} = D\mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \hat{x} - \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \times \hat{y} \right). \quad (2.34)$$

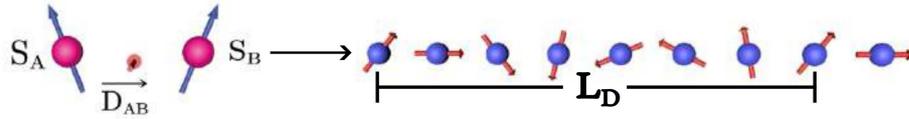
Os materiais descritos por simetrias do tipo C_{nv} com $n > 2$ para um caso especial onde temos um cristal localizado num plano x - y , têm sua energia descrita pela seguinte equação:

$$U_{C_{nv}}^{(DM)} = D(\mathbf{m} \cdot \nabla m_z - m_z \nabla \cdot \mathbf{m}). \quad (2.35)$$

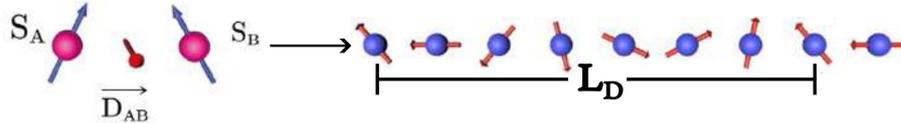
A depender de como os *spins* vizinhos estão em relação ao outro, o vetor DM resultante desta organização pode resultar em uma rotação no sentido horário ou anti-horário, tal como podemos observar na Fig. (2.12):

Figura 2.12 – Orientação do vetor DM a partir da organização de *spins* vizinhos. Em (a) temos um espiral de rotação no sentido horário (Néel tail-to-tail) e em (b) no anti-horário (Néel head-to-head).

(a)



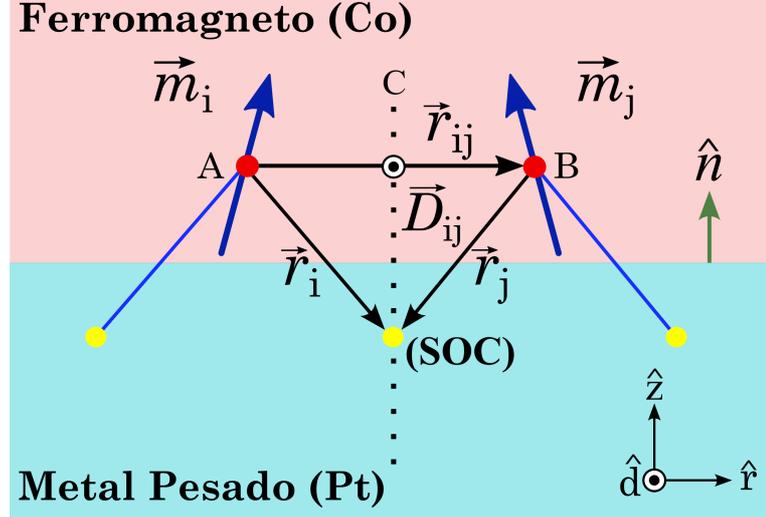
(b)



Fonte: Adaptado de Fert *et al.* (2023) [26].

O termo L_D indica o comprimento helicoidal, que é a distância percorrida ao longo de uma trajetória helicoidal do *skyrmion* até completar uma volta, sendo definida por $L_D = 4\pi\mathcal{A}_{ex}/|D|$ (o termo \mathcal{A}_{ex} será definido no Cap. 3). Uma exemplificação da Fig. (2.12b) é tomada a seguir:

Figura 2.13 – Representação de dois íons magnéticos presentes em uma interface de Cobalto/Platina (referente ao caso (b) da Fig. (2.11)). O vetor normal \hat{n} é um vetor unitário que sai do metal pesado em direção ao material ferromagnético, estando associado à direção de z e o vetor \mathbf{r}_{ij} leva em conta as posições dos dois íons magnéticos da Platina em relação a um átomo de Cobalto.



Fonte: Autoria própria (2024).

O vetor unitário \hat{r}_{ij} une os sítios i e j , e, para o caso da interação de DM interfacial, o vetor unitário \hat{z} é o vetor normal a interface entre um material ferromagnético (Co) e metal pesado com grande acoplamento spin-órbita (Pt), por exemplo.

Combinando as Eqs. (2.31) e (2.32), podemos escrever:

$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N D[\hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j)] \quad (2.36)$$

2.2.4 Interação de Zeeman

A interação de um campo magnético externo \mathbf{H}^{ext} com os momentos magnéticos de uma amostra, dá origem à chamada interação de Zeeman, que a partir de um torque atuante em cada um dos momentos, busca alinhá-los na direção e sentido deste campo. A energia proveniente destas interações nos dá:

$$U^{Zeeman} = -\mu_0 \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}_i^{ext} \quad (2.37)$$

Vamos aqui definir um termo de campo magnético adimensional a partir da razão entre o campo magnético externo \mathbf{H}^{ext} (dimensão de A/m) e a magnetização de saturação (dimensão de A/m), assim:

$$\mathbf{h}_i^{ext} = \frac{\mathbf{H}_i^{ext}}{\mathcal{M}_s}. \quad (2.38)$$

Mais uma vez, a partir da consideração de invariabilidade do momento magnético, substituímos a (2.38) em (2.37) e então ficamos com:

$$U^{Zeeman} = -\mu_0 \mathcal{M}_s \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext} = -\mu_0 \mathcal{M}_s m \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext}. \quad (2.39)$$

da qual definimos o parâmetro desta interação, que é dada por:

$$\mathcal{Z} = \mu_0 \mathcal{M}_s m, \quad (2.40)$$

o que nos permite reduzir a Eq. (2.39) da seguinte forma:

$$\boxed{U^{Zeeman} = -\mathcal{Z} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext}} \quad (2.41)$$

2.2.5 Interações anisotrópicas

A descrição cristalográfica de materiais considera os eixos cristalográficos, que representam direções imaginárias que passam pelo centro de um cristal e servem como referência para a orientação e notação de propriedades físicas de um material estudado. Os materiais ditos anisotrópicos são aqueles em que as propriedades físicas sofrem variação a depender da direção cristalográfica em que são estudadas, já a ausência desta característica compete à classe dos isotrópicos.

De forma geral, a anisotropia se manifesta em razão da quebra de simetria translacional em uma ou mais direções específicas do cristal, o que privilegia a direção dos campos (elétricos ou magnéticos) envolvidos em uma direção específica; nos materiais magnéticos anisotrópicos especificamente, a minimização da energia total do sistema se dá pela interação de troca e ela indica a tendência da magnetização espontânea de assumir uma certa direção.

Existem pelo menos 50 (cinquenta) tipos de anisotropia magnéticas, sendo que alguns materiais podem apresentar mais de um tipo simultaneamente. Aqui, vamos nos ater a descrever brevemente duas delas: **anisotropia magnetocristalina** e **anisotropia de forma**.

2.2.5.1 Anisotropia magnetocristalina

Intrinsecamente, todos os materiais anisotrópicos apresentam a **anisotropia magnetocristalina**, que são devido ao campo molecular dos átomos de um amostra magnética, que faz surgir a interação de spins de átomos vizinhos, orientando-se paralelamente neste material magnético. O arranjo interno dos átomos, no que diz respeito a simetria da rede cristalina, afeta os processos de troca, fazendo surgir direções preferenciais para a magnetização do cristal, que atinge o seu mínimo de energia quando os momentos magnéticos estão orientados nesta direção que também é denominada de eixo fácil.

A anisotropia magnetocristalina pode ser subclassificada em (i) uniaxial, onde há somente um eixo preferencial para os momentos magnéticos; (ii) biaxial em que há duas direções preferenciais ou ainda (ii) triaxial, em que há três direções preferenciais devido ao acoplamento de spins em um cristal cúbico, por exemplo [29]. Para exemplificar, escrevemos a interação de troca uniaxial na Eq. (2.42) a seguir:

$$U^{anis} = - \sum_{i=1}^N K (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (2.42)$$

onde K é a constante (positiva) de anisotropia, que favorece a orientação dos momentos magnéticos na direção de \hat{n} que por sua vez está atribuída a direção do eixo fácil. Como estamos trabalhando em termos dos versores do momento magnético, então K possui dimensão de energia (J).

2.2.5.2 Anisotropia de forma

Este tipo de anisotropia, diferente da magnetocristalina, é regido pela forma geométrica do material em si, sendo um efeito de tamanho finito do material. Ocorre devido ao momentos de dipolo magnéticos não compensados (que podem ser pensados como “cargas magnéticas” positivas e negativas) nas extremidades de uma amostra finita na presença de um campo magnético externo \mathbf{H}^{ext} , que faz surgir um campo desmagnetizante \mathbf{H}^d com sentido contrário no interior do material, como ilustrado na Fig. (2.14) a seguir:

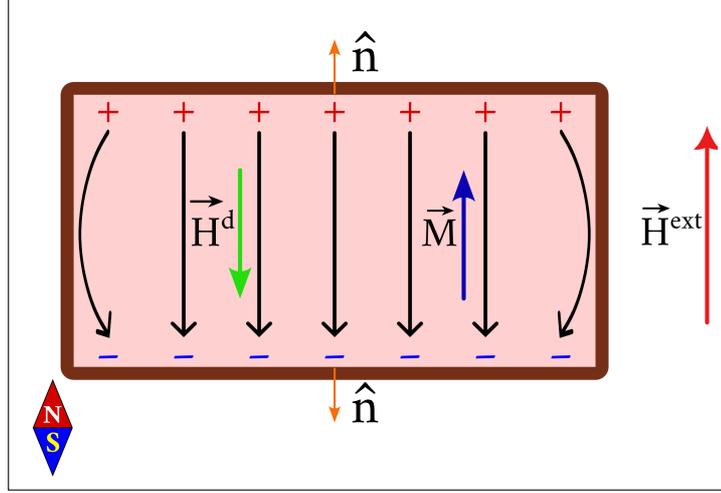
Como dito anteriormente, o segundo termo da Eq. (2.29) alinha \mathbf{m}_i e \mathbf{m}_j ao longo de \mathbf{r}_{ij} , o que favorece o paralelismo dos momentos ao longo de um nanofio, por exemplo, que é caracterizado por ter o comprimento muito maior que sua largura e altura muito menor que sua largura e comprimento.

Na ausência de correntes, temos que no interior da amostra vale que:

$$\nabla \times \mathbf{H}^d = 0, \text{ onde } \mathbf{H}^d = -\nabla \phi_m. \quad (2.43)$$

com ϕ_m sendo o potencial escalar magnético, que é dado por [23]:

Figura 2.14 – Campo desmagnetizante no interior de uma amostra magnética finita na presença de um campo magnético externo.



Fonte: Autoria própria (2024).

$$\phi_m = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho_M}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\sigma_M}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^2r', \quad (2.44)$$

onde $\rho_M = -\nabla' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')$ é a densidade volumétrica de carga magnética e $\sigma_M = \mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \hat{n}$ a densidade superficial de cargas ilustrada na Fig. (2.14).

Tendo em vista que a energia desmagnetizante é advinda da interação dipolar [23], e que para um sistema contínuo ela pode ser dada por:

$$U^{demag} = \frac{\mu_0}{2} \int \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}^d(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2.45)$$

então, substituímos as relações de densidades descritas acima e utilizamos as Eqs. (2.43) e (2.44) para U^{demag} encontrar igual a:

$$\frac{\mu_0}{8\pi} \int d^3r \int d^3r' \left\{ \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - 3 \left(\frac{[\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')][\mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] }{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5} \right) \right\}, \quad (2.46)$$

Redefinindo $(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \boldsymbol{r}$ e $\mu_0/8\pi \equiv \mathbb{C}$, condensamos a notação em (2.46), escrevendo agora um U^{demag^\ddagger}

$$U^{demag^\ddagger} = \mathbb{C} \int d^3r \int d^3r' \left\{ \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{r}}{r^3} - 3 \left(\frac{[\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{r}][\mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \boldsymbol{r}]}{r^5} \right) \right\} \quad (2.47)$$

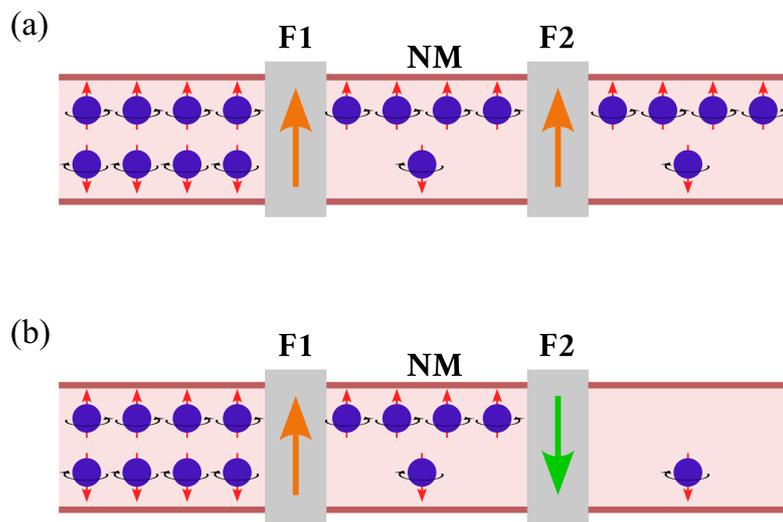
que após algumas manipulações algébricas nos dá exatamente a forma da energia de interação dipolar dada na Eq. (3.22), onde consideramos amostras discretizadas. As duas

expressões, no entanto, apesar de descreverem sistemas diferentes, surgem da consideração dos efeitos microscópicos da interação dipolar.

2.3 CORRENTE ELÉTRICA POLARIZADA EM SPIN

Observe o esquema do tipo **F1/NM/F2** da Fig. (2.15), em que temos um sistema conhecido como válvula de *spin*, que é composto por dois materiais ferromagnéticos (**F1** e **F2**) intermediados por um material não magnético **NM** (neste caso um fio condutor).

Figura 2.15 – Ilustração para um sistema do tipo válvula de *spin*. Em (a) tem-se os dois ferromagnetos com a mesma orientação da magnetização, conferindo uma baixa resistência elétrica; em (b), orientações contrárias de magnetização conferem uma alta resistência elétrica para a corrente polarizada em *spins up*.



Fonte: Autoria própria (2024).

O transporte eletrônico depende do estado de spin do material magnético, portanto, a assimetria das bandas eletrônicas em um metal de transição 3d (material ferromagnético) produz um estado majoritário de excessos de **spins up** (\uparrow) ou **spins down** (\downarrow), o que causa tanto a magnetização do material como também resulta em diferentes condutividades e resistências elétricas, caracterizando inclusive o fenômeno da magneto resistência [8].

O processo de polarização em *spin* ocorre na passagem da interface **F1/NM**. Uma corrente elétrica perpendicular ao plano (CPP) é aplicada em **F1**, que naturalmente possui um estado majoritário de *spins up*, o que permite selecionar os elétrons com a mesma orientação e impedir a passagem dos que tem orientação contrária, gerando zonas de acumulação na interface. Sob uma perspectiva de trajetórias balísticas, podemos imaginar que os elétrons com *spins up* ou **down** ou são transmitidos ou são refletidos. Neste momento a corrente já está polarizada. O material não-magnético (**NM**) não influencia consideravelmente a corrente *spin* polarizada, logo, o segundo ferromagneto irá determinar se ocorre a passagem dos *spins* já selecionados se esta tiver magnetização com orientação

igual a de **F1**, (caso em que há baixa resistência elétrica evidenciado na Fig. (2.15a)); ou então irá impedir a passagem dos *spins* se tiver sua magnetização com orientação contrária a de **F1**, (caso em que há alta resistência elétrica evidenciado na Fig. (2.15b)). Este é o efeito da válvula de *spins*.

Como vemos, a orientação da magnetização líquida de um ferromagneto é capaz de polarizar uma corrente elétrica em *spin*; o efeito contrário, onde uma corrente polarizada é capaz de alterar a magnetização de um material, chama-se de *torque de transferência de spin*, do inglês *spin transfer torque* (STT). Nesta situação, dispõe-se de um sistema análogo ao da Fig. (2.15), estando a camada **F1** fixa, sendo denominada de polarizadora e a **F2** sendo chamada de camada livre, cuja magnetização sofre um torque devido a corrente polarizada.

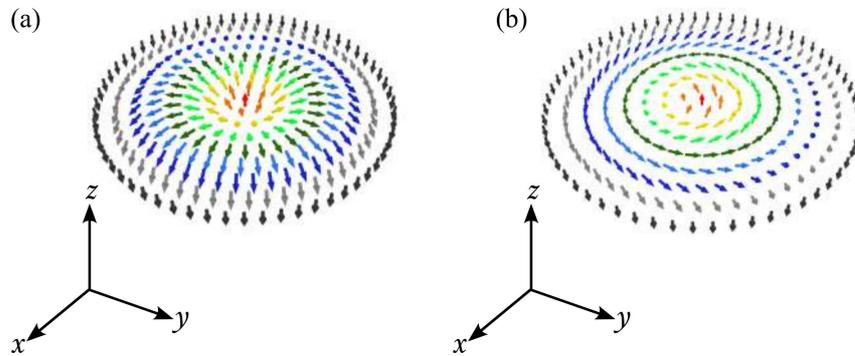
A primeira descrição destes efeitos foram desenvolvidas por Luc Berger em 1984 [9]. Já no ano de 1995, Slonczewski [10] em seu estudo envolvendo interfaces entre materiais magnéticos e metais não-magnéticos verificou que uma corrente de *spins* seria capaz de inverter a magnetização do ferromagneto. Os conceitos que envolvem os efeitos de torque de transferência de *spin* foram refinados a posteriori por Zhang and Li também por Thiaville, que tratam a STT atuante em superfícies não-homogêneas, o que gera padrões de magnetização como vórtices ou paredes de domínio transversais, ou seja, em configurações onde a magnetização é continuamente variável [8, 20]. Maiores detalhes serão discutidos no Cap. 3.

2.4 SKYRMIONS E ANTISKYRMIONS

Os *skyrmions* são estruturas de spin topologicamente estáveis a temperatura ambiente e em sistemas multicamadas, sendo encontrados em sistemas magnéticos onde está presente a interação DM, podendo esta ser tanto induzida como também intrínseca dos materiais [23]. Estas estruturas topológicas foram previstas teoricamente no ano de 1987 por A.N. Bogdanov e D. A. Yablonskiui [30] e observadas experimentalmente no ano de 2009 por Sebastian Mühlbauer *et al.* utilizando campo externo [31], e em 2014 por Bingfeng Miao *et al.* sem o uso de um campo externo [32], ambas em temperatura ambiente.

O aparecimento dessas estruturas magnéticas exóticas se dá devido a competição entre as interações DM, de anisotropia e de troca em materiais em que não há simetria de inversão. Na Fig. (2.16) a seguir temos a exemplificação de *skyrmions* do tipo Néel (a) e do tipo Bloch (b):

Figura 2.16 – Em (a), uma representação de *skyrmion* do tipo Néel, onde a mudança na direção da magnetização ocorre somente em um plano; em (b), uma representação de *skyrmion* do tipo Bloch, onde a direção da magnetização ocorre em todo o espaço. O raio do *skyrmion* (r_{sk}) correspondente é definido como a distância entre o centro da estrutura até a faixa onde os momentos magnéticos não possuem projeção na direção \hat{z} , sendo representados pela cor verde escuro.



Fonte: Autoria própria (2023).

Dizemos que essas são estruturas assimétricas quirais, ou seja, não podem ser sobrepostas a partir de sua própria imagem especular. Aqui, certos estados eletrônicos podem ter comportamentos diferentes devido a quebra de simetria [17]. Um dos exemplos em que há a indução do aparecimento da interação DM é em sistemas multicamadas como nanofitas de Co/Pt (Cobalto-Platina), que têm sido fortemente estudados para o entendimento da dinâmica de *skyrmions*. A partir de uma baixa densidade de aplicação de corrente polarizada em spin, torna-se possível a sua movimentação e estabilização em uma nanofita em temperatura ambiente.

A carga topológica Q (ou invariante topológico), também conhecida como número de *skyrmion* é uma das principais características em sistemas desse tipo, e mede quantas vezes o spin mapeia a esfera unitária [18], sendo definida por

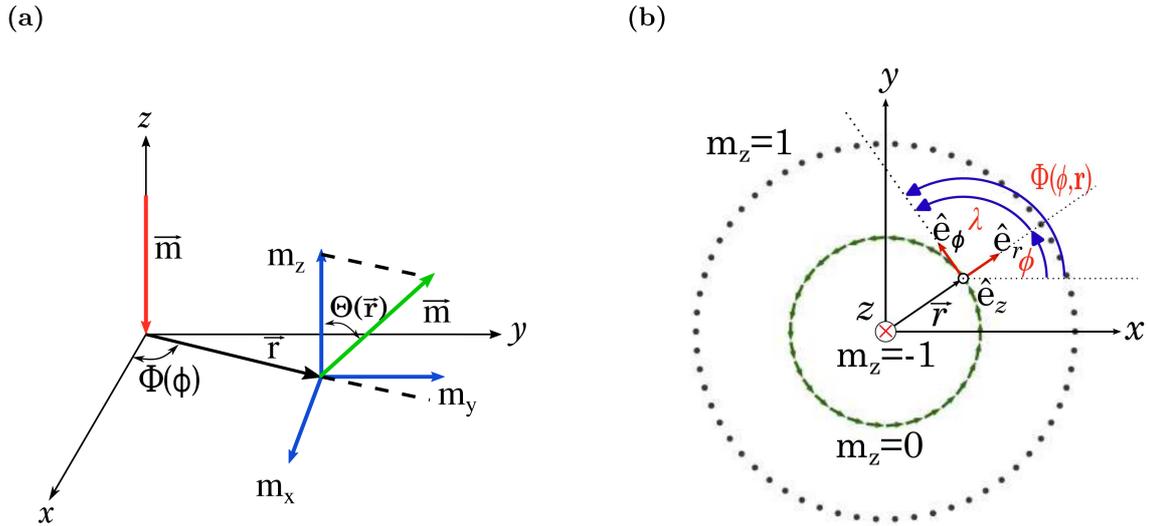
$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})}{\partial y} \right) dx dy. \quad (2.48)$$

Podemos escrever o vetor momento magnético em coordenadas esféricas dependentes espacialmente de coordenadas cilíndricas (m_x, m_y, m_z) como [17]

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}, \phi) = (\cos \Phi(\phi) \sin \Theta(\mathbf{r}), \sin \Phi(\phi) \sin \Theta(\mathbf{r}), \cos \Theta(\mathbf{r})). \quad (2.49)$$

Aqui, Φ e Θ são os ângulos esféricos evidenciados na Fig. (2.17) a seguir:

Figura 2.17 – Em (a), as coordenadas esféricas para o vetor momento magnético e em (b) a representação para um *skyrmion* tipo Bloch, com $Q = 1$, $\nu = 1$ e $\Theta = \pi/2$.

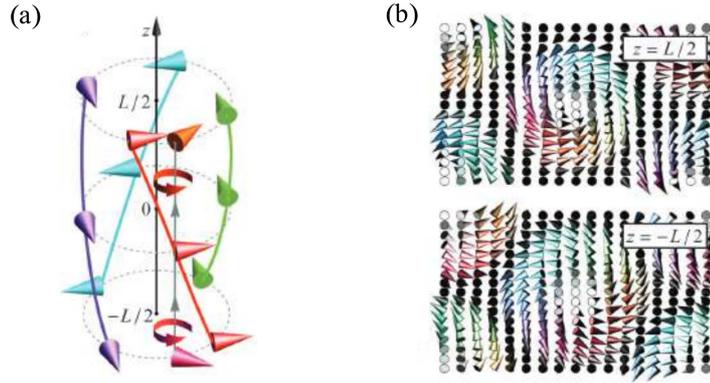


Fonte: Autoria própria (2023).

Conforme estudado na Subsec. 2.2.3, podemos classificar os materiais nas classes C_{nv} , T , O , e D_{2d} . As soluções aceitas para a 1ª classe são do tipo $\Phi = \phi + \lambda$, onde $\lambda = 0, \pi$ o que configuram as DMI's interfaciais, em que são favorecidos as rotações de spins do tipo Néel, onde estes rotacionam do centro até a borda com uma rotação sem inversão ao longo deste caminho, i.e, possuem quiralidade fixa. Nesta classe, o vetor \mathbf{D}_{ij} é ortogonal ao vetor \mathbf{r}_{ij} , como na Fig. (2.11b). Para a 2ª e 3ª são soluções do tipo $\Phi = \phi \pm \pi/2$, em que se é favorecido os spins do tipo Bloch, situação em que estes rotacionam de forma tangencial como uma espiral helicoidal, como na Fig. (2.18a-b). Aqui, o vetor \mathbf{D}_{ij} é paralelo a \mathbf{r}_{ij} , assim como ilustrado na Fig. (2.11c). Para a 4ª classe do tipo $\Phi = -\phi \pm \pi/2$ e $\Phi = -\phi + \lambda$,

em que estruturas do tipo *antiskyrmions* são estabilizadas. Em todos esses casos, o ϕ representa o ângulo entre a projeção da componente \mathbf{m}_i do vetor momento magnético no plano xy e o eixo x [25, 18, 33, 34]. Estes tipos de estrutura são representadas pelos eixos de rotação n -fold das Figs. (2.11d-e). Cabe ressaltar que alterar o sinal do vetor \mathbf{D}_{ij} determina o sentido de rotação da configuração magnética, como veremos no Cap. 4.

Figura 2.18 – *Skyrmions* em sistemas tipo *bulk*, sendo em (a) a modulação cônica quiral de m_r e em (b) as vistas superior e inferior da amostra. Em (c) m_r para as superfícies e centro da amostra.



Fonte: Retiradas de Rybakov, Borisov e Bogdanov (2023) [35].

O vetor \mathbf{r} da Eq. (2.49) é a coordenada polar, $\mathbf{r} = (r \cos \phi, r \sin \phi)$. Com isso, reescrevemos a Eq. (2.48) como:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dr \int_0^{2\pi} d\phi \left(\sin \Theta \frac{\partial \Theta}{\partial r} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) = \frac{1}{4\pi} [\cos \Theta(\mathbf{r})]_0^{+\infty} [\Phi(\phi)]_0^{2\pi} = \mathcal{P} \cdot \nu. \quad (2.50)$$

O símbolo \mathcal{P} é a polaridade do *skyrmion* e pode assumir os valores ± 1 , sendo $+1$ quando em $r = 0$ tem-se o *spin* na direção $+z$ e em $r = \infty$, apontando em $-z$; e -1 nos casos em que apontam na sentido contrário para estes mesmos valores de r . O termo ν é definido como vorticidade e também pode assumir valores ± 1 , sendo $+1$ indicando um *skyrmion* e -1 um *antiskyrmion*, sendo seu valor determinado por: [23, 31].

$$\nu = \frac{1}{2\pi} [\Phi(\phi)]_0^{2\pi} \quad (2.51)$$

Estas configurações são o que impõem as condições de contorno do nosso problema. Em nossas simulações, escolhemos $\cos \Theta(0) = -1$ e $\cos \Theta(\infty) = 1$, o que corresponde a $\mathcal{P} = -1$, sendo a condição em $r \rightarrow \infty$ fixa, o que implica, portanto, que a vorticidade é quem determina o número de *skyrmion* Q ($Q = \nu$). O ângulo esférico azimutal $\Phi(\phi)$ tem a seguinte solução:

$$\Phi(\phi, \mathbf{r}) = \nu \phi + \lambda, \quad (2.52)$$

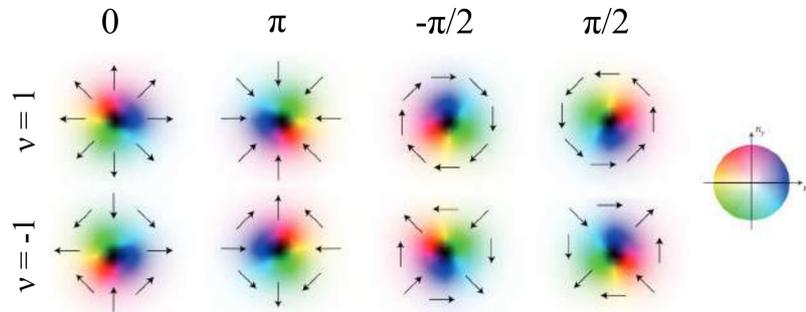
sendo λ a helicidade, cujo sinal depende do sinal de D , que por sua vez depende da estrutura cristalina [18]. A helicidade traz dois tipos de informações: (i) determina se os momentos irão apontar para a borda ou para o centro nos casos de *skyrmions* tipo Néel (*tail-to-tail* ou *head-to-head*); (ii) ou o sentido de rotação de rotação do *skyrmions* do tipo Bloch a depender dos ângulos possíveis aceitos, conforme veremos no Cap. 4 na Sec. 4.1.2.

Aqui cabem duas informações importantes: a carga topológica Q por si só não classifica as estruturas como a *skyrmions* ou *antiskyrmions*, sendo necessário analisar também ν e λ ; existem configurações magnéticas mais estáveis que outras, que embora tenham configurações iniciais distintas convergem para o mesmo estado de equilíbrio, como no caso dos *skyrmions* tipo Néel, ou estados com rotação diferentes, porém energeticamente equivalentes, como *skyrmions* do tipo Bloch e *antiskyrmions*.

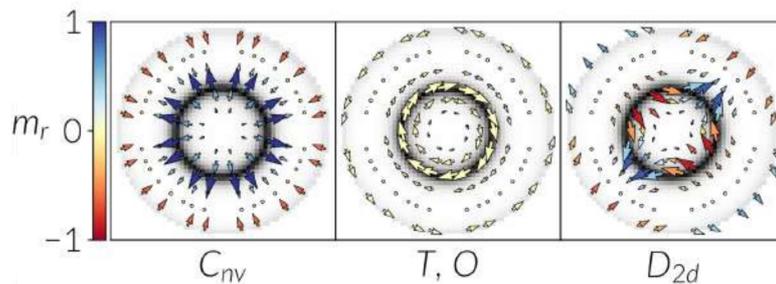
Na Fig. (2.19) a seguir temos exemplos destas estruturas topológicas para diferentes valores de carga topológica, vorticidade e helicidade.

Figura 2.19 – Vista superior de estruturas de *skyrmions* e *antiskyrmions*. Em (a), as configurações iniciais com a cor preta indicando $m_z = -1$ e em (b), as estruturas já estabilizadas a partir dos estados iniciais, onde a faixa escura representa r_{sk} .

(a)



(b)

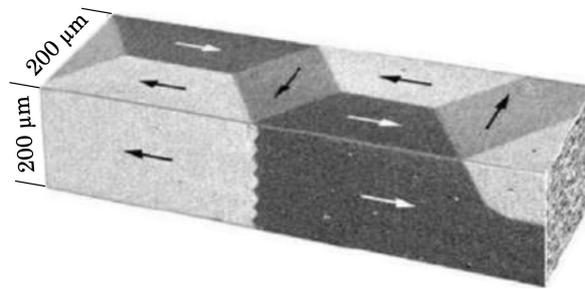


Fonte: Adaptadas de (a) Nagaosa e Tokura (2013) [18] e (b) Córtes-Ortuño (2018) [17].

2.5 VÓRTICES MAGNÉTICOS

Para compreendermos como se dá a classificação dessas estruturas magnéticas, primeiramente devemos conhecer o conceito de domínios magnéticos. Em ferromagnetos, os domínios magnéticos são sub-regiões que apresentam magnetização espontânea (aleatória) em diferentes direções, estando cada uma dessas sub-regiões orientadas aleatoriamente a um valor de magnetização de saturação \mathcal{M}_s [11, 36]. Na Fig. (2.20) temos um exemplo de tal estrutura.

Figura 2.20 – Domínios magnéticos em uma amostra de ferro (Fe). As cores adotadas apenas representam as direções de magnetização.

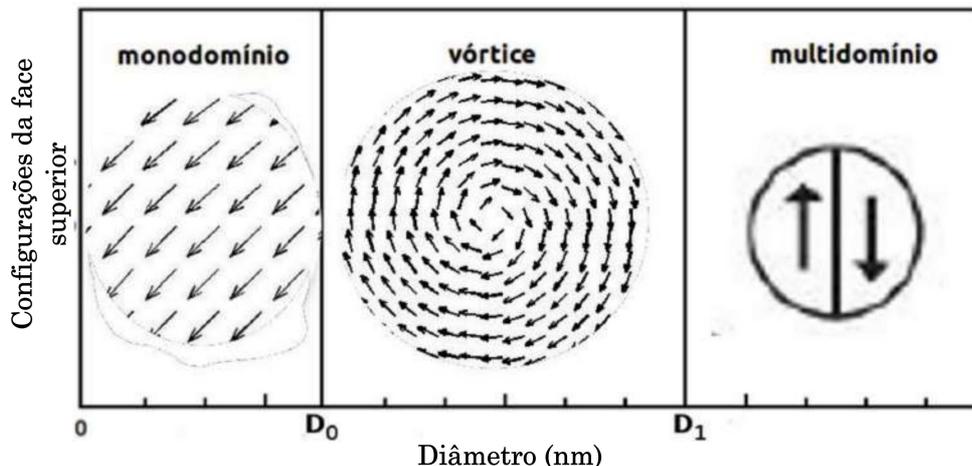


Fonte: Retirada de Alex Hubert e Rudolf Schäfer (2008) [36].

A forma da organização desses domínios se dá devido às diferentes interações presentes no material ferromagnético como anisotropias, energias de troca e também a energia dipolar. Para minimizar a energia magnetostática do sistema, ocorre o surgimento de vários domínios em um ferromagneto (ao que chamamos de *estruturas multidomínio*), o que está associado às dimensões de nanopartículas [12].

Os chamados vórtices magnéticos são estruturas com formato circular tridimensional de momentos magnéticos, podendo ser associados à rotação de um campo vetorial em torno de um eixo convencional. São um estado intermediário entre uma estrutura *monodomínio* e uma *multidomínio*. Observe a Fig. (2.21):

Figura 2.21 – Configurações de domínios magnéticos em um nanodisco. Na primeira ilustração a esquerda temos uma estrutura multidomínios. No centro, um estado intermediário, conhecido como vórtice magnético. Mais a direita, uma estrutura multidomínio. O valor do diâmetro corresponde aos valores críticos onde tais configurações são mais estáveis energeticamente.



Fonte: Adaptado de José H. Silva (2011) [37].

Os momentos magnéticos que compõem um vórtice estão, em sua maioria, confinados no plano do nanodisco, mas próximo ao seu centro, (**núcleo do vórtice**), uma parcela deles desenvolve componentes fora do plano, tornando-se cada vez mais acentuados na medida em que se aproximam mais do centro. Na Fig. (2.22) a seguir temos uma visão lateral do cuboide de Permalloy-79 no estado inicial utilizado em nossas simulações.

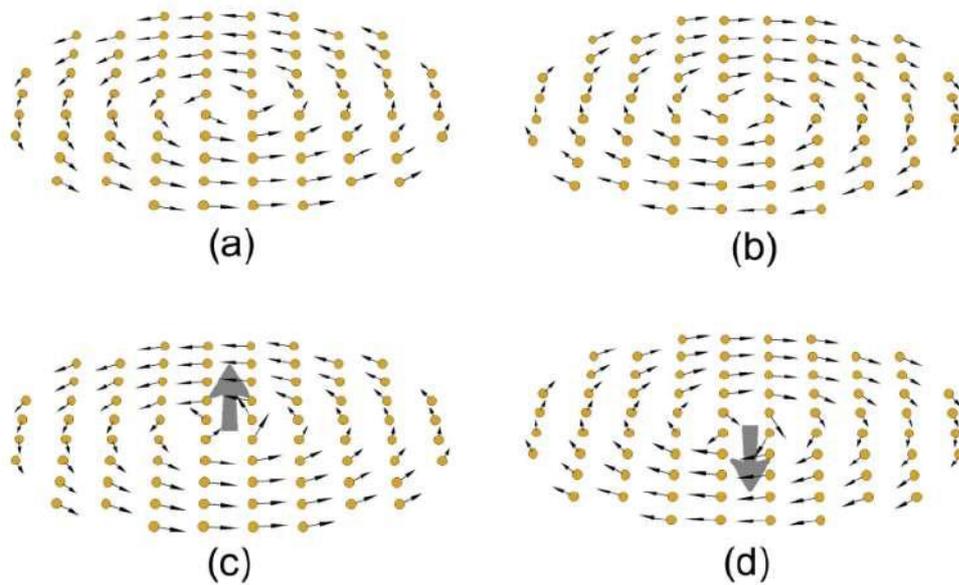
Figura 2.22 – Vista lateral de uma das camadas do cuboide de Permalloy-79. Observamos uma tendência dos momentos magnéticos se alinharem na direção fora do plano no centro do vórtice. Isto é um efeito natural do sistema que busca minimizar a energia local.



Fonte: Autoria própria (2024).

Os vórtices magnéticos são munidos de duas propriedades: a **quiralidade**, que nos informa qual o sentido de rotação da estrutura em torno de um eixo convencional (geralmente eixo z) e a **polaridade**, que nos indica o sentido da componente da magnetização fora do plano em relação ao eixo convencional. Por serem propriedades independentes, temos quatro combinações possíveis, como podemos ver na Fig. (2.23) a seguir:

Figura 2.23 – As quatro combinações possíveis a partir dos valores de polaridade e quiralidade. Nas figuras (a) e (b) temos uma diferença quanto ao sentido de rotação (quiralidade) e nas figuras (c) e (d), quanto ao sentido dos momentos magnéticos no núcleo do vórtice (polaridade), representado pela seta em cinza.



Fonte: Retirado de Júlio C. S. Rocha (2011) [38].

Devido a essa independência, diz-se que um estado de vórtice é quadruplamente degenerado, o que em termos de gravação e leitura de dados nos permite (ao menos em teoria) armazenar 2 bits de informações em um nanodisco, um bit na **polaridade** e outro bit na **quiralidade** [11].

Capítulo 3

METODOLOGIA

No Cap. 2 definimos algumas relações importantes no contexto do magnetismo, como magnetização, momentos de dipolo magnético, correntes de magnetização, dentre outros. No capítulo que se segue, discutiremos sobre a equação de LLG e falaremos sobre a metodologia utilizada no que diz respeito a simulação micromagnética utilizando os conceitos já estudados no capítulo anterior.

3.1 DINÂMICA DE SPINS: EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT

Sabemos da mecânica clássica que um corpo rígido em rotação sofre um torque que é dado pela variação de seu momento angular no tempo (lado esquerdo da Eq. (3.1)), mas uma reinterpretação desta pode ser feita no contexto da mecânica quântica, em que \mathbf{L} é tomado como operador de *spin* \mathbf{S} (lado direito da Eq. (3.1)).

$$\underbrace{\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T}}_{\text{Mecânica Clássica}} \quad \Longrightarrow \quad \underbrace{\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \mathbf{T}}_{\text{Mecânica Quântica}} \quad (3.1)$$

É sabido também que os momentos magnéticos de uma amostra quando submetidos a um campo indução magnética externo (\mathbf{B}^{ext}) sofrem precessão em torno deste, o que gera neles um torque dado pela Eq. (3.2) a seguir:

$$\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}^{ext}. \quad (3.2)$$

Porém, os momentos magnéticos não estão limitados somente ao torque gerado por um campo externo, podendo agir sobre ele torques provenientes de outras fontes [23]. Tendo isto em mente, podemos substituir \mathbf{B}^{ext} por \mathbf{B}_i^{eff} , que é o *Campo Efetivo*, ao qual reúne todos os campos efetivos locais a depender dos tipos de interação presente no objeto de estudo. Finalmente, pela relação da Eq. (2.11), e substituindo a (3.2) com esta generalização em (3.1), temos a equação de movimento para o momento magnético de spin, evidenciado na Eq. (3.3) a seguir:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\mathbf{m} \times \mathbf{B}_i^{eff}. \quad (3.3)$$

Nesta referida equação, não existe a presença de termos dissipativos que permitam retirar energia do sistema e então fazer a direção da magnetização coincidir com a direção do campo \mathbf{B}_i^{eff} , logo, esta é uma forma bastante simplista de descrever tal sistema, uma

vez que observa-se macroscopicamente os efeitos de uma precessão com dissipação. A partir disto, estendemos a teoria trazendo à luz as equações de Landau-Lifshitz-Gilbert.

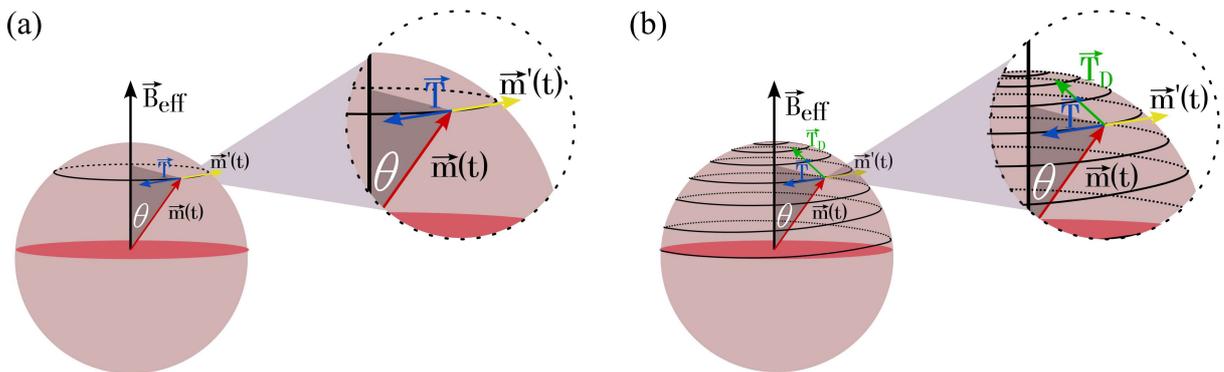
Gilbert [39] propôs um termo de torque dissipativo (\mathbf{T}_d), que engloba α , conhecido como ‘*damping*’ ou parâmetro de amortecimento de Gilbert. O termo é adicionado fenomenologicamente (a partir de uma observação real de tal efeito de amortecimento) a (3.3), o que nos dá a forma implícita da equação de LLG na (3.4a). Na Eq. (3.4b) temos a forma explícita da equação de LLG, cuja demonstração pode ser encontrada no Apêndice B, que utiliza a conservação de m , demonstrada no Apêndice A.

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma \mathbf{m} \times \mathbf{B}_i^{eff} + \alpha \frac{1}{|\mathbf{m}|} \left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right), \quad (3.4a)$$

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2)} \left[\mathbf{m} \times \mathbf{B}_i^{eff} + \frac{\alpha}{|\mathbf{m}|} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}_i^{eff}) \right]. \quad (3.4b)$$

A Eq. (3.3) descreve um sistema conservativo, e pode ser vista como um caso específico das (3.4a) ou (3.4b) para o caso em que $\alpha = 0$ e o ângulo θ entre \mathbf{m} e \mathbf{B}_i^{eff} é constante, o que leva também a precessão invariável do momento magnético em torno do *Campo Efetivo*, tal como na Fig. (3.1a). Para os casos da Fig. (3.1b), temos um $\alpha > 0$, onde θ entre \mathbf{m} e \mathbf{B}_i^{eff} varia, levando a um amortecimento do sistema.

Figura 3.1 – Em (a), temos o caso de sistema não-amortecido ($\alpha = 0$); em (b), um ilustração de um sistema amortecido, ($\alpha > 0$).

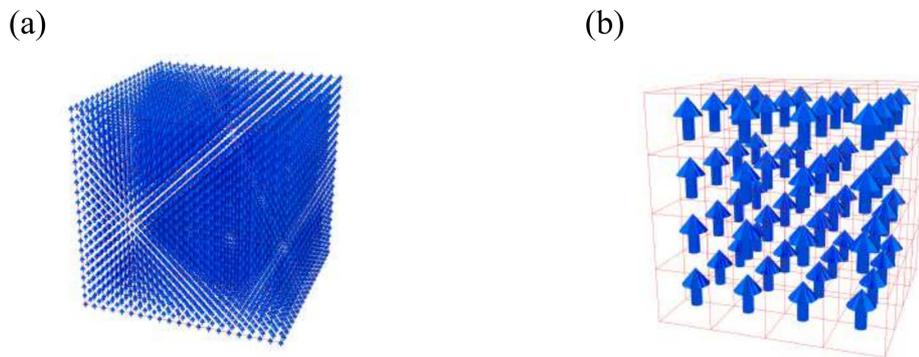


Fonte: Autoria própria (2024).

3.2 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

Um material magnético pode ser descrito por um campo de vetores clássicos $\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ e possui um número gigantesco de momentos magnéticos, (conforme representado pela Fig. (3.2a)), com uma escala de comprimento entre $10 \text{ nm} - 100 \text{ }\mu\text{m}$, o que torna mais viável a descrição das interações entre estes momentos em uma abordagem semi-clássica. Do ponto de vista computacional, é impraticável realizar o cálculo envolvendo todos eles, tornando mais conveniente a reformulação deste sistema em N células cúbicas de trabalho com arestas de comprimento a , – ao qual denominamos parâmetro de rede –, dotadas das mesmas propriedades magnéticas do sistema real.

Figura 3.2 – Em (a) temos a representação de um sistema magnético real, com vários momentos por célula, já em (b) temos uma média desses momentos magnéticos.



Fonte: Autoria própria (2023).

O novo volume redefinido indica uma média da magnetização de uma célula de trabalho discretizada, portanto, este deve ser pequeno o suficiente para que os momentos magnéticos em seu interior estejam todos alinhados em uma mesma direção e grande o suficiente para que, em confronto com as distâncias interatômicas, englobe um número considerável de momentos magnéticos (veja a Fig. (3.2b)). O tamanho total L do nosso sistema é então dado por

$$L = N \cdot a \quad (3.5)$$

onde N é o número total de células em uma direção e a o parâmetro de rede.

No contexto da simulação micromagnética, é importante que o parâmetro de discretização de rede a esteja abaixo de três comprimentos característicos do material, a saber: o comprimento de troca ℓ_{ex} (3.6a); o comprimento característico da interação de DM (3.6b) e da largura da Parede de Domínio do tipo Bloch (3.6c), definidos a seguir:

$$\ell_{ex} = \sqrt{\frac{2\mathcal{A}_{ex}}{\mu_0 \mathcal{M}_s^2}}, \quad (3.6a)$$

$$\zeta = \frac{2\mathcal{A}_{ex}}{D}, \quad (3.6b)$$

$$\Delta = \sqrt{\frac{\mathcal{A}_{ex}}{K_{eff}}}, \quad (3.6c)$$

em que \mathcal{A}_{ex} representa a constante de rigidez de troca (ver Eq. (3.18)), μ_0 é permeabilidade magnética no vácuo; \mathcal{M}_s a magnetização de saturação; D a constante de interação de DM (ver Eq. (3.24)) e K_{eff} é a anisotropia efetiva, que é uma aproximação em sistemas do tipo nanofita planar onde não consideramos a interação dipolar explicitamente [23]. Sua expressão é dada por [34]:

$$K_{eff} = K_u - \frac{\mu_0 \mathcal{M}_s^2}{2} \quad (3.7)$$

onde K_u é o termo de anisotropia uniaxial.

Atender a esses parâmetros garante a saturação dos momentos magnéticos dentro da célula de trabalho, cujo volume é $V_{cel} = \alpha^3$ com a magnetização local sendo dada por

$$\mathbf{M}_i = \frac{1}{V_{cel}} \sum_j^N \mathbf{m}_j = \frac{1}{V_{cel}} \mathbf{m}_i. \quad (3.8)$$

Para o material Permalloy-79, uma única célula pode conter até $1,0 \times 10^4$ momentos magnéticos atômicos representado por um único momento magnético celular, o que garante uma redução significativa de cálculo computacional se considerarmos as interações entre as células ao invés de todos os momentos magnéticos na amostra [12]. Considerando que todos os momentos magnéticos estão saturados no valor de \mathcal{M}_s de um dado material, então podemos reescrever a magnetização \mathbf{M}_i como:

$$\mathbf{M}_i = \mathcal{M}_s \hat{m}_i, \quad (3.9)$$

Ao relacionarmos a Eq. (3.9) a (3.8), podemos escrever o vetor momento magnético como se segue:

$$\mathbf{m}_i = |\mathbf{m}_i| \hat{m}_i = |M_s \hat{m}_i V_{cel}| \hat{m}_i = |\hat{m}_i| \underbrace{(V_{cel} M_s)}_{= m_{cel}} \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i,$$

$$\boxed{\mathbf{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i} \quad (3.10)$$

sendo m_{cel} o módulo do momento magnético em cada célula de trabalho.

3.3 LLG ADICIONADA DO TERMO DE CORRENTE POLARIZADA EM *SPIN*

Até agora, a LLG que descrevemos não leva em conta a discretização descrita acima e também não considera a aplicação de correntes polarizadas em spin. Esta corrente é capaz de gerar um torque na magnetização local de um ferromagneto devido a interação desta com os *spins* dos elétrons de condução. Este é um efeito devido a conservação do momento angular de *spin*. E efeito de transferência de torque tem sido convencionalmente modelado por uma hamiltoniana de troca do tipo “s - d”, (ver Eq. 3.11) onde os *spins* dos elétrons de condução (\mathbf{s}) interagem com os spins dos elétrons localizados (\mathbf{S}) [11, 40].

$$H = -J_{ex}\mathbf{s} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.11)$$

em que J_{ex} é a constante de acoplamento de troca entre eles. As grandezas \mathbf{s} e \mathbf{S} são adimensionais. O torque gerado na magnetização local a partir desse processo é dado pela Eq. (3.12) a seguir [11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_s = & -\frac{\mu_B P}{|e|\mathcal{M}_s^3(\xi^2 + 1)}\mathbf{M}_i \times \left[\mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla)\mathbf{M}_i \right] \\ & - \frac{\xi\mu_B P}{e\mathcal{M}_s^2(\xi^2 + 1)}\mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla)\mathbf{M}_i, \end{aligned} \quad (3.12)$$

sendo P a polarização da corrente de *spin* e \mathbf{j}_e a densidade de corrente elétrica. O termo ξ é a razão entre τ_{ex} (tempo de relaxação de troca entre dois *spins*) e τ_{sf} (tempo de relaxação *spin-flip*). Tal razão mede o grau de não-adiabacidade, que representam efeitos não instantâneos da corrente elétrica nos spins magnéticos [25, 41, 40].

A Equação completa da LLG em sua forma implícita e com os termos de corrente é dada então por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} = & -\gamma\mathbf{M}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} + \frac{\alpha}{\mathcal{M}_s}\mathbf{M}_i \times \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} \\ & - \frac{b_j}{\mathcal{M}_s^2}\mathbf{M}_i \times [\mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla)\mathbf{M}_i] \\ & - \xi \frac{b_j}{\mathcal{M}_s}\mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla)\mathbf{M}_i, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde $b_j = \frac{P\mu_B}{e\mathcal{M}_s(1 + \xi^2)}$ é a constante de acoplamento [42]. O subscrito i aqui representa o sítio da rede.

Já a forma explícita da LLG (que de fato é implementada no programa) é dada pela Eq. (3.14) a seguir [42]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} &= -\gamma' \mathbf{M}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} - \frac{\alpha \gamma'}{\mathcal{M}_s} \mathbf{M}_i \times (\mathbf{M}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) \\
&\quad - \frac{b'_j}{\mathcal{M}_s^2} (1 + \alpha \xi) \mathbf{M}_i \times [\mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \mathbf{M}_i] \\
&\quad - \frac{b'_j}{\mathcal{M}_s} (\xi - \alpha) \mathbf{M}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \mathbf{M}_i,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

onde γ' agora é uma nova constante que leva em conta tanto γ como α , sendo dada pela Eq. (3.15a) e b'_j agora é renormalizada de acordo com a Eq. (3.15b):

$$\gamma' = \frac{\gamma}{(1 + \alpha^2)}, \tag{3.15a}$$

$$b'_j = \frac{b_j}{(1 + \alpha^2)}. \tag{3.15b}$$

Em nosso caso especial, fizemos a aplicação da corrente polarizada apenas da direção x , portanto, $\mathbf{j} = |j_e| \hat{x}$. Com isso, a equação da LLG dada pela (3.13) (em sua forma explícita) fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} &= -\gamma \mathbf{M}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} + \frac{\alpha}{\mathcal{M}_s} \mathbf{M}_i \times \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} \\
&\quad - \frac{v_x}{\mathcal{M}_s^2} \mathbf{M}_i \times \left(\mathbf{M}_i \times \frac{d\mathbf{M}_i}{dx} \right) - \frac{c_j}{\mathcal{M}_s} \mathbf{M}_i \times \frac{d\mathbf{M}_i}{dx}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

onde $v_x = b_j j_e$ leva em conta o movimento dos elétrons de condução, sendo responsável pelos processos adiabáticos [43] e $c_x = v_x \xi$ representa os efeitos não-adiabáticos, sendo responsável pela velocidade terminal da estrutura magnética (*skyrmions*, *antiskyrmions*, vórtices e paredes de domínio) quando sujeitas a aplicação de corrente [11, 40]. Ambos os termos possuem dimensão de velocidade no SI.

No entanto, para a aplicação em nosso programa precisamos da forma explícita da LLG. Vamos escrever agora a expressão da equação de movimento a partir do vetor de magnetização \mathbf{m}_i . Para este caso especial de aplicação de corrente apenas na direção \hat{x} , teremos que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} &= -\gamma' \left\{ \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} - \frac{\alpha}{m_i} \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) \right\} - \frac{\alpha v'_x}{m_i^3} \mathbf{m}_i \times \left[\mathbf{m}_i \times \left(\mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{dx} \right) \right] \\
&\quad - \frac{1}{(1 + \alpha^2)} \left[\left(\frac{\alpha c_x + v_x}{m_i^2} \right) \mathbf{m}_i \times \left(\mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{dx} \right) \right] - \frac{c'_x}{m_i} \mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{dx}.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

onde $v'_x = \frac{v_x}{(1 + \alpha^2)}$ e $c'_x = \frac{c_x}{(1 + \alpha^2)}$. Já o termo $\frac{d\mathbf{m}_i}{dx}$ avalia a variação espacial da magnetização no sítio i .

3.4 HAMILTONIANAS MICROMAGNÉTICAS

Até agora, redefinimos o sistema em células de trabalho, isso exige que reescrevamos as constantes de interação descritas no Cap. 2 em termos do parâmetro de rede a . Sendo assim, a energia de interação de troca (Eq. (2.28)) fica reescrita da seguinte maneira:

$$\boxed{U^{exchange} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j} \quad (3.18)$$

em que agora $J_{cel} = 2a\mathcal{A}_{ex}$.

Para a interação dipolar, vamos escrever o vetor momento magnético em termos de seu versor e dividir ambos os lados da Eq. (2.29) pelo fator de discretização a . Isso nos fornece o seguinte:

$$U^{dipolar} = -\frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N m_i m_j \left[\frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (3.19)$$

Tomando novamente a consideração de que o módulo de cada um dos momentos de dipolo magnético permanece constante na rede, ou seja,

$$m_i = \frac{\mathbf{M}_i}{\hat{m}_i} V_{cel} = m, \quad (3.20)$$

onde $m = V\mathcal{M}_s = a^3\mathcal{M}_s$ (sendo \mathcal{M}_s a magnetização de saturação), podemos escrever:

$$U^{dipolar} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi a^3} a^6 \mathcal{M}_s^2 \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (3.21)$$

Reorganizando a Eq. (3.21) acima ficamos com:

$$\boxed{U^{dipolar} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N M_{cel} \left[\frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right]} \quad (3.22)$$

Em que definimos:

$$M_{cel} = \left(\frac{\mu_0 a^3}{4\pi} \right) \mathcal{M}_s^2, \quad (3.23)$$

que é um parâmetro característico da interação dipolar que possui dimensão de energia. Podemos verificar isto ao analisarmos as dimensões já conhecidas das grandezas envolvidas na Eq. (3.23) em unidades do S.I. ($[\mu_0] = \text{T} \cdot \text{m}/\text{A}$; $[a] = \text{m}$; $[\mathcal{M}_s] = \text{A}/\text{m}$; $[T] = \text{J}/\text{A} \cdot \text{m}^2$).

A equação que representa a energia de interação de Dzyaloshinskii-Moriya (2.36) será reescrita (em sua forma geral) como se segue:

$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N D_{cel} [\hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j)] \quad (3.24)$$

em que $D_{cel} = \alpha^2 \mathcal{D}$, sendo \mathcal{D} a intensidade do vetor de DM.

O fator \mathcal{Z} da Eq. (2.41) para a interação de Zeeman será reescrito a partir da Eq. (3.8), o que nos dá $m = \mathcal{M}_s V_{cel}$, assim:

$$Z_{cel} = \mu_0 \mathcal{M}_s^2 \alpha^3, \quad (3.25)$$

e a (2.41) fica:

$$U^{Zeeman} = -Z_{cel} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext} \quad (3.26)$$

Por fim, iremos renormalizar a energia para a interação de anisotropia magneto-cristalina evidenciada na Eq. (2.42). O termo K_i será escrito como $K_i = V_{cel} \mathcal{K}_u$, ou $K_{cel} = \alpha^3 \mathcal{K}_u$ sendo \mathcal{K}_u a constante de anisotropia característica do material. O versor \hat{n} representa a direção de eixo fácil, assim.

$$U^{anis} = -\sum_{i=1}^N K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (3.27)$$

Uma análise dimensional nos mostra que J_{cel} , M_{cel} , D_{cel} , Z_{cel} e K_{cel} possuem dimensão de energia. Nas simulações que foram realizadas neste trabalho, os parâmetros de interação \mathcal{A}_{ex} , \mathcal{D} , \mathcal{K}_u e \mathcal{M}_s são alterados, assim como as dimensões do parâmetro de rede α do sistema em questão e se necessário a adição de uma corrente polarizada em *spin*. Maiores detalhes serão vistos no Cap. 4.

3.5 CAMPO EFETIVO LOCAL

Neste trabalho estudamos um problema-padrão no micromagnetismo que inclui o termo de interação DM e o problema-padrão #5, que busca analisar a dinâmica de vórtices magnéticos devido a presença de corrente polarizada em *spin*, logo, devemos definir uma Hamiltoniana para cada um dos casos, que nada mais é do que a soma de cada uma das energias que estão presentes no sistema devido às interações magnéticas.

Na determinação da expressão da LLG, incluímos o termo de campo efetivo \mathbf{B}_i^{eff} , que é o termo resultante da interação entre todos os momentos da rede, que depende da posição de cada sítio. Por definição, \mathbf{B}_i^{eff} é dado como a derivada das interações presentes

na Hamiltoniana em relação a um momento magnético \mathbf{m}_i num ponto i , e seu cálculo serve para analisar como a energia do sistema varia em relação a magnetização local neste ponto, contribuindo assim apenas para a derivada com respeito a essa posição específica no sistema, no entanto, também leva em conta as interações de outros sítios j interagindo com i . Temos então que:

$$\mathbf{B}_i^{eff} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{m}_i} = -\frac{1}{m_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i} \quad (3.28)$$

Para escrevermos os campos efetivos locais, devemos organizar os termos da nossa Hamiltoniana de energia entre fatores dimensionais e adimensionais, assim, tomando as Eqs. (3.18), (3.23), (3.24), (3.26) e (3.27) da seção 3.2, temos:

$$U^{exchange} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = \frac{J_{cel}}{2} U^{exchange'}, \quad (3.29a)$$

$$U^{dipolar} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N M_{cel} \left[\frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] = \frac{M_{cel}}{2} U^{dipolar'}, \quad (3.29b)$$

$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N D_{cel} [\hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j)] = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N D_{cel} [\hat{m}_i \cdot (\hat{m}_i \times \hat{d}_{ij})] = \frac{D_{cel}}{2} U^{DM'}, \quad (3.29c)$$

$$U^{Zeeman} = -Z_{cel} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext} = Z_{cel} U^{Zeeman'}, \quad (3.29d)$$

$$U^{anis} = -\sum_{i=1}^N K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 = K_{cel} U^{anis'}. \quad (3.29e)$$

Agora, podemos relacionar nosso campo efetivo local em termos de um campo efetivo local adimensional (Eq. (3.30)), cuja constante de proporcionalidade será a razão entre uma constante de energia e m_i (igual a $a^3 \mathcal{M}_s$), o que nos fornece dimensão de Tesla:

$$\mathbf{B}_i^{eff} \propto \mathbf{b}_i^{eff}, \quad (3.30)$$

onde \mathbf{b}_i^{eff} é a derivada em relação a \hat{m}_i do termo adimensional de energia. Desta forma, os campos efetivos locais para cada um dos termos de energia serão dados por:

$$\mathbf{B}_i^{exchange} = \frac{J_{cel}}{|m_i|} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \hat{m}_j, \quad (3.31a)$$

$$\mathbf{B}_i^{dip} = \frac{\mathcal{M}_s^2}{2|m_i|} \left(\frac{\mu_0 a^3}{4\pi} \right) \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right], \quad (3.31b)$$

$$\mathbf{B}_i^{DM} = \frac{D_{cel}}{|m_i|} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_j \times \hat{d}_{ij}), \quad (3.31c)$$

$$\mathbf{B}_i^{Zeeman} = \frac{Z_{cel}}{|m_i|} \mathbf{h}_i^{ext}, \quad (3.31d)$$

$$\mathbf{B}_i^{anis} = 2 \frac{K_{cel}}{|m_i|} (\hat{m}_i \cdot \hat{n}). \quad (3.31e)$$

Aqui vale salientar que para determinar a Eq. (3.31c), utilizamos na Eq. (3.29c) a propriedade vetorial $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A})$. Ressaltamos ainda que nas Eqs. (3.31d) e (3.31e) retiramos o somatório por se tratar de interação de apenas um único sítio i .

3.5.1 Hamiltoniana e Campo Efetivo com interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Nesta parte das nossas simulações, não consideramos a dinâmica do sistema, ou seja, somente analisamos configurações magnéticas estáveis, onde os *spins* são fixados e interagem entre si até atingir uma configuração energeticamente favorável, portanto, não houve aplicação de corrente para este caso. Estudamos um material artificial tal como a metodologia proposta por David Cortés-Ortuño *et al.* [17] sugere. Aqui consideramos as interações de troca; Dzyaloshinskii-Moriya; anisotropia uniaxial e em um dos casos, a interação com um campo externo de Zeeman. A Hamiltoniana para o nosso sistema é então dada pelos seguintes termos de energia:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - Z_{cell} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \mathbf{h}_i^{ext} \\ & - \frac{D_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [\hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j)] - K_{cel} \sum_{i=1}^N (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2, \end{aligned} \quad (3.32)$$

sendo o campo efetivo equivalente dado por:

$$\mathbf{B}_i^{eff} = \frac{1}{\alpha^3 \mathcal{M}_s} \left\{ \frac{J_{cel}}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \hat{m}_j + D_{cel} \sum_{\langle i,j \rangle} [(\hat{d}_{ij} \cdot \hat{m}_i) \hat{m}_j - (\hat{d}_{ij} \cdot \hat{m}_j) \hat{m}_i] \right. \\ \left. + Z_{cell} \mathbf{h}_i^{ext} + 2K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{z}) \right\} \quad (3.33)$$

3.5.2 Hamiltoniana e Campo Efetivo do problema-padrão #5 com corrente polarizada em *spin*

Nesta parte da presente dissertação analisamos a dinâmica de vórtices magnéticos a partir da aplicação de uma corrente polarizada em *spin*. O material estudado foi o Permalloy-79, e seguimos a metodologia de Najafi *et al.* [20]. Consideramos apenas a interação de troca e dipolar uma vez que o material é isotrópico. Não houve aplicação de campos externos. A Hamiltoniana micromagnética que modela nosso problema é a seguinte:

$$\mathcal{H} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{M_{cel}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \left[\frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/\alpha)^3} \right], \quad (3.34)$$

onde o campo efetivo local equivalente é dado por:

$$\mathbf{B}_i^{eff} = \frac{1}{\omega^3 \mathcal{M}_s} \left\{ \frac{J_{cel}}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \hat{m}_j + \frac{\mathcal{M}_s^2}{2} \left(\frac{\mu_0 a^3}{4\pi} \right) \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (3.35)$$

3.6 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DA LLG MICROMAGNÉTICA

Os métodos de integração consistem em resolver uma Equação Diferencial Ordinária dadas as condições iniciais do problema. Em nosso trabalho, utilizamos o método de Runge-Kutta de 1ª ordem (método de Euler) e Adams-Bashforth (preditor). A equação que desejamos resolver é do tipo $h(y, t)$ e pode ser representada genericamente como se segue (os índices a e i representam as coordenadas espaciais e o sítio, respectivamente):

$$\frac{d\mathbf{m}_i^a}{dt} = \vec{G}(\mathbf{m}_i^a). \quad (3.36)$$

Ao reescrevermos a equação acima para cada uma das componentes espaciais, encontramos que:

$$\frac{d\mathbf{m}_i^x}{dt} = \vec{G}(\mathbf{m}_i^x) = \mathbf{g}^x(\mathbf{m}^x, \mathbf{m}^y, \mathbf{m}^z, t), \quad (3.37a)$$

$$\frac{d\mathbf{m}_i^y}{dt} = \vec{G}(\mathbf{m}_i^y) = \mathbf{g}^y(\mathbf{m}^x, \mathbf{m}^y, \mathbf{m}^z, t), \quad (3.37b)$$

$$\frac{d\mathbf{m}_i^z}{dt} = \vec{G}(\mathbf{m}_i^z) = \mathbf{g}^z(\mathbf{m}^x, \mathbf{m}^y, \mathbf{m}^z, t). \quad (3.37c)$$

A LLG tem em sua estrutura os vetores \mathbf{m}_i^a e campo efetivo locais \mathbf{B}_i^{eff} , que tem \mathbf{m}_i^a como seus componentes vetoriais. A estrutura de nossas EDO's implicam na necessidade da definição de $3N$ condições iniciais, que são associadas a cada um dos momentos magnéticos discretizados na rede. Assim sendo, dada uma configuração da magnetização no tempo $t_0 = 0$, nosso objetivo consiste em determinar como as componentes da magnetização evoluem em razão dos campos efetivos locais sob a ação de um fator de amortecimento no tempo $t_1 = t_0 + \Delta t$, em que Δt é o passo dado na integração numérica.

3.6.1 Método de Euler (Runge-Kutta de 1ª ordem)

O Método de Euler é um método de passo simples, o que significa que o próximo ponto da $h(y, t)$ só dependerá do ponto imediatamente anterior, e, por ser de primeira ordem, apresenta uma precisão local em $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, sendo conhecido também como um método de Taylor truncado na primeira derivada. O próximo ponto da função integrada é dado no ponto $t_1 = t_0 + \Delta t$ e envolve a seguinte estrutura:

$$y_1 = y_0 + g(y_0, t_0)\Delta t. \quad (3.38)$$

onde $g(y_0, t_0) = k$, que corresponde a inclinação de uma reta tangente ao ponto inicial definido pelas condições iniciais do problema.

Nosso programa utiliza o método de Euler apenas para coletar os quatro primeiros pontos necessários para dar início ao método de integração principal utilizado, Adams-Bashforth, que é um método preditor, que será brevemente discutido na próxima subseção.

3.6.2 Método de Adams-Bashforth (preditor)

Este é um método de quarta ordem, porém de passos múltiplos, em que o próximo ponto a ser determinado é dado pelos valores da função $h(y, t)$ tomados a partir de 4 passos anteriores obtidos em Euler. Sua forma é a seguinte:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{24} (55h_n - 59h_{n-1} + 37h_{n-2} - 9h_{n-3}), \quad \text{com } n \geq 3. \quad (3.39)$$

O valor da função h_{n-3} é determinado utilizando-se as condições iniciais, ou seja, é o valor da função em $h(y_0, t_0)$, assim, seguindo esta lógica, h_{n-2} , h_{n-1} e h_n correspondem aos valores da $h(y, t)$ no segundo, terceiro e quarto passos do RK1, respectivamente.

O método de Adams-Bashforth é bem mais rápido que Runge-Kutta, uma vez que não precisamos calcular os valores de k a cada iteração, pois os valores só são atualizados com base nos valores iniciais de f_0, f_1, f_2 e f_3 calculados uma única vez no método de Euler.

Nas situações em que só estamos considerando interações entre primeiros vizinhos (troca e DMI) em um sistema magnético, o método de Euler já seria suficientemente rápido (porém nem tão preciso) no cálculo do campo efetivo, no entanto, ao considerarmos a interação dipolar, este cálculo torna-se bem mais demorado, exigindo um método mais robusto, o que justifica tal implementação.

Capítulo 4

RESULTADOS

Neste capítulo iremos descrever o caso estático no estudo de *skyrmions* sem aplicação de corrente para analisar os efeitos da interação de Dzyaloshinskii-Moriya; e também trataremos do estudo dinâmico em vórtices magnéticos no problema padrão #5 a partir da aplicação de uma corrente polarizada em *spin*. Aqui é importante destacar que ao nos referirmos a **tempo útil de simulação**, estamos falando sobre tempo de máquina, ou seja, o quanto o computador demorou para realizar todas as operações; e por **tempo de simulação** entende-se que como o tempo necessário para realizar suas dinâmicas dado um sistema real com tais parâmetros. Esta última operação é feita tomando-se a razão entre número total de passos e número de passos para escrever e multiplicando-a pelo passo no tempo Δt .

4.1 ESTUDO ESTÁTICO DE *SKYRMIONS* E *ANTISKYRMIONS*

4.1.1 Caso unidimensional: inclinação da borda

Neste primeiro caso de estudo nos baseamos nos trabalhos de A. Thiaville & S. Rohart com seu trabalho publicado em 2013 [34], que utilizaram os parâmetros magnéticos de uma amostra de Pt/Co/AlOx (Platina/Cobalto/Óxido de Alumínio) e Cortés-Ortuño *et al.* [17], que simularam um material artificial com várias ferramentas de simulação. Os parâmetros magnéticos utilizados por ambos os autores são mostrados na Tab. (4.1).

Em todas as baterias de simulação usamos um número total de passos igual a $3,0 \times 10^7$ e $\alpha = 0,01$ (fator de amortecimento de Gilbert), escrevendo as configurações de saída a cada 5×10^4 passos com um incremento de tempo na E.D.O integrada igual a $\Delta t = 2 \times 10^{-16}$ s. Isto nos fornece um tempo de simulação de 120 fs.

Tabela 4.1 – Parâmetros magnéticos utilizados pelos autores supracitados. Os valores explicitados na segunda coluna são correspondentes ao material artificial, já a terceira coluna referem-se à amostra de Pt/Co/AlOx.

Parâmetro	Valor	Valor
\mathcal{A}_{ex}	13 pJ m ⁻¹	16 pJ m ⁻¹
\mathcal{D}	3 mJ m ⁻²	3 mJ m ⁻²
\mathcal{M}_s	0,86 MA m ⁻¹	1,10 MA m ⁻¹
\mathcal{K}_{eff}	0,4 MJ m ⁻³	0,51 MJ m ⁻³

Fonte: Retirados de Cortés-Ortuño *et al.* [17] e Thiaville & Rohart [34].

Para o material artificial obtemos $\ell_{ex} \approx 9,884$ nm; $\Delta \approx 5,601$ nm e $\zeta \approx 10,667$ nm. Já para a amostra de Pt/Co/AlOx nos fornece $\ell_{ex} \approx 11,372$ nm, $\Delta \approx 5,701$ nm e $\zeta \approx 8,667$ nm.

nm. Utilizamos as Eqs. (3.6a), (3.6b) e (3.6c) para obter esses valores e em todos os casos atribuímos a direção \hat{z} à anisotropia uniaxial.

Dispusemos de um nanofio de $100 \text{ nm} \times 1 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ com um parâmetro de rede $a = 1 \text{ nm}$. Na Eq. (3.5), isso é equivalente a $N = 100$. Este valor está bem abaixo dos valores que precisam ser atendidos na simulação como visto nas relações acima. Relaxamos os sistemas unidimensionais a partir de um estado de magnetização dado por $\mathbf{m} = (0, 11\hat{y} + 0,99\hat{z})$ (em unidades reduzidas).

Na Fig.(4.1) temos o nanofio no caso interfacial tanto no caso inicial quanto no estado relaxado:

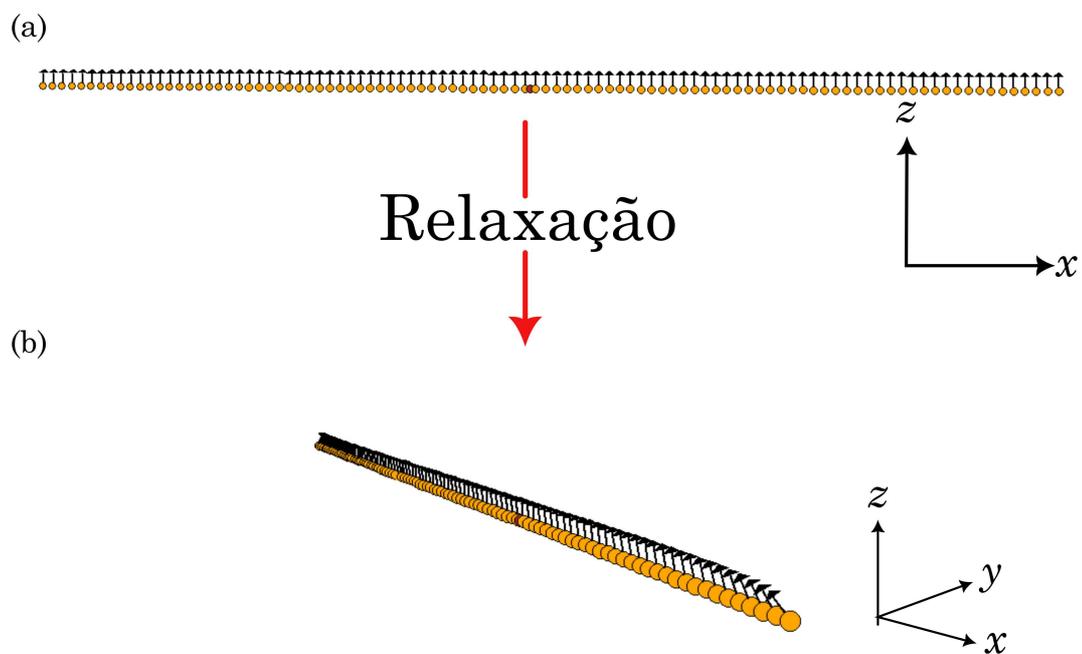
Figura 4.1 – Nanofio com movimentação dos momentos magnéticos restrita ao plano x - z , correspondendo ao caso interfacial. Na subfigura (a) temos o estado inicial e em (b) o sistema já relaxado ao equilíbrio, estado ao qual buscamos determinar o ângulo de inclinação dos momentos magnéticos dispostos nas bordas, ou seja, em $\pm L/2$.



Fonte: Autoria própria (2024).

A seguir, na Fig. (4.2), temos o nanofio no caso do tipo *bulk* também nos estados inicial e relaxado:

Figura 4.2 – Nanofio com movimentação dos momentos magnéticos em todo o espaço 3D, correspondendo ao caso do tipo *bulk*. Na subfigura (a) temos o estado inicial e em (b) o sistema já relaxado ao equilíbrio, estado ao qual buscamos determinar o ângulo de inclinação dos momentos magnéticos dispostos nas bordas, ou seja, em $\pm L/2$.



Fonte: Autoria própria (2024).

Este caso de estudo nos permite rescrever $\Theta(\mathbf{r}) = \Theta(x)$ na Eq. (2.49), ao qual definimos $\Phi = 0$ para o caso interfacial (plano (xz) da Fig. (2.17)) e $\Theta = \pi/2$ para um *bulk*. Escrevemos a densidade de energia micromagnética total como [25, 34]:

$$E[\Theta(x)] = \int_{x_A}^{x_B} \left[\mathcal{A}_{ex} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial x} \right)^2 - \mathcal{D} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial x} \right) - \mathcal{K} \cos^2(\Theta) \right] dx, \quad (4.1)$$

cuja minimização nos fornece:

$$\frac{d^2 \Theta}{dx^2} = \frac{\text{sen}(\Theta) \cos(\Theta)}{\Delta^2} \implies \text{para } x_A < x < x_B, \quad (4.2a)$$

$$\frac{d\Theta}{dx} = \frac{1}{\zeta} \implies \text{para } x = x_A \text{ ou } x = x_B. \quad (4.2b)$$

A partir da integração da Eq. (4.2a), obtemos,

$$\left(\frac{d\Theta}{dx} \right)^2 = \frac{C + \text{sen}^2(\Theta)}{\Delta^2}. \quad (4.3)$$

A condição $C = 0$ para a constante de integração garante que não haja formação de cicloides na estrutura [34], assim, substituindo a Eq. (4.2b) em (4.3), temos:

$$\text{sen}\Theta = \pm \frac{\Delta}{\zeta} \longrightarrow \Theta = \pm \text{sen}^{-1} \left(\frac{\Delta}{\zeta} \right) \quad (4.4)$$

A Eq. (4.4) fornece uma estimativa teórica para o ângulo e seu seno a partir dos valores do comprimento característico da DM e do comprimento da parede de Bloch. Vale destacar que as soluções para as bordas do sistema incluem $\Theta(\pm x/2) = \text{sen}^{-1}(\mp \Delta/\zeta)$, sendo que o sinal - e + no lado direito da Eq. (4.4) acima referem-se ao caso interfacial e do tipo *bulk*, respectivamente [17]. Segundo Thiaville & Rohart [34] e Cortés-Ortuño [17], esta equação possui o seno numericamente equivalente ao valor da componente m_x e m_y da magnetização, o que é facilmente verificado quando retomarmos à Eq. (2.49) e fazemos $\Phi = 0$ (caso interfacial), o que nos dá $|m_x| = |\text{sen}(\Theta)|$; e $\Phi = \pi/2$ (caso do tipo *bulk*), o que nos fornece $|m_y| = |\text{sen}(\Theta)|$.

A estimativa teórica dos ângulos também nos informa o valor esperado de m_z a partir da Eq. (2.49), onde relacionamos uma igualmente entre esta componente ao cosseno de Θ . Para a amostra de Pt/Co/AlOx, temos um valor teórico de $\text{sen}(\Theta) \approx \pm 0,52$, e, portanto, $\Theta \approx \pm 0,55$, o que nos dá 0,85 para m_z . Já para o material artificial, os dados nos fornecem $\text{sen}(\Theta) \approx \pm 0,66$ e $\Theta \approx \pm 0,72$, logo, o valor de 0,75 para m_z .

Apesar de teoricamente a Eq. (4.4) nos fornecer o valores de m_x e m_y , e, consequentemente, os valores dos ângulos, (os quais usamos para relacionar às componentes m_z da magnetização), nossos resultados desviaram em cerca de 0,04 do valor esperado para m_x e m_y e de 0,02 para m_z . Em relação ao ângulo, essa diferença observada fica em torno de 0,05 rad, em média, e se distancia menos quando usamos o ângulo obtido a partir de m_z .

Os resultados de nossas simulações nos forneceram os seguintes dados para a amostra de Pt/Co/AlOx:

Tabela 4.2 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material Pt/Co/AlOx para $\alpha = 1$ nm.

Caso	Comp.	Valor (u.r)	Ângulo (rad)
Interfacial	m_x	-0,48	0,50
	m_z	0,87	0,51
Bulk	m_y	0,48	0,50
	m_z	0,87	0,51

Fonte: Autoria Própria (2024).

Já os resultados para o material artificial nos forneceram os seguintes dados:

Tabela 4.3 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material artificial.

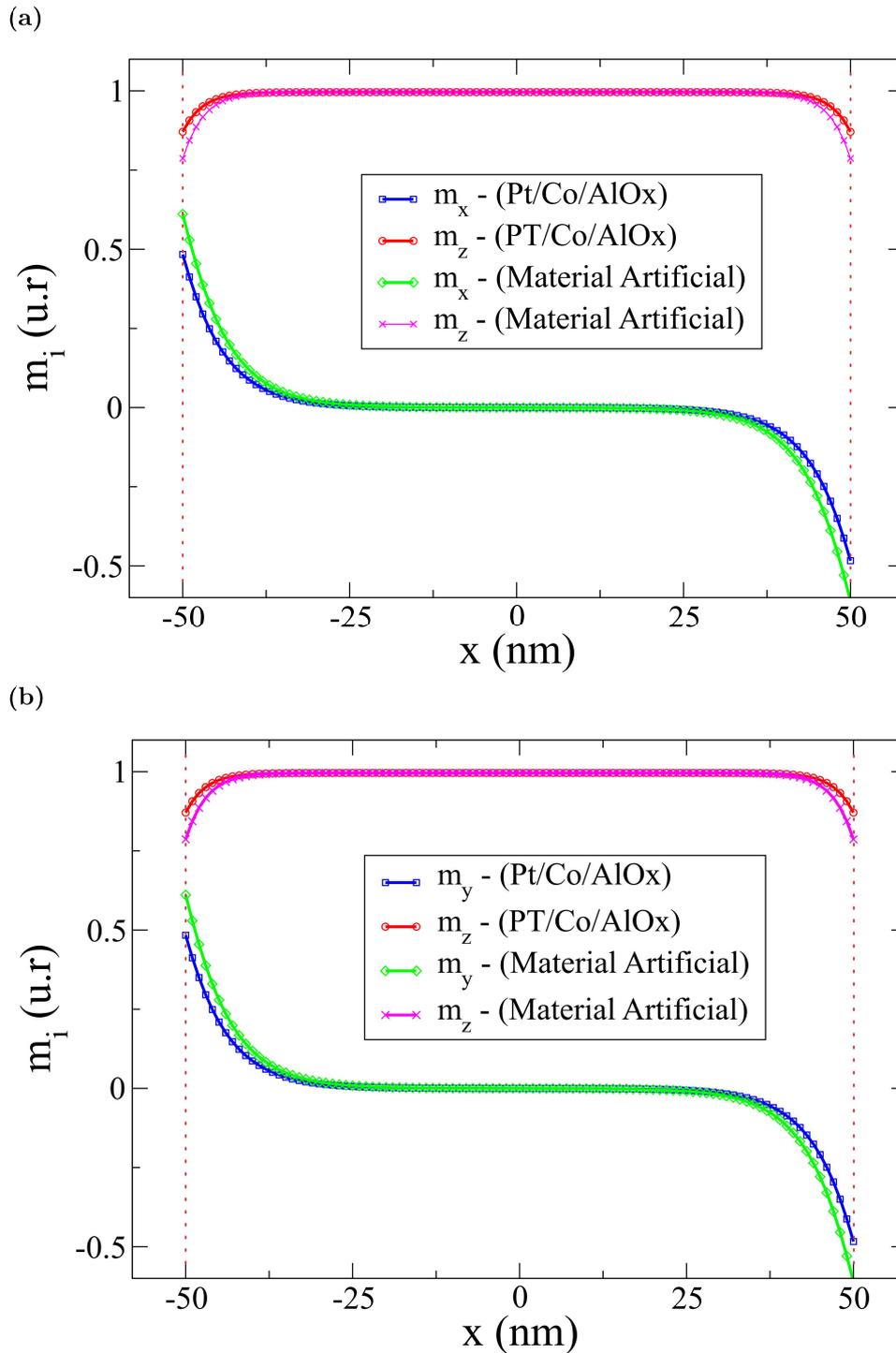
Caso	Comp.	Valor (u.r)	Ângulo (rad)
Interfacial	m_x	-0,61	0,66
	m_z	0,79	0,66
Bulk	m_y	0,61	0,66
	m_z	0,79	0,66

Fonte: Autoria Própria (2024).

Vale destacar algumas propriedades e operações utilizadas para chegar nos valores das Tabs. (4.2) e (4.3) acima. O valor negativo da componente m_x para o Pt/Co/AlOx forneceu o mesmo valor de ângulo devido a imparidade da função seno na relação $\Theta(\pm L/2) = \text{sen}^{-1}(\mp\Delta/\zeta)$. Aqui tomamos o valor da componente em $+L/2$, logo, o valor a tirar o arcosseno ficou positivo. O valor do ângulo obtido a partir da componente z da magnetização foi encontrado usando a expressão para o vetor momento magnético descrito na Eq. (2.49) da Sec. (2.4), onde usamos o cosseno do valor obtido.

Nas Figs. (4.3a) e (4.3b) temos a representação das componentes m_x, m_y e m_z do vetor momento magnético (em unidades reduzidas) em função do comprimento x da faixa.

Figura 4.3 – Componentes de \hat{m}_i ao longo do eixo x para um sistema tipo Néel (a) e do tipo Bloch (b) no estado relaxado. Em ambos os gráficos estão unificadas as informações dos dois materiais utilizados na simulação e índice i sobre o vetor \mathbf{m} pode indicar x, y e z . A linha tracejada em vermelho marcam as bordas do sistema em $\pm L/2$, com $L = 100$ nm.



Fonte: Autoria própria (2024).

Como estamos trabalhando em unidades reduzidas, então a soma de todas as componentes da magnetização precisam dar $|1|$. Isso garante a coerência física do problema em relação a conservação da magnetização. Tal verificação é feita a partir da expressão (4.5) abaixo:

$$\sqrt{(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)} = |1| \quad (4.5)$$

Tal verificação é feita a partir da Eq. (4.5) sobre todas as componentes ponto a ponto do sistema. No fim, tiramos uma média sob as 101 células do sistema. Calculamos o erro relativo entre o valor obtido via simulação e o valor esperado (dado pela Eq. (4.5)) a partir da seguinte fórmula:

$$E.r = \left| \left(\frac{\text{valor esperado} - \text{valor simulado}}{\text{valor esperado}} \right) \right| \times 100\% \quad (4.6)$$

A Tab. (4.4) reúne os erros relativos percentuais para todos os casos abordados .

Tabela 4.4 – Erros percentuais obtidos a partir dos valores das componentes x , y e z da magnetização em unidades reduzidas para ambos os materiais utilizados tanto no caso interfacial quanto no *bulk*.

Caso	Erro relativo (%)	
	Pt/Co/AlO _x	Material Artif.
Interfacial	0,39	0,39
Bulk	0,39	0,39

Fonte: Autoria Própria (2024).

Vemos a partir dos resultados percentuais que todos os valores fornecidos pela Eq. (4.5) ficaram em torno 0,99.

4.1.1.1 Averiguação dos desvios entre os valores teóricos esperados e os obtidos via simulação

Esses desvios encontrados entre os valores obtidos pelas simulações e pelos esperados teoricamente a partir da solução da energia também foi relatado pelos autores Thiaville & Rohart [34] e Cortés-Ortuño [17]. Esta diferença possivelmente está relacionada a discretização do sistema. A fim de averiguar esta afirmação, realizamos todas as simulações para este caso unidimensional agora com um parâmetro de rede a 10 vezes menor, ou seja, 0,1 nm. Mantivemos a dimensão total do nanofio de 100 nm ao definirmos $N = 1000$ na Eq. (3.5). Os resultados encontrados são expostos a seguir.

Na Tab. (4.5) reunimos os resultados para as interfaces entre Pt/Co/AlOx.

Tabela 4.5 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material Pt/Co/AlOx para $a = 0,1$ nm.

Caso	Comp.	Valor (u.r)	Ângulo (rad)
Interfacial	m_x	-0,52	0,54
	m_z	0,85	0,55
Bulk	m_y	0,52	0,54
	m_z	0,85	0,55

Fonte: Autoria Própria (2024).

Quando retomamos aos valores que teoricamente seriam encontrados a partir da solução da energia segundo Thiaville & Rohart [34], notamos um erro absoluto bem menor tanto para os valores das componentes quanto para o ângulo Θ .

Agora, na Tab. (4.6) temos os resultados para o material artificial.

Tabela 4.6 – Dados para as componentes x , y e z da magnetização e os ângulos equivalentes para o material artificial para $a = 0,1$ nm.

Caso	Comp.	Valor (u.r)	Ângulo (rad)
Interfacial	m_x	-0,65	0,71
	m_z	0,75	0,72
Bulk	m_y	0,65	0,71
	m_z	0,75	0,72

Fonte: Autoria Própria (2024).

Assim como visto para a interface de Pt/Co/AlOx, aqui no material artificial também encontramos erros bem menores em relação às simulações realizadas com $a = 1$ nm. Quando comparamos com o valor obtido a partir da componente m_z em ambos os materiais, temos erro absoluto nulo para a precisão adotada pelos autores. Em relação aos erros relativos para a conservação da magnetização total, encontramos os mesmos 0,39% para todos os casos, assim como na Tab. (4.4).

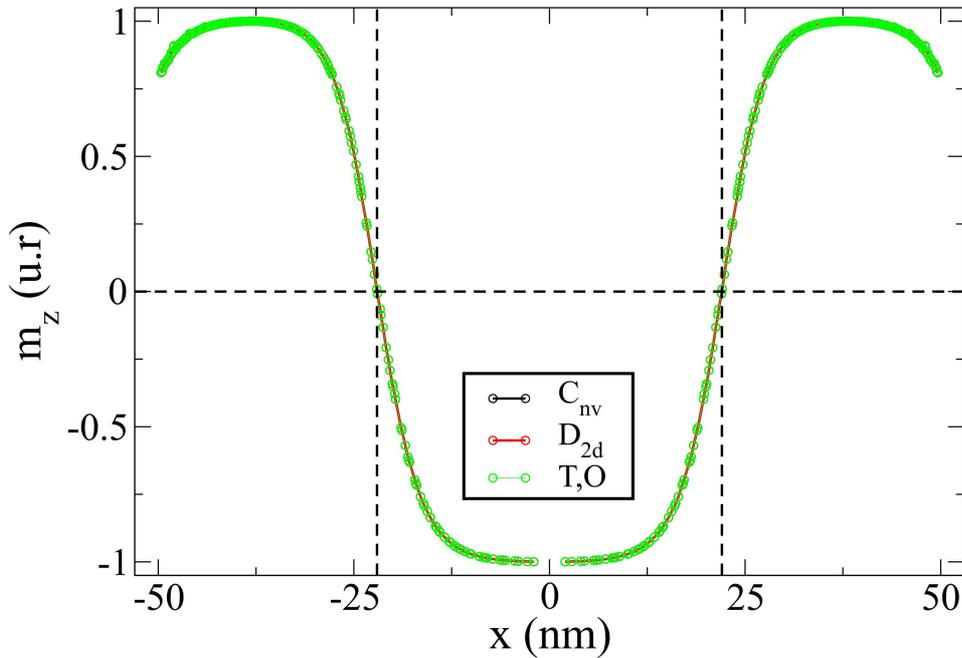
4.1.2 Caso bidimensional: perfil de magnetização de um *skyrmion*

Conforme discutimos na Sec. 2.4, a partir do tipo de simetria existente em nosso sistema, configurações magnéticas estáveis de *skyrmions* do tipo Néel, Bloch ou *antiskyrmions* podem se formar, e estes tipos de simetrias dão nomes às classes C_{nv} , T , O e D_{2d} . Nesta parte da dissertação, propusemos sistemas com estas classes de simetria obedecendo os critérios para as soluções da helicidade; o valor de vorticidade e manipulação do vetor DMI dado na Eq. (2.32), que favorecem as estruturas skyrmônicas e antiskyrmônicas estáveis discutidas supracitada seção. Utilizamos a partir de agora $a = 2$ nm e definimos um disco de raio igual a 50 nm com espessura de 2 nm. Os parâmetros

magnéticos são tais como os da Tab. (4.1), especificamente para o material artificial apenas.

Na Fig. (4.4) a seguir, temos o perfil do vetor momento magnético da componente fora do plano (m_z) para cada um dos três casos estudados. Para as classes C_{nv} e T,O (onde $\nu = 1$), utilizamos para a helicidade (λ) os valores 0 e π , respectivamente; na classe D_{2d} , (onde $\nu = -1$), usamos $\lambda = \pi/2$. Conforme discutido anteriormente, a distância r do centro do *skyrmion* em que $m_z = 0$ associamos ao seu raio equivalente. A teoria prevê o raio de $r_{sk} \approx 22,03$ nm; nossos resultados apontam $r_{sk} \approx 22,04$ nm no ponto de intersecção das linhas tracejadas da Fig. (4.4).

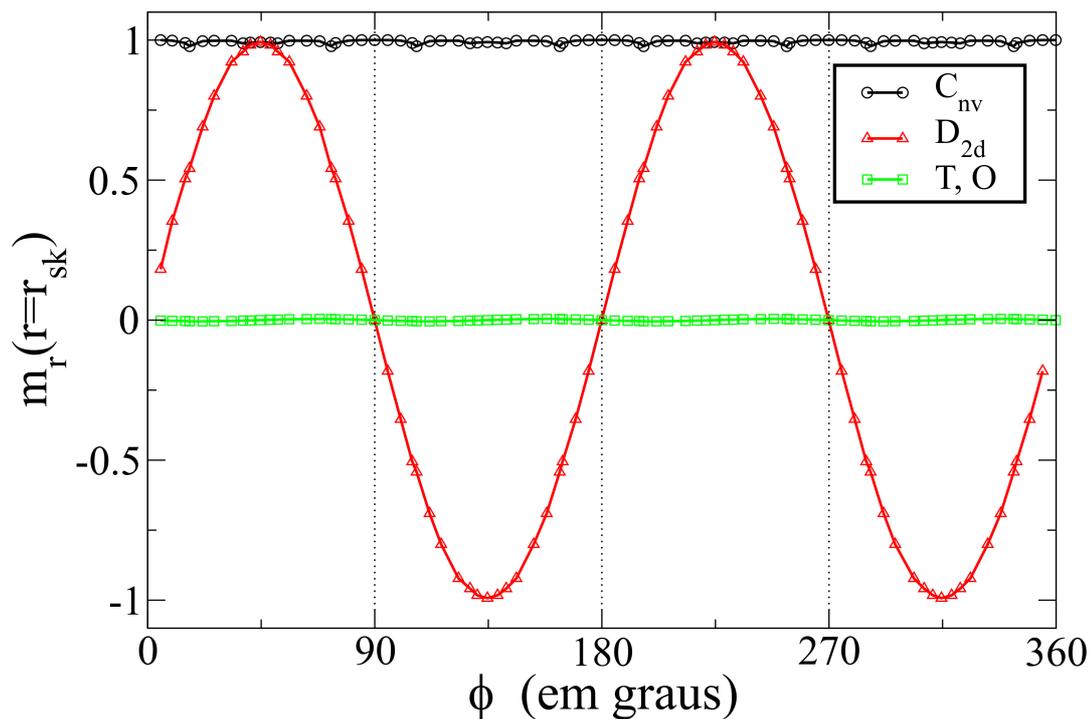
Figura 4.4 – Definição do raio do *skyrmion* (r_{sk}) no estado relaxado para os três tipos de estruturas abordadas (*skyrmions* tipo Néel e Bloch e *antiskyrmions*). Os pontos de intersecção das linhas tracejadas indicam o raio do *skyrmion*, que é definido no ponto onde $\hat{m}_z = 0$. Simetricamente, temos a mesma informação de raios, portanto, fizemos essa consideração fixando a dimensão y .



Fonte: Autoria própria (2024).

Segundo Cortés-Ortuño *et al.* [17], a componente radial da magnetização é função de r_{sk} e ϕ como $m_r(r_{sk}, \phi) = \text{sen}(\Theta(r_{sk}) = \pi/2) \cos(\Phi - \phi) = \cos(\Phi - \phi)$. Conforme as soluções aceitas para nossos problemas, temos portanto que, $m_{r_{sk}}^{(C_{nv})} = 1$; $m_{r_{sk}}^{(T,O)} = 0$ e $m_{r_{sk}}^{(D_{2d})} = \text{sen}(2\phi)$ como uma função oscilatória. A Figura (4.5) ilustra nossos resultados, que concordam com a teoria.

Figura 4.5 – Perfil da componente m_r do momento magnético no raio do *skyrmion*. As linhas tracejadas em preto apenas marcam pontos de 90 graus no gráfico.



Fonte: Autoria própria (2024).

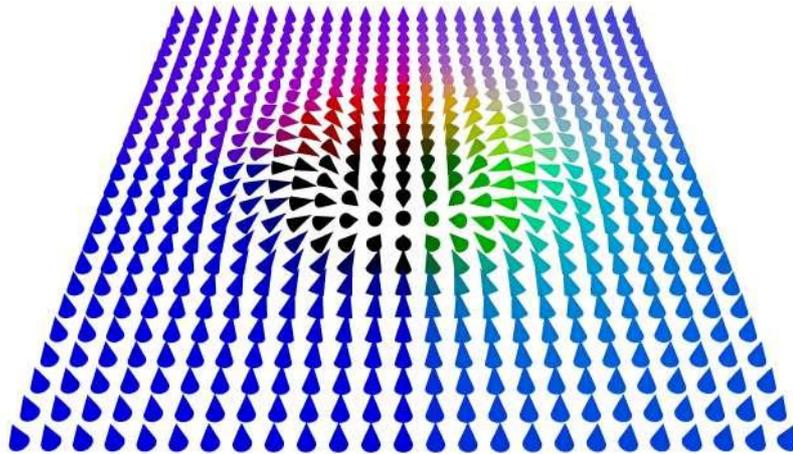
Vorticidade 1: padrões skyrmiônicos

As duas primeiras configurações da Fig. (2.19a) estão inicialmente organizadas como Néel *tail-to-tail* e *head-to-head*, respectivamente. Ambas relaxam para uma simetria do tipo C_{nv} . O 3º e 4º padrões são do tipo Bloch e convergem às simetrias do tipo T, O .

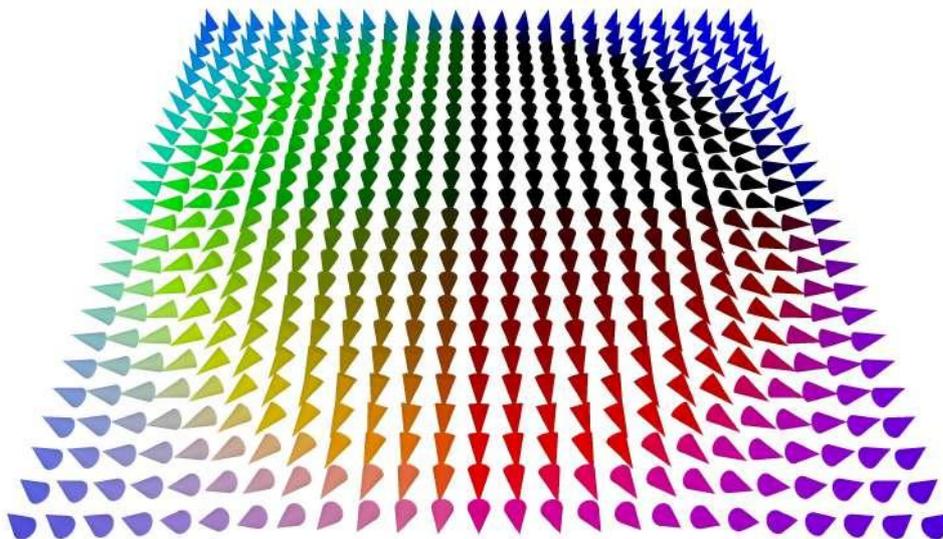
Nas Figs. (4.6), (4.7), (4.8) e (4.9) a seguir temos os resultados obtidos em cada um dos casos.

Figura 4.6 – *Skyrmion* do tipo Néel *head-to-head* com $\nu = 1$, $\lambda = 0$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



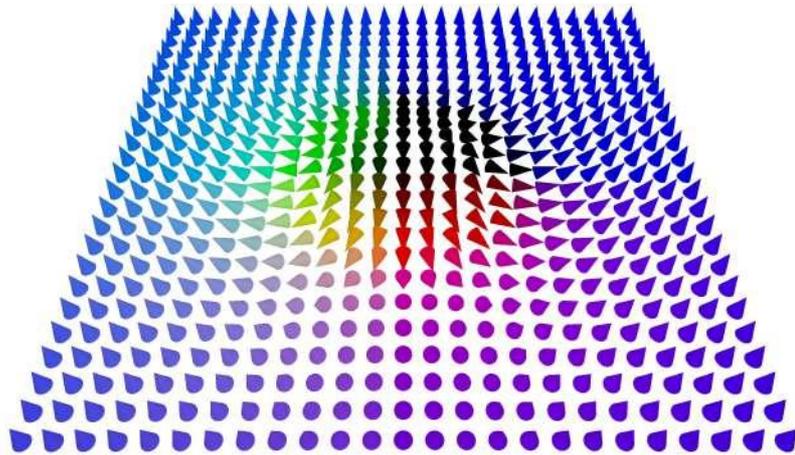
(b)



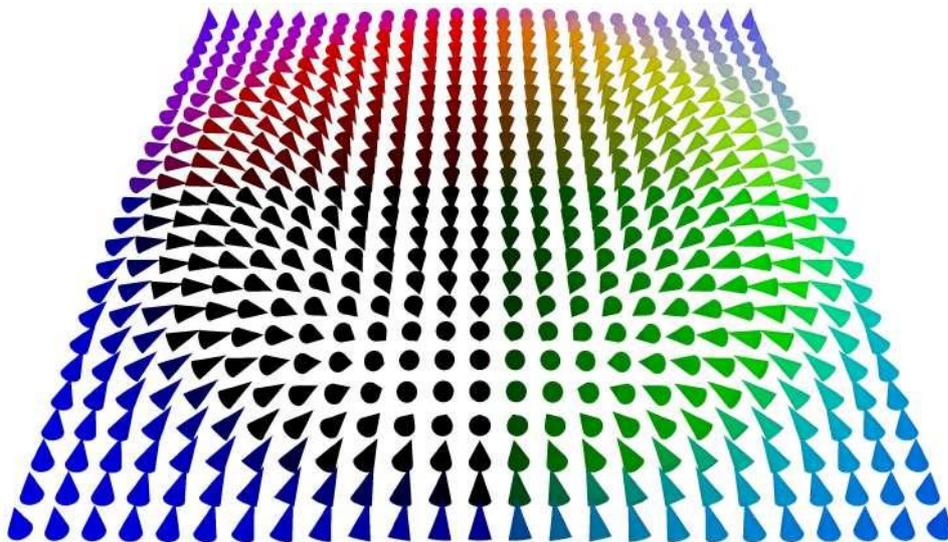
Fonte: Autoria própria (2024).

Figura 4.7 – *Skyrmion* do tipo Néel *tail-to-tail* com $\nu = 1$, $\lambda = \pi$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



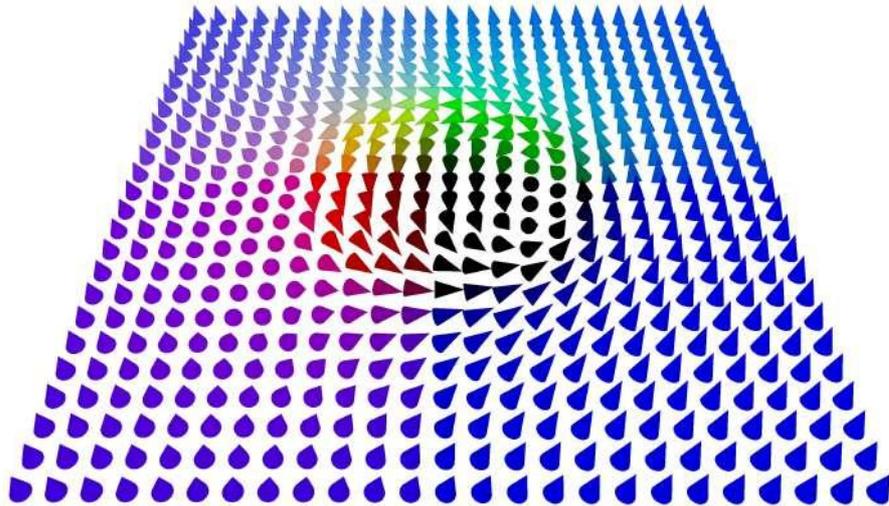
(b)



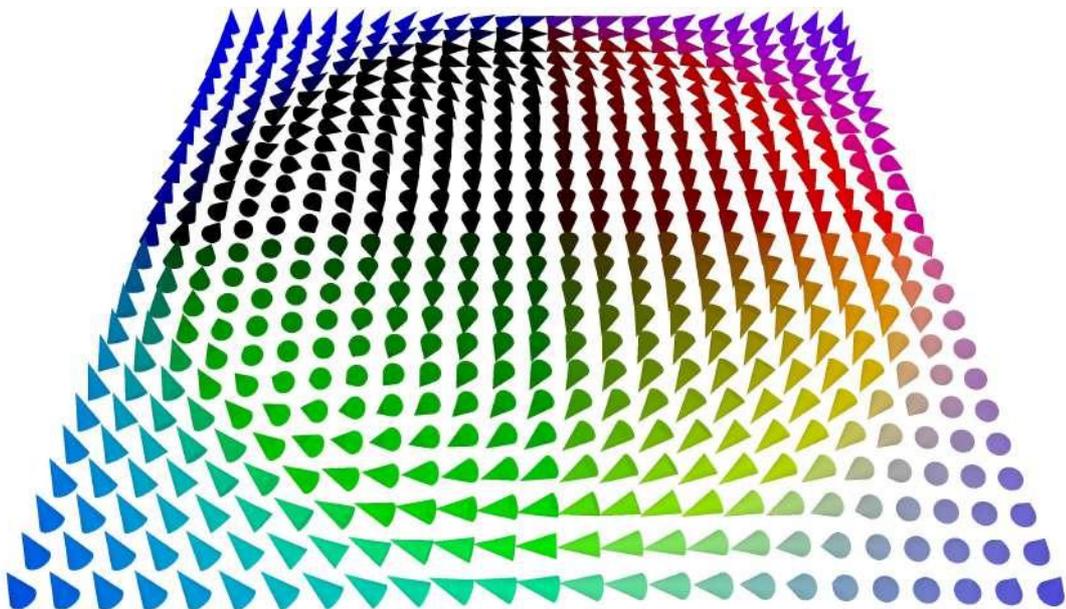
Fonte: Autoria própria (2024).

Figura 4.8 – *Skyrmion* do tipo Bloch com $\nu = 1$, $\lambda = -\pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



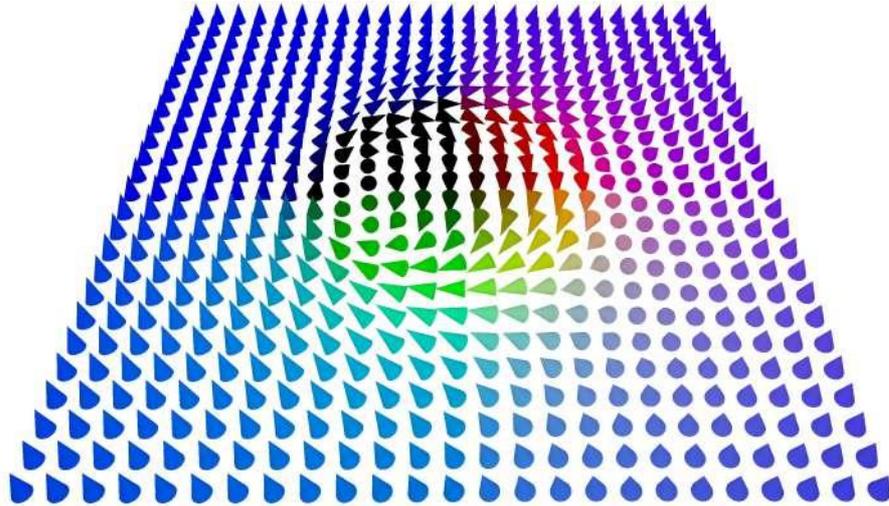
(b)



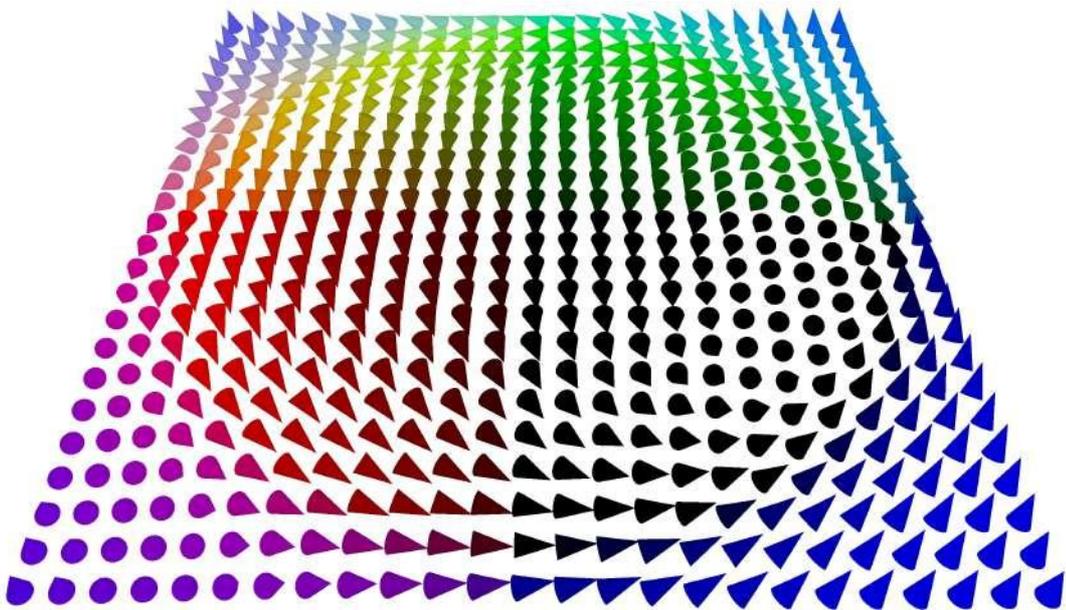
Fonte: Autoria própria (2024).

Figura 4.9 – *Skyrmion* do tipo Bloch com $\nu = 1$, $\lambda = \pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



(b)



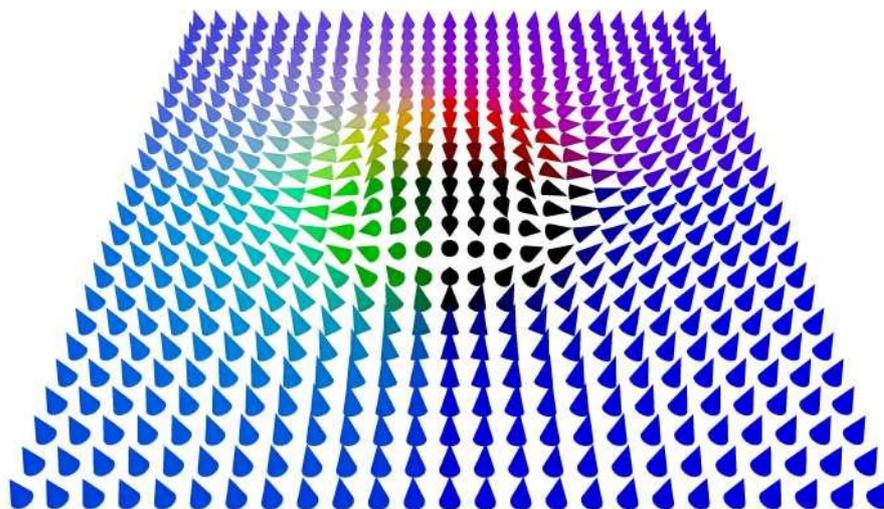
Fonte: Autoria própria (2024).

Vorticidade -1: padrões antiskyrmiónicos

Os casos da parte inferior da Fig. (2.19a) referem-se todos a *antiskyrmions*, que surgem em simetrias do tipo D_{2d} em que a vorticidade é $\nu = -1$. Nas Figs. (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13) a seguir temos os resultados obtidos em cada um dos casos.

Figura 4.10 – *Antiskyrmion* com $\nu = -1$, $\lambda = 0$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



(b)

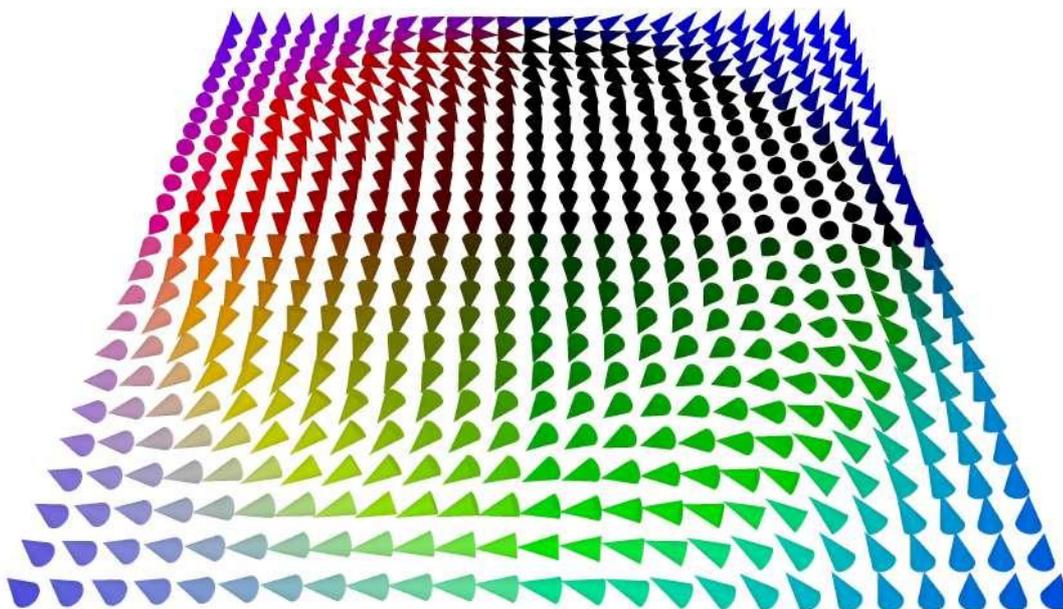
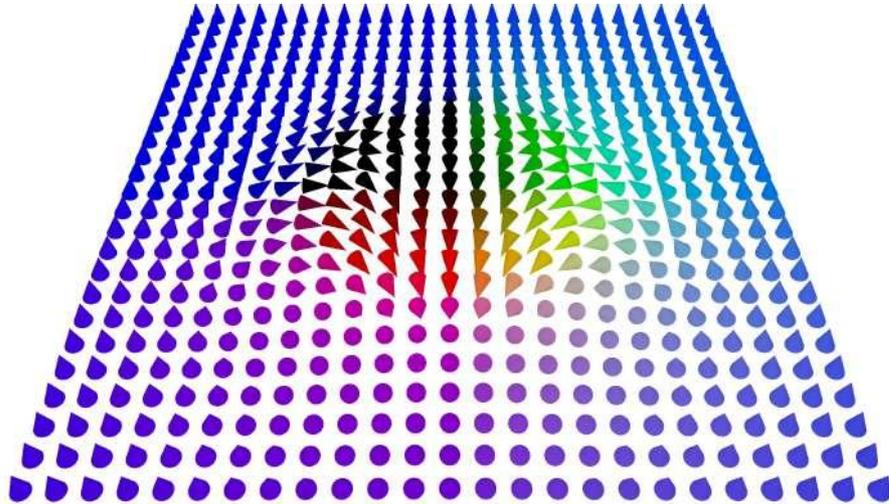
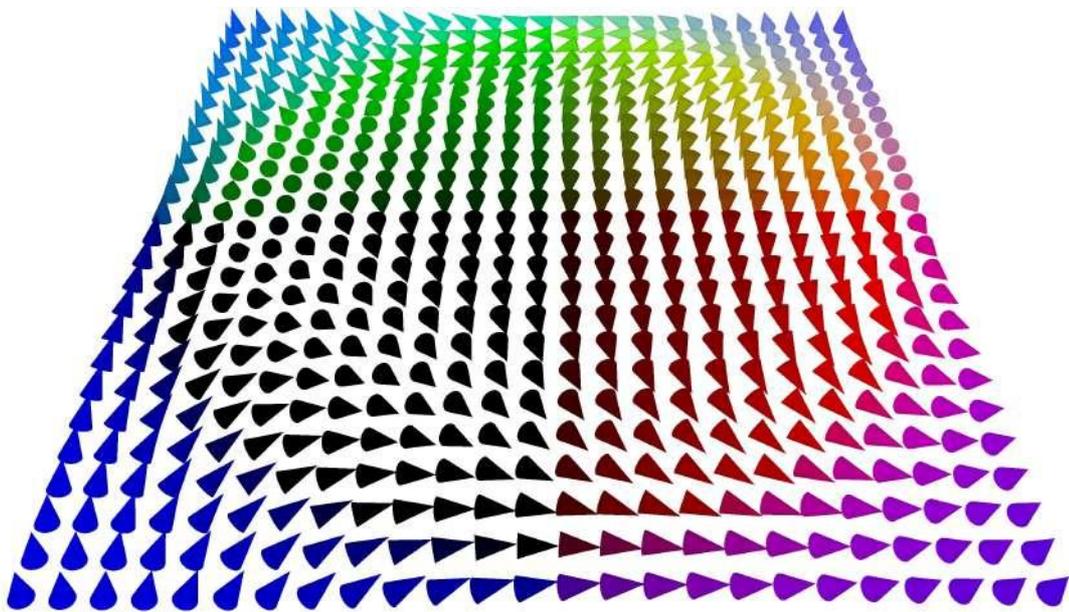


Figura 4.11 – *Antiskyrmion* com $\nu = -1$, $\lambda = \pi$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



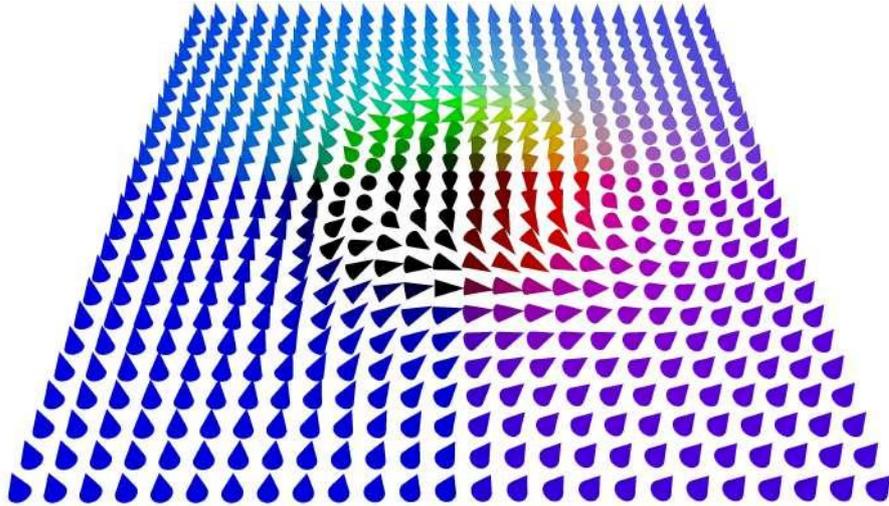
(b)



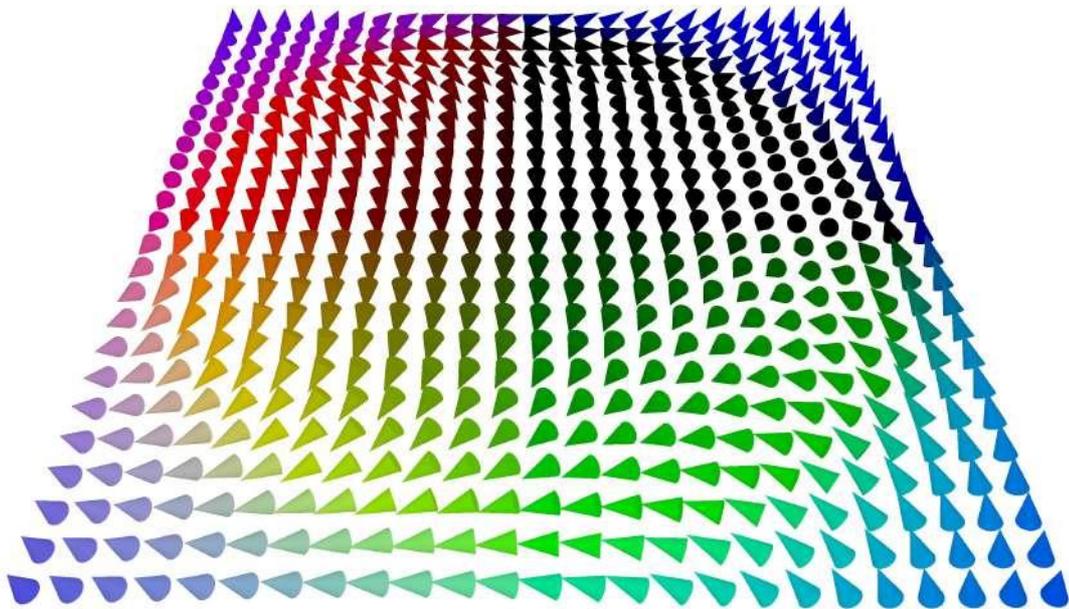
Fonte: Autoria própria (2024).

Figura 4.12 – *Antiskyrmion* com $\nu = -1$, $\lambda = -\pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



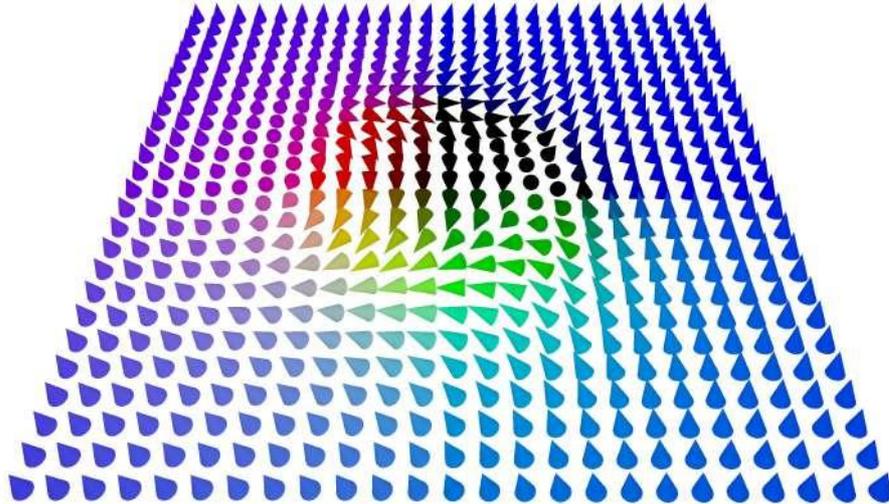
(b)



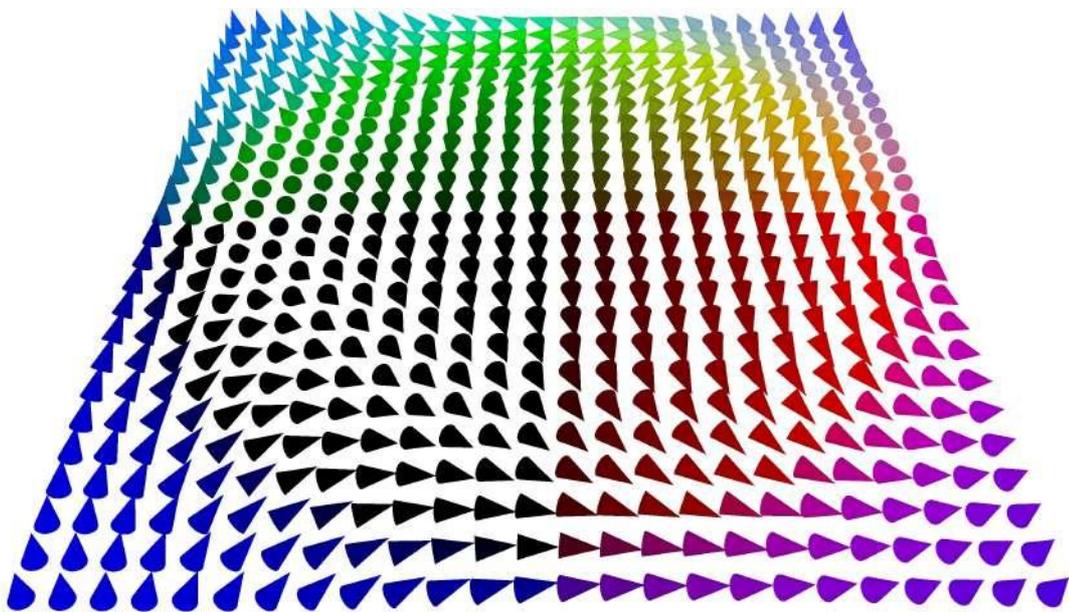
Fonte: Autoria própria (2024).

Figura 4.13 – *Antiskyrmion* com $\nu = -1$, $\lambda = \pi/2$. Estado (a) inicial e (b) relaxado.

(a)



(b)

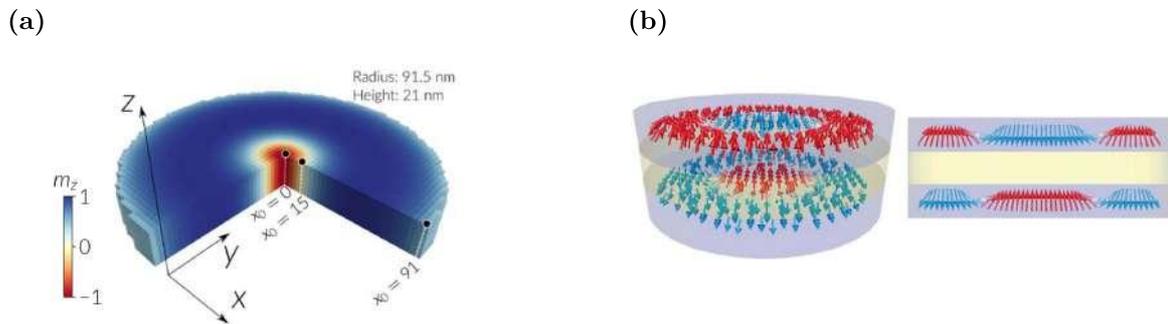


Fonte: Autoria própria (2024).

4.1.3 Caso tridimensional: modulação *skyrmion* ao longo da espessura

Em sistemas tridimensionais os *skyrmions* podem se propagar ao longo do eixo de simetria, que está relacionado à direção da espessura da amostra. Os autores Cortés-Ortuño *et al.* [17] e Rybakov *et al.* [35] tratam em seus trabalhos este comportamento dos spins que fazem uma modulação linear descrita pela componente m_r ao longo da espessura da amostra. Os autores descrevem também um relaxamento dos estados de spin a partir da aplicação de um campo externo \mathbf{H} .

Figura 4.14 – Modulação de *skyrmions* ao longo da espessura da amostra. Em (a) um sistema de *skyrmions* confinados em um cilindro de FeGe e em (b), a modulação de *skyrmions* em bicamadas antiferromagnéticas.

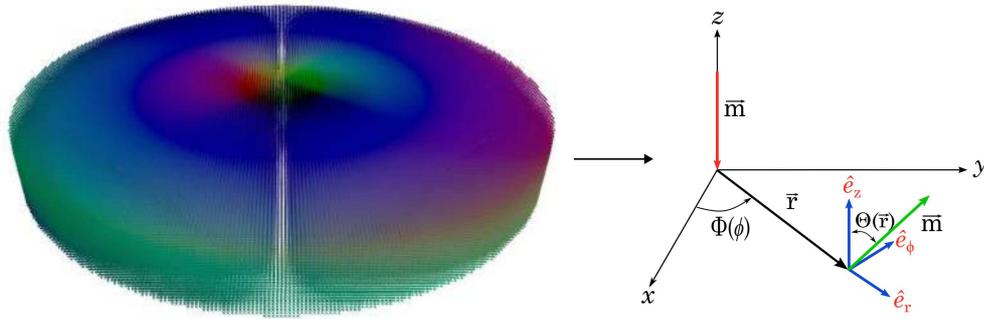


Fonte: Retiradas de (a) Córtes-Ortuño (2018) [17] e (b) Fert *et al.* (2023) [26].

No que diz respeito ao comportamento da componente m_r , espera-se que esta apresente o seu máximo valor nas superfícies inferior e superior na região em que se define o raio do *skyrmion*, (que correspondem às proximidades das regiões em que a componente m_z é nula ou muito próxima de 0). Por outro lado, espera-se encontrar um valor constante igual a zero para m_r em todos os pontos da superfície localizada em um corte transversal exatamente no meio da amostra.

Para esta simulação definimos um cilindro de FeGe com diâmetro de 183 nm e espessura de 21 nm ao longo do eixo z . Na Fig. (4.15) temos o sistema simulado e uma ilustração do sistema de coordenadas esféricas.

Figura 4.15 – À esquerda, o *bulk* de FeGe completo em seu estado inicial. À direita, o sistema de coordenadas esféricas para dois *spins* isoladamente.



Fonte: Autoria Própria (2024).

Utilizamos novamente $a = 1$ nm com a aplicação de um campo externo de Zeeman, sendo o estado inicial da magnetização semelhante a um Bloch *Skyrmion* com raio de $5a$. Os parâmetros magnéticos são dados na Tab. (4.7)

Tabela 4.7 – Parâmetros magnéticos para um *bulk* de FeGe.

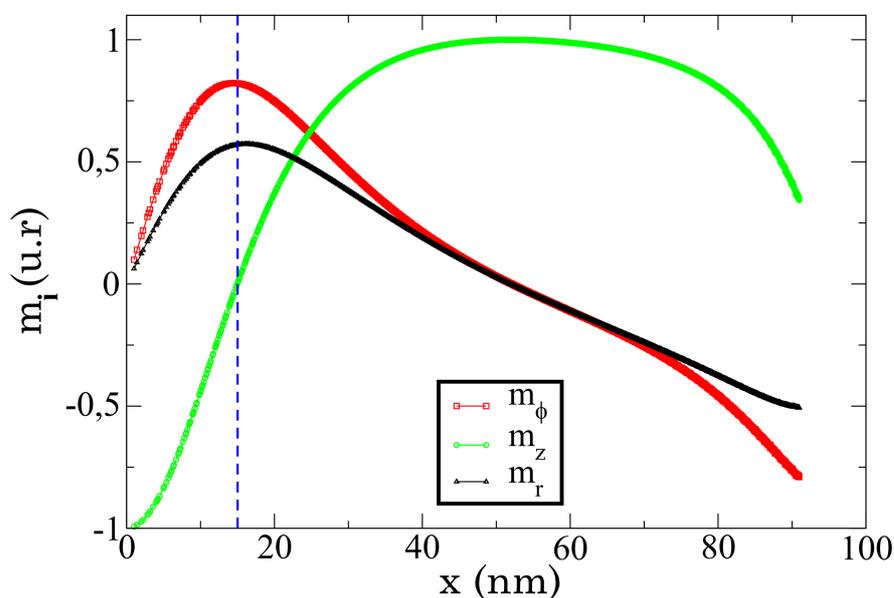
Parâmetro	Valor
\mathcal{A}_{ex}	$8,78 \text{ pJ m}^{-1}$
\mathcal{D}	$1,58 \text{ mJ m}^{-2}$
\mathcal{M}_s	$0,384 \text{ MA m}^{-1}$
$\mu_0 \mathbf{H}$	$(0, 0, 0,4) \text{ T}$

Fonte: Dados retirados de Córtes-Ortuño *et al.* (2018) [17].

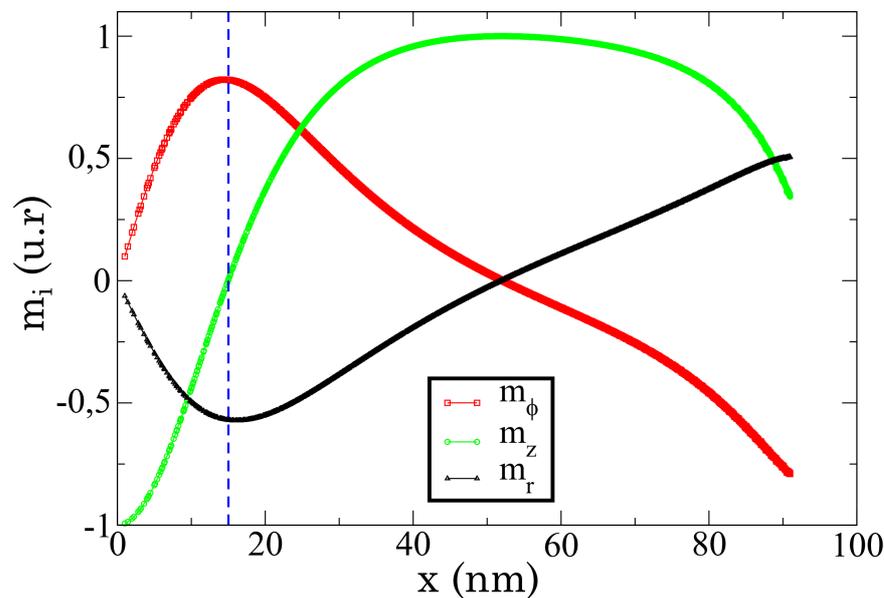
Conforme proposto por Cortés-Ortuño *et al.* (2018) [17], a componente radial da magnetização (m_r) apresenta comportamento contrário em uma superfície em relação a outra e tem seu máximo próximo da região em que $m_z = 0$. Ao observarmos nas Figs. (4.16a) e (4.16b), vemos o comportamento esperado das componentes do vetor momento magnético em coordenadas esféricas no plano xy .

Figura 4.16 – Fixamos a direção y em 0 e analisamos algumas fatias de z . Em (a), temos a base inferior e em (b) a base superior. Observamos em preto que a componente radial tem seu máximo próximo a região onde m_z é 0. O comportamento invertido de m_r também é observado. A linha tracejada em azul indica o ponto em x onde encontramos o raio do *skyrmion*, sendo definida no ponto onde a componente $m_z \approx 0$ ou exatamente nula. O índice i indica as componentes r , ϕ e z .

(a)



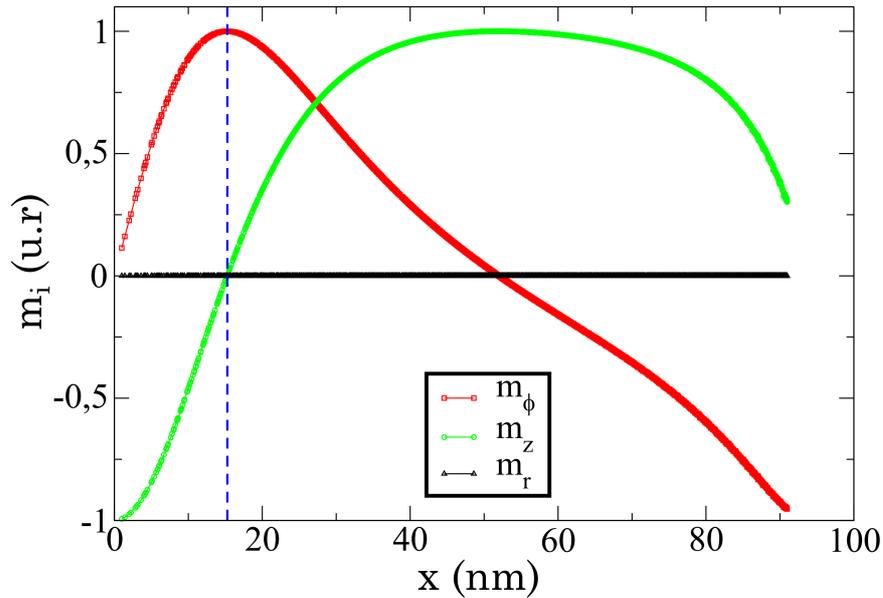
(b)



Fonte: Autoria própria (2024).

Além disso, o problema-padrão também espera que a componente m_r seja nula no centro simétrico da amostra de FeGe, ao qual entende-se como sendo um corte transversal na metade da espessura do cilindro. Este comportamento também é observado em nosso programa, como podemos ver na Fig. (4.17) a seguir:

Figura 4.17 – Comportamento das componentes da magnetização em termos de coordenadas esféricas para o centro simétrico da amostra de FeGe. Destacamos o gráfico em preto, , que representa m_r , onde o vemos nulo em toda a extensão do cilindro, assim como espera-se na teoria.

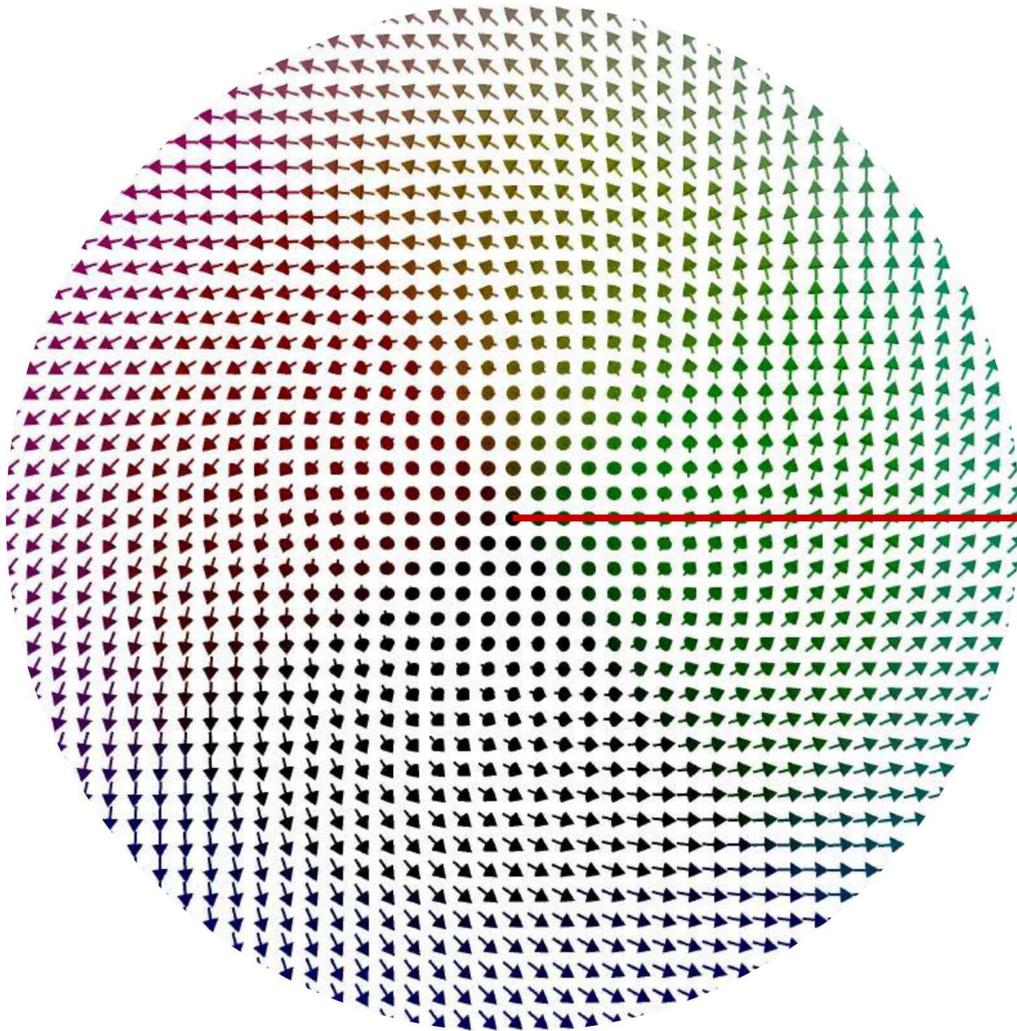


Fonte: Autoria própria (2024).

Um outro resultado que espera-se encontrar, também, é o raio do *skyrmion* no estado de mínima energia, tanto nas superfícies quanto no centro simétrico da amostra. Cortés-Ortuño *et al.* (2018) [17] mostram que o valor encontrado para r_{sk} é 15,30 nm no centro da amostra e 15,0 nm para ambas as superfícies. A partir das linhas tracejadas em azul nas Figs. (4.16a), (4.16b) e (4.17) evidenciam estes pontos a serem encontrados. Para as superfícies obtivemos valores aproximados de 15,27 nm, já para o centro da amostra obtivemos 15,01 nm. Em termos de erros relativos, – onde usamos a Eq. (4.6) –, obtivemos 0,19% e 0,06%, respectivamente.

Na Fig. (4.18) temos o comportamento da componente radial da magnetização vista a partir da superfície inferior.

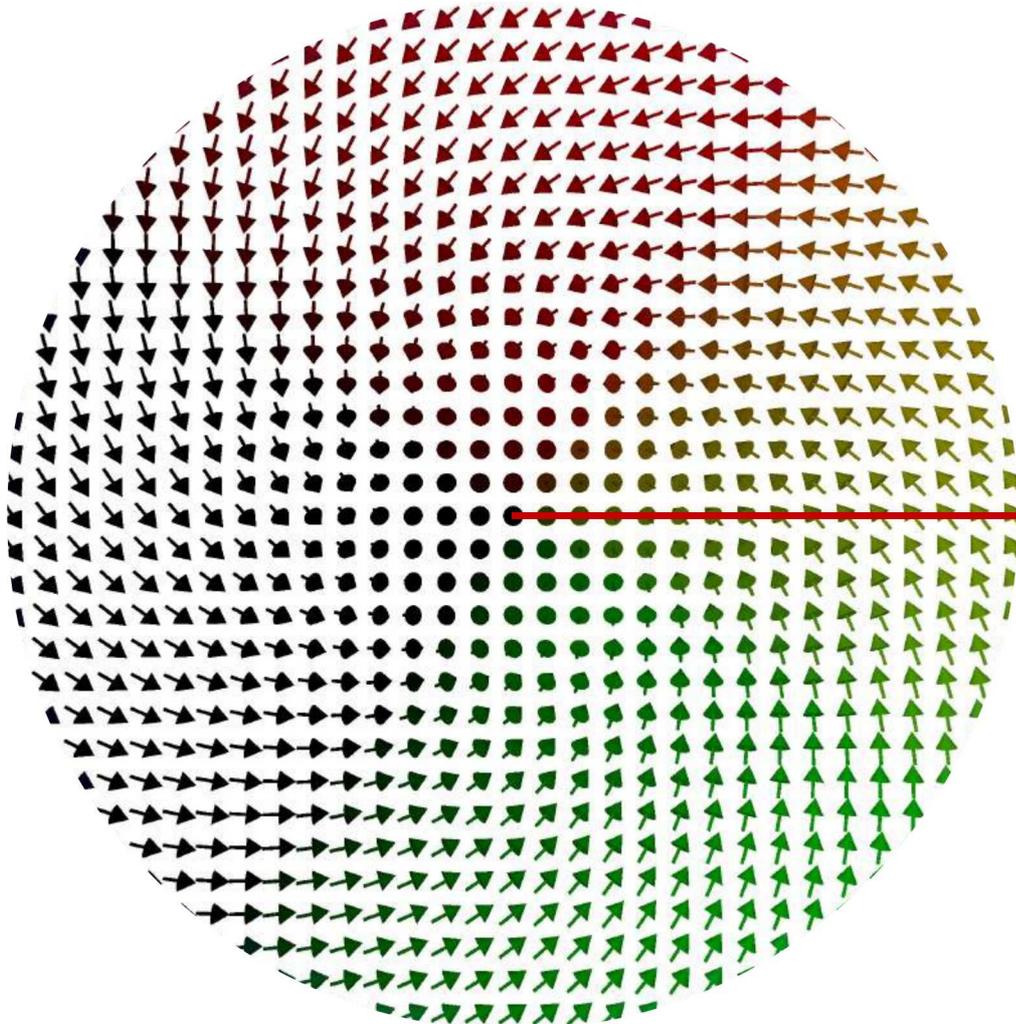
Figura 4.18 – Superfície inferior do *bulk* vista de cima do centro do *skyrmion* até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.



Fonte: Autoria própria (2024).

Para efeito de comparação, vamos analisar individualmente também a superfície superior do cilindro dada pela Fig. (4.19):

Figura 4.19 – Superfície superior do *bulk* vista de cima do centro do *skyrmion* até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.

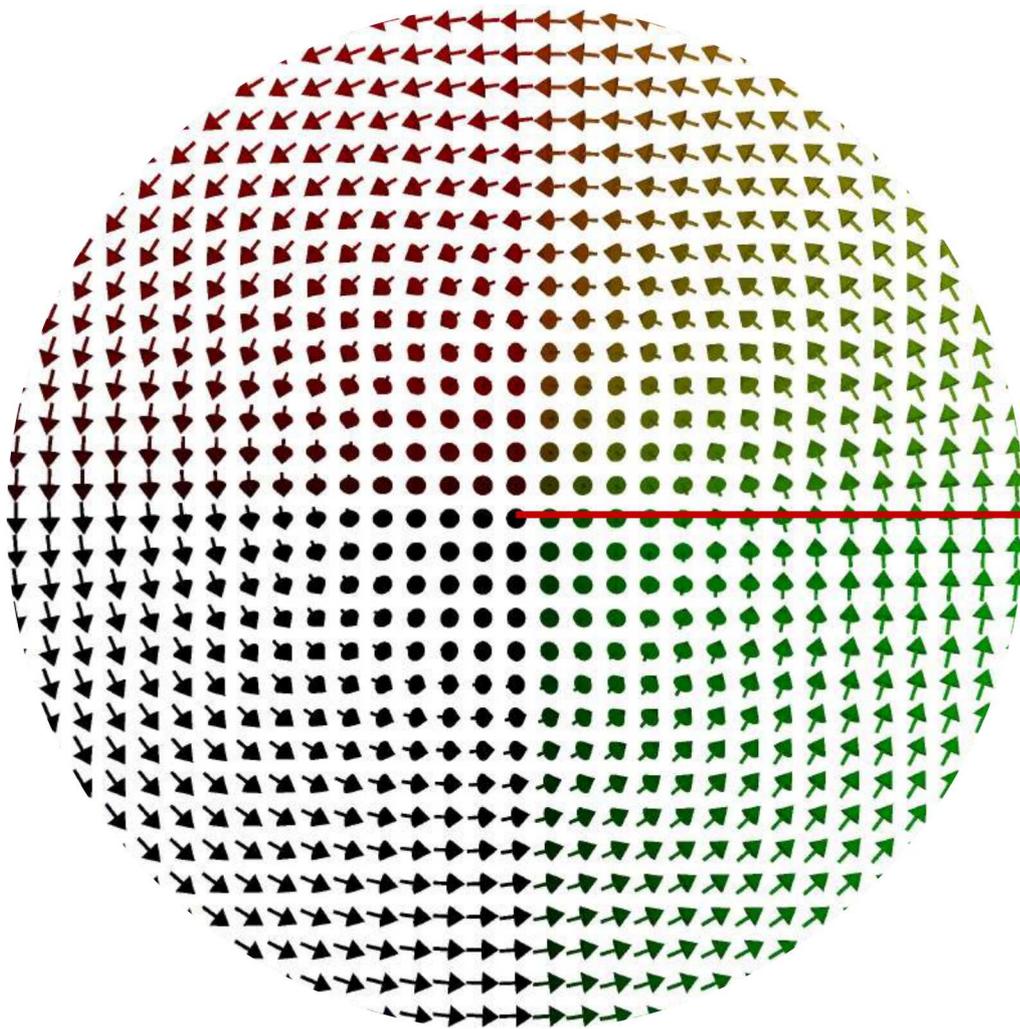


Fonte: Autoria própria (2024).

Observamos a partir das Figs. (4.18) e (4.19) que estas possuem um perfil simétrico um em relação ao outro quando tomamos os dois extremos das superfícies. As figuras supracitadas estão limitadas pelo raio do *skyrmion*, e, em suas bordas, observamos justamente o perfil contrário de m_r .

Na Fig. (4.20) a seguir, vemos o comportamento de m_r no centro da amostra.

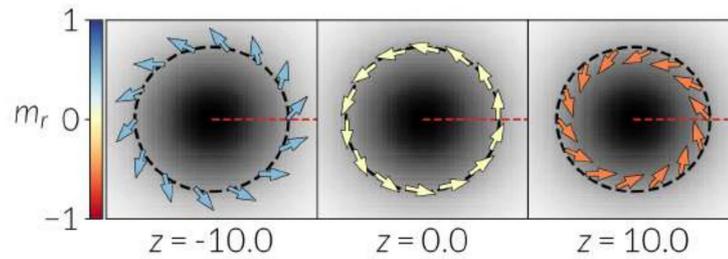
Figura 4.20 – Superfície localizada no centro simétrico em $z=11$ vista de cima do centro do *skyrmion* até seu raio no estado relaxado, indicado pela faixa em vermelho.



Fonte: Autoria própria (2024).

Notamos que em nenhum ponto da (4.20) há projeção de do vetor momento magnético na direção radial, tal como sugere o gráfico em (4.17). Todos estes comportamentos para a componente m_r estão de acordo com o observado na Fig. (4.21) pelo autor Córtes-Ortuño *et al.* (2018).

Figura 4.21 – *Skyrmions* em sistemas do tipo *bulk*, com o centro escuro indicando o alinhamento dos momentos magnéticos em $-z$ e a componente m_r evoluindo da base inferior para a superior da amostra.



Fonte: Retirada de Córtes-Ortuño *et al.* (2018) [17].

O esquema à esquerda da Fig. (4.21) é similar ao comportamento evidenciado em (4.18). Ao centro, temos o comportamento similar ao visto em (4.20) e finalmente à direita, vemos o apresentado em (4.19).

4.2 ESTUDO DINÂMICO DE VÓRTICES EM MATERIAIS ISOTRÓPICOS COM APLICAÇÃO DE CORRENTE POLARIZADA EM SPIN

Nesta segunda parte da discussão dos resultados, analisamos a dinâmica de vórtices no material isotrópico Permalloy-79, cujos parâmetros magnéticos podem ser consultados na Tab. (4.8). Os objetivos desta análise consistem em determinar a posição de equilíbrio de um vórtice magnético em um cuboide em que se aplica corrente polarizada em spin numa dada direção, analisando também os perfis médios das componentes x e y da magnetização a partir da variação de parâmetros do problema como intensidade de corrente \mathbf{j} e do grau de não-adiabaticidade ξ . Este problema-padrão é intitulado *standard-problem #5*, e é tomado como base a partir dos resultados de Najafi et al. [20] do ano de 2009.

Tabela 4.8 – Parâmetros magnéticos e de simulação utilizados em um cuboide de Permalloy-79. Apenas os valores de \mathcal{A}_{ex} e \mathcal{M}_s são do material utilizado, os demais valores se referem a fatores externos, como intensidade da corrente superficial na direção \hat{x} (j_x), assim como sua polaridade (P), grau de não adiabaticidade (ξ) e o amortecimento de Gilbert (α). A partir desses parâmetros obtemos $\ell_{ex} \approx 5,7$ nm.

Parâmetro	Valor
\mathcal{A}_{ex}	13,0 pJ m ⁻¹
\mathcal{M}_s	0,8 MA m ⁻¹
j_x	2,0 TA/m ²
ξ	0,05
P	0,5
α	0,1

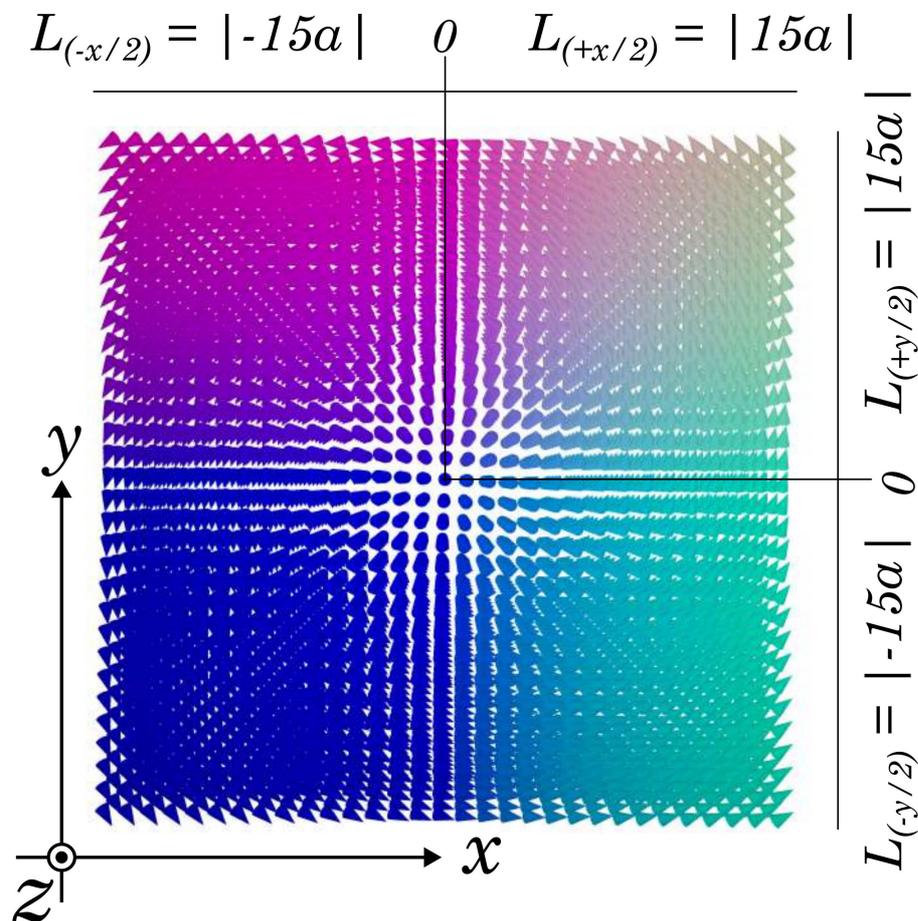
Fonte: Dados retirados de Najafi et al. [20].

Cada análise no nosso problema é separada em duas etapas, sendo a primeira aquela em que não há a aplicação de corrente, onde nosso sistema é guiado então pela LLG descrita na Eq. (3.4b). O estado final desse primeiro subproblema é usado como configuração inicial para a segunda etapa, em que aplicamos de fato uma corrente. Para isso, simulamos um cuboide com $100 \times 100 \times 10$ nm³ com um parâmetro de rede de $a = 2$ nm. Fora da amostra magnética a corrente é não-polarizada, o que indica que esta não exerce torque na magnetização nas regiões limítrofes do material.

4.2.1 Condições iniciais: análise do sistema magnético sem aplicação de corrente

Nesta primeira etapa, evoluímos nosso sistema a uma configuração de mínimo de energia local. Para isso, inserimos um vórtice magnético a cada uma das camadas em \hat{z} exatamente em seu centro e deixamos que o sistema relaxasse ao equilíbrio apenas a partir da interação de troca e dipolar. A configuração inicial global é vista na Fig. (4.22) a seguir:

Figura 4.22 – Estado inicial global do cuboide de Permalloy-79 sem aplicação ação das interações de troca e dipolar. Os momentos de dipolo magnético estão organizados de maneira a propiciar a formação de um vórtice após agirem as devidas interações no estado posterior. A figura mostra apenas um “recorte” do cuboide, com limites entre $-15a$ e $+15a$, passando pela célula localizada no ponto 0.



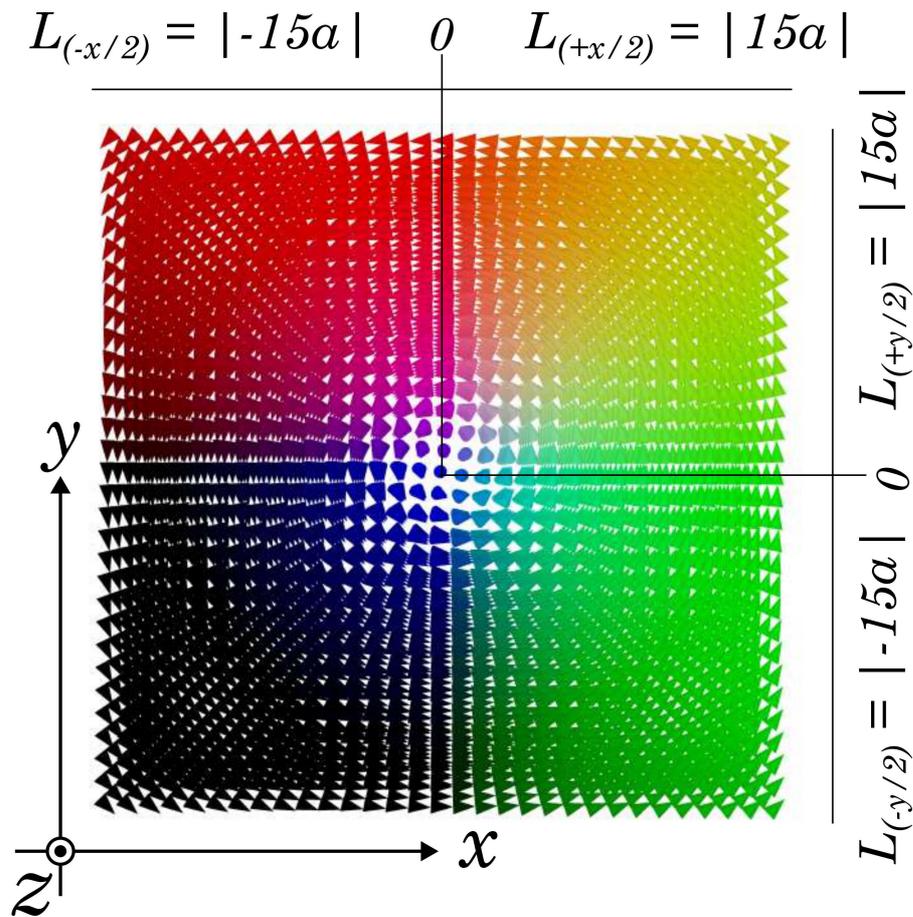
Fonte: Autoria própria (2024).

Assim como em todo programa que envolve integração numérica, precisamos definir uma quantidade de *passos* e um intervalo para cada um deles. Em unidades de tempo, poderíamos pensar que precisamos integrar até um tempo t com um intervalo de tempo Δt . Definimos um número de passos total igual a $1,0 \times 10^7$ (dez milhões), e, como nosso problema é subdividido, então destinamos 2×10^5 (duzentos mil) para a etapa onde não há aplicação de corrente e restante para a LLG com tais termos. Escrevemos as configurações

de saída a cada 5×10^3 passos (5 mil). Nas geometrias definidas em nosso programa, o centro do vórtice está em $x_0 = y_0 = 0$ nm, e seu raio equivalente é igual a 5 parâmetros de rede a , ou seja, 10 nm.

A partir do estado inicial mostrado na Fig. (4.22), deixamos agir as interações de troca e dipolar, sendo o estado proveniente desta primeira etapa visto na Fig. (4.23) a seguir:

Figura 4.23 – Mínimo de energia local para o cuboide de Permalloy-79. Neste estado, já houve ação das interações de troca e dipolar, ou seja, já rodamos os duzentos mil passos na LLG.



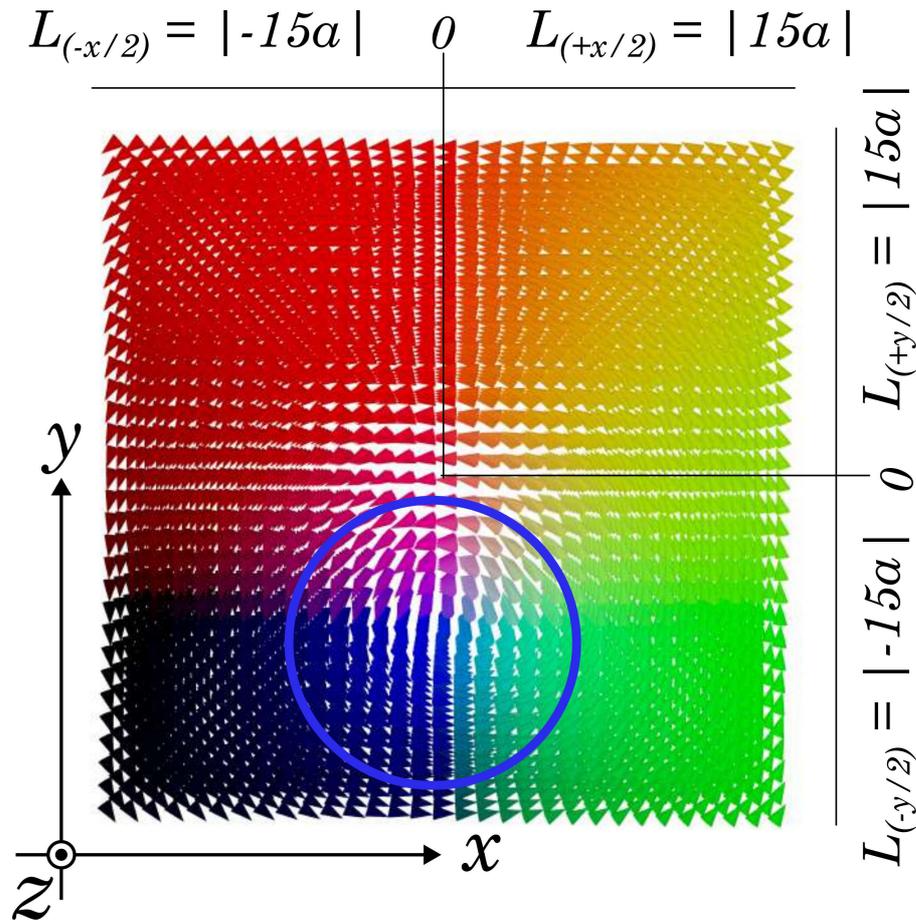
Fonte: Autoria própria (2024).

Deste ponto em diante, há a aplicação de corrente polarizada em *spin*. Na subseção posterior ((4.2.2)) discutimos estes efeitos.

4.2.2 Dinâmica: aplicação de corrente a partir do passo anterior

Nesta etapa da simulação aplicamos de fato uma densidade de corrente no sistema na direção \hat{x} . Os parâmetros utilizados nesta etapa estão explicitados na Tab. (4.8). Como mencionado, consideramos apenas os termos de troca e dipolar. O estado final do sistema já no mínimo de energia global pode ser visto na Fig. (4.24) a seguir:

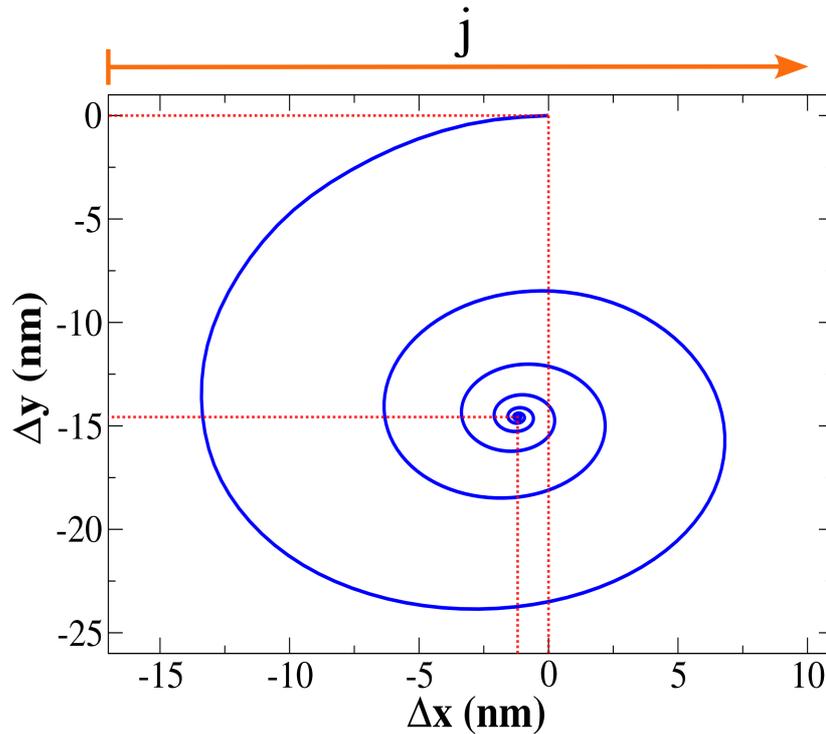
Figura 4.24 – Posição final do vórtice magnético no cuboide de Permalloy-79 no estado de mínimo de energia global. O círculo em azul envolve o vórtice magnético no ponto de deslocamento líquido do vórtice nas direções x e y .



Fonte: Autoria própria (2024).

Na Fig. (4.25) temos a representação visual da trajetória descrita apenas pelo centro do vórtice magnético a partir da posição inicial descrita no subproblema até o ponto em que atinge o mínimo de energia global.

Figura 4.25 – A linha em azul representa a trajetória do centro do vórtice magnético quando este é submetido a ação de uma corrente spin-polarizada na direção \hat{x} . As linhas tracejadas no ponto (0,0) marcam o ponto inicial do vórtice e o outro conjunto de linhas marcam o ponto final do vórtice no estado já relaxado.



Fonte: Autoria própria (2024).

A variação nas posições x e y encontradas foram, $\Delta x = x - x_0 = -1,18$ nm e $\Delta y = y - y_0 = -14,57$ nm, representando uma diferença absoluta de 0,02 e 0,13 nm, respectivamente, em relação a Najafi et al. [20], cujos valores encontrados foram de $\Delta x = -1,20$ nm e $\Delta y = -14,70$ nm.

A escala de tempo de simulação em segundos é encontrada multiplicando-se o número de passos total no tempo pelo número de passos necessários para escrita no arquivo de saída e pelo incremento de tempo Δt , cujo valor utilizado foi de 3×10^{-15} s. Vale ressaltar que este não condiz com o tempo real de execução do programa, que foi de aproximadamente 21 dias para cada bateria de simulação. Desta forma, em nossa escala de tempo normalizada encontramos o tempo total de simulação igual a $[(10 \times 10^6) \cdot (5 \times 10^3) \cdot (3 \times 10^{-15})]$ s = 30×10^{-9} s.

4.2.3 Influência da mudança de parâmetros magnéticos na dinâmica do vórtice

Buscamos com este estudo analisar como se comportam as componentes médias da magnetização x e y frente a mudança da densidade de corrente j_x e do grau de não-adiabaticidade ξ . Segundo Najafi et al. [20], é prevista uma alteração somente em $\langle \mathbf{M}_y \rangle$ em vista da mudança do parâmetro ξ , enquanto uma alteração em \mathbf{j} afetam tanto $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ como $\langle \mathbf{M}_y \rangle$. Nas Figs. (4.26) e (4.27) a seguir temos os resultados obtidos. Vale ressaltar que os gráficos apontam para a média das magnetizações, tomando a soma dos valores dos momentos magnéticos de cada sítio e em cada direção e dividindo-o pelo volume total da amostra, tal como mostra a Eq. (2.14).

Nas Figs. (4.26a-b) temos o perfil da magnetização média das componentes x e y nos intervalos sugeridos de análise do problema-padrão, (4,5 – 6,5 s). Cada *set* de configuração representa uma mudança de 5% em relação aos valores-base para a análise, que são de $\mathbf{j} = 2 \times 10^{12}$ A/m² e $\xi = 0,05$.

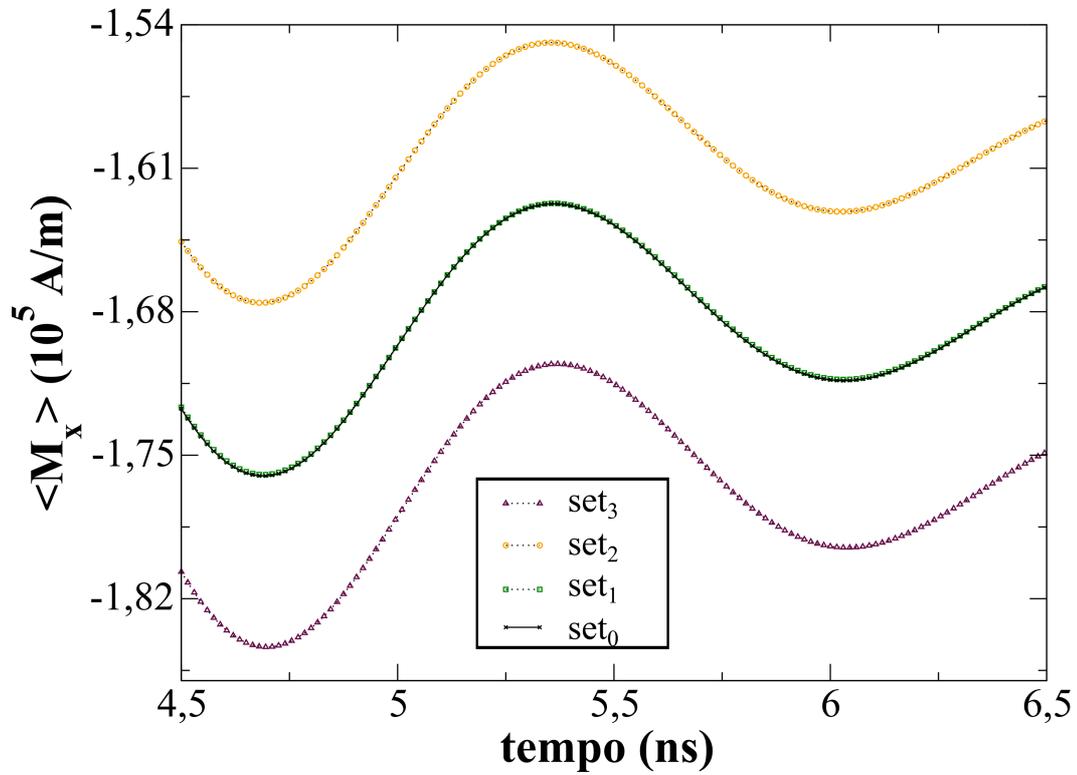
As configurações do *sets* em relação aos valores originais tais como os comportamentos esperados são listados a seguir:

- No *set*₍₁₎, há incremento em ξ mas não há modificação em \mathbf{j} . Devemos observar apenas uma variação da componente y da magnetização, tal comportamento é observado claramente no gráfico, onde o comportamento da magnetização x é inalterado, enquanto a componente y se altera;
- No *set*₍₂₎, incrementamos ξ e decrementamos \mathbf{j} . Aqui, somente deve ocorrer uma mudança no comportamento da componente x da magnetização. Vemos nos gráficos uma pequena variação da componente y , porém não tão evidente quando a mudança translacional em x ;
- Para o *set*₍₃₎, devemos ter um perfil de variação equivalente das componentes médias de $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ e $\langle \mathbf{M}_y \rangle$ em relação ao *set*₍₀₎.

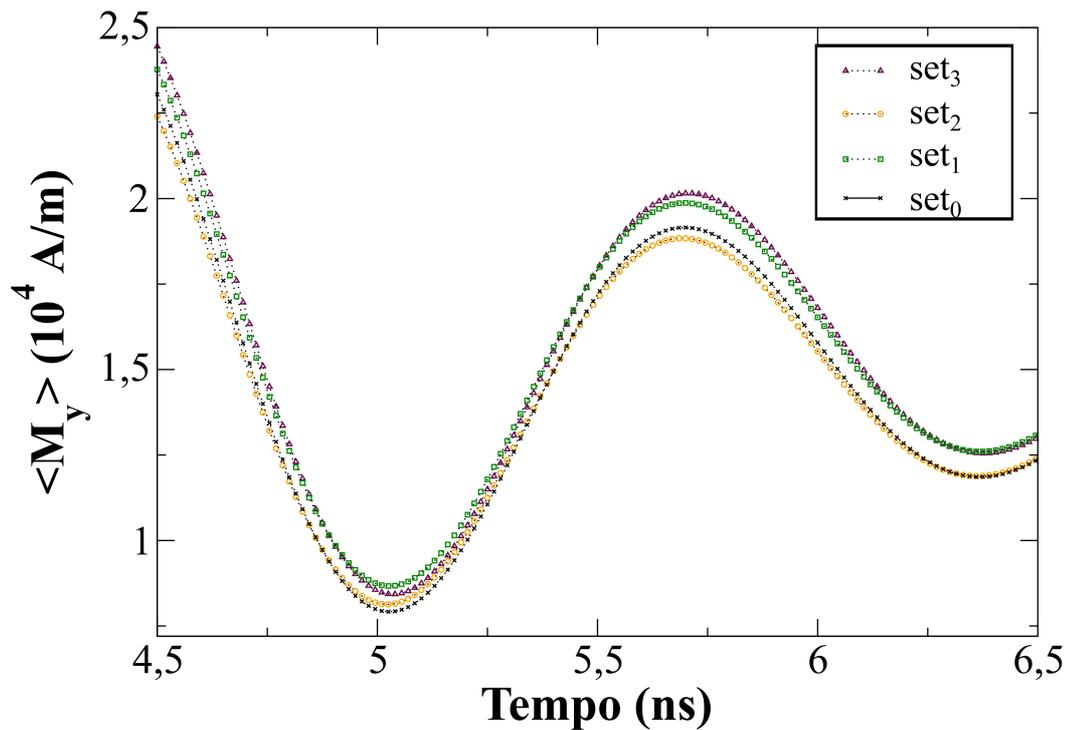
Notamos que no *set*₍₁₎ (destaque em verde), há somente um deslocamento translacional da componente y , assim como esperado. Vemos que o gráfico em preto esta sobreposto ao gráfico em verde, ou seja, não há deslocamento em x . Vemos o comportamento previsto pelo conjunto do *set*₍₂₎ quando observamos o comportamento do gráfico em amarelo, onde está evidenciado o deslocamento apenas da componente x .

Figura 4.26 – Média da componente da magnetização x (a) e y (b) no intervalo 4,5 – 6,5 s para diferentes valores de \mathbf{j} e ξ .

(a)



(b)

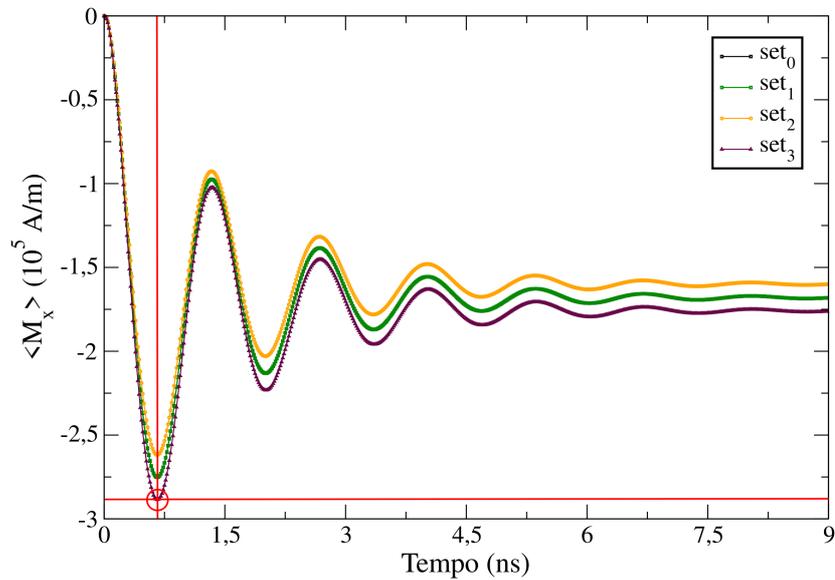


Fonte: Autoria própria (2024).

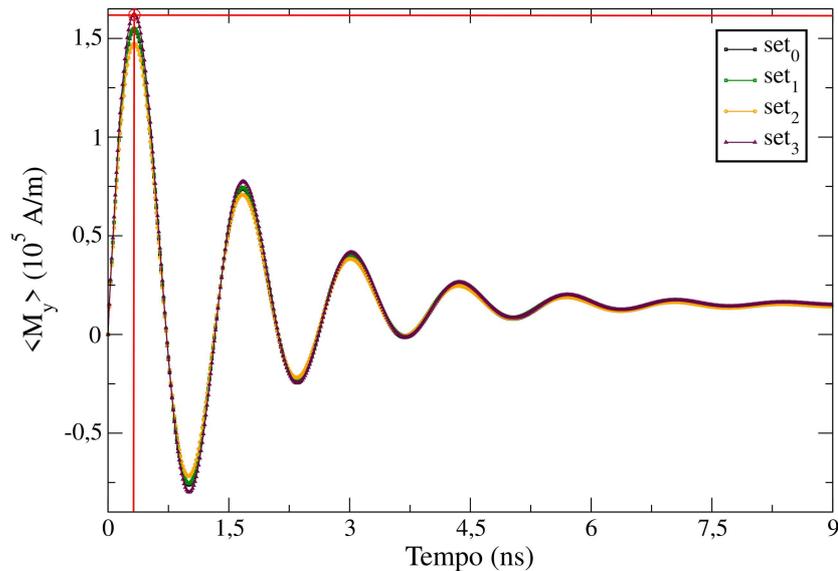
Para analisarmos o $set_{(3)}$, primeiramente temos que analisar outro ponto importante do problema-padrão que diz respeito aos valores máximos de $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ e $\langle \mathbf{M}_y \rangle$. Tem-se como referência 281,61 kA/m para $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ e 157,43 kA/m para $\langle \mathbf{M}_y \rangle$ [20]. Nas Figs. (4.27a) e (4.27a) temos todos os perfis de magnetização x e y . Obtivemos um erro relativo de 2,49% e 2,29% para $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ e $\langle \mathbf{M}_y \rangle$, respectivamente.

Figura 4.27 – Média das componentes da magnetização x (a) e y (b) para o tempo de simulação de 9 ns. O ponto destacado pela intersecção das retas pontilhadas em vermelho evidencia o máximo valor obtido da magnetização, que para (a) ocorreu em 0,66 ns, com o valor de $\langle \mathbf{M}_x \rangle = 288,54$ kA/m e no tempo 0,33 ns para (b), com o valor de $\langle \mathbf{M}_y \rangle = 162,13$ kA/m.

(a)



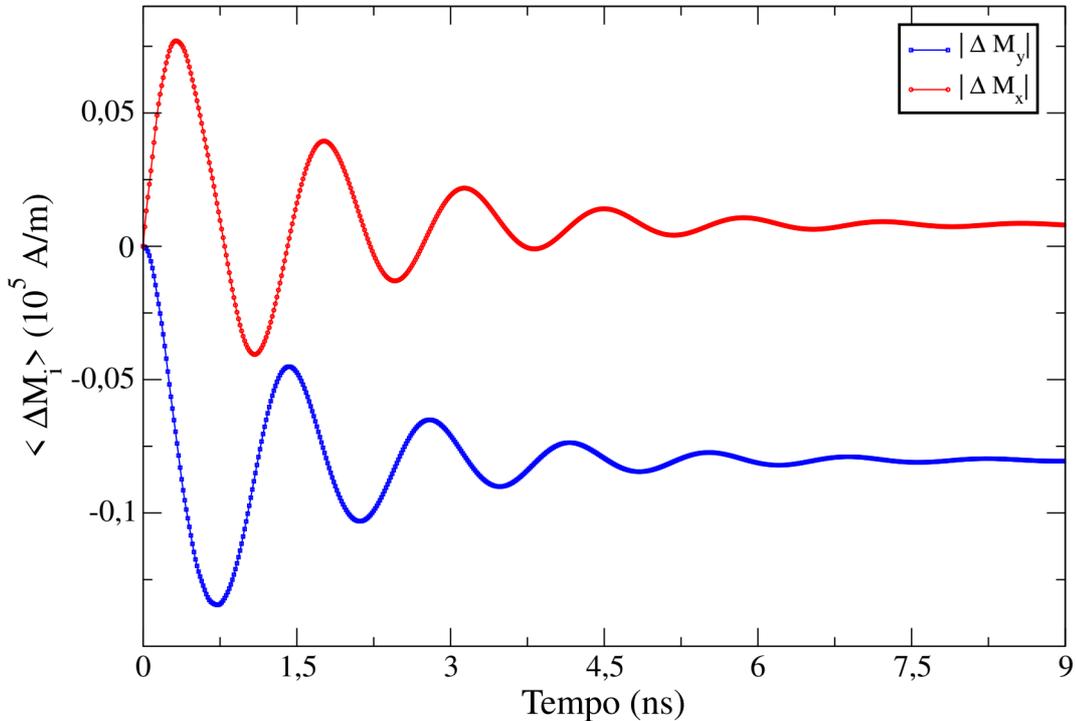
(b)



Fonte: Autoria própria (2024).

Tendo em vista os valores obtidos no gráfico acima, então agora podemos analisar o $\text{set}_{(3)}$. Vemos a Fig. (4.28):

Figura 4.28 – Os gráficos representam a diferença entre a componente x (em vermelho) e y (em azul) do $\text{set}_{(3)}$ em relação ao $\text{set}_{(0)}$.



Fonte: Autoria própria (2024).

Vemos no comportamento do gráfico acima que as componentes têm uma diferença equivalente, sendo deslocadas por uma “fase” no tempo. Isso ocorre devido a uma compensação de uma na outra, visto que a magnetização total deve ser conservada. Quando observamos os picos de máximo de $\langle \mathbf{M}_x \rangle$ e $\langle \mathbf{M}_y \rangle$, vemos que tal “fase” é de 0,33 ns.

No trabalho de Najafi et al. [20] estão reunidos todos os gráficos obtidos por Kruger et al. [42], Vanhaverbeke et al. [44], Fischbacher et al. [45], juntamente com os resultados obtidos nesta dissertação e novamente Kruger et al. [46] mas com seu modelo analítico. Ambos usaram *softwares* de simulação micromagnética diferentes (a exceção dos dois primeiros supracitados, que usaram o OOMMF com extensão STT). Fischbacher et al. [45] usaram o Nmag, enquanto Najafi et al. [20] usou o M³S, em que os erros foram de 1,9% e 3,0% para as componentes x e y da magnetização, enquanto Kruger et al. [46] apresentou os valores mais discrepantes com seu modelo analítico, em que as diferenças foram de 5,7% e 7,2%, respectivamente.

Os resultados descritos na Tab. (4.9) a seguir reúnem os valores médios das componentes x e y da magnetização no estado já relaxado para todos os autores supracitados além dos dados obtidos neste trabalho.

Tabela 4.9 – Média das magnetizações M_x e M_y no estado relaxado obtidas por diferentes autores a partir de diferentes ferramentas de simulação micromagnética no tempo $t = 14$ ns. Todos estes valores foram obtidos a partir de \mathbf{j} e ξ sem os incrementos de 5%.

Ferramentas	$\langle M_x \rangle$ (1×10^5 A/m)	$\langle M_y \rangle$ (1×10^4 A/m)
OOMMF+STT – Krüger	-1,71	1,51
Modelo Analítico – Krüger	-1,78	1,12
OOMM+STT – Vanhaverbeke	-1,71	1,50
M³S - Najafi	-1,71	1,50
NMAG - Fischbacher	-1,72	1,52
Grupo UFJF	-1,68	1,47

Fonte: Dados retirados de Najafi et al. (2009) [20] e de acervo próprio (2024).

Novamente, notamos uma maior discrepância entre os valores obtidos por Kruger et al. [46] em seu modelo analítico. Acreditamos que a pequena diferença encontrada em nossos resultados deve-se ao fato de utilizarmos a interação dipolar ao invés dos usuais campos desmagnetizantes utilizados pelos outros *softwares* de simulação micromagnética.

Capítulo 5

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Conforme mencionando na Introdução desta Dissertação de Mestrado, este trabalho possui como objetivo central a reprodução dos chamados *standard-problems* (problemas-padrão) em micromagnetismo a fim de compor uma coletânea de testes no *software* de simulação micromagnética desenvolvido pelo Grupo de Física da Matéria Condensada (GFMC) com a vertente em micromagnetismo.

Os resultados obtidos nos dois problemas propostos concordaram apreciavelmente com os resultados esperados pela teoria. Especificamente no que se refere ao problema com interação DM no , estudo dos três casos específicos estudados, somente observamos uma maior discrepância entre os resultados obtidos para o caso 1, onde analisamos um nanofio de um material artificial. No entanto, visto que o próprio problema já nos informa que os valores obtidos via simulação micromagnética são ligeiramente distintos daqueles obtidos teoricamente, concluímos que nossos resultados convergiram para os esperados.

Para o estudo dos sistemas bidimensionais, o autor Córtes-Ortuño *et al.* (2018) sugeriu que encontrássemos apenas três estruturas específicas, no entanto, mostramos que nosso programa também é capaz de exibir outros padrões, que são obtidos a partir de outros valores para a *helicidade* (Θ). Neste ponto em específico, nos baseamos nos estudos de Nagaosa e Tokura (2013) [18] (cujos padrões são vistos na Fig. 2.19a) para encontrar os perfis descritos pela teoria. Os resultados estão todos reunidos nas seções 4.1.2 e 4.1.2. O raio do *skyrmion* (r_{sk}) é um dado importante que precisa ser determinado pelo problema, e quanto a isso, obtidos erros absolutos de 0,01 nm do valor esperado.

No que tange ao caso 3 de estudo, (onde tratamos de um tubo de *skyrmions* do tipo Bloch em um cilindro de FeGe), os resultados encontrados também concordaram com a teoria proposta. Verificamos o principal resultado esperado pelo problema que é a inversão de sentido da componente radial da magnetização (m_r) quando analisamos as superfícies inferior e superior do cilindro. O raio do *skyrmion* também era um resultado a ser obtido, e quanto a isso, obtidos erros de 0,03 nm para as superfícies e 0,01 nm para o centro da amostra. Em termos numéricos, esses erros são perfeitamente aceitáveis.

A teoria que embasa o *standard-problem* #5 sugere que usemos interação dipolar em nossas simulações. Neste ponto em específico, cabe um comentário sobre o nosso programa. A maioria dos *softwares* de simulação micromagnética que temos atualmente no mercado como OOMMF [47], GPMagnet [48], Mumax3 [49] e microMagnum [50], utilizam o tratamento por campos desmagnetizantes, que é um efeito que surge em amostras finitas. Nós utilizamos uma abordagem por meio de interação dipolar, onde trabalhamos com

células cúbicas de trabalho discretizadas. Como observado na discussão dos resultados, a abordagem por ambas as metodologias é válida, o que mostra a equivalência dos tratamentos em sistema discretizados e contínuos.

Especificamente sobre os resultados obtidos, obtivemos pequenos erros em relação ao autor que propõe o problema, com destaque para a posição do vórtice, em que tivemos um maior erro na componente y do deslocamento, com 0,13 nm de diferença em relação ao esperado. Em se tratando dos valores máximos obtidos para as componentes x e y , não tivemos acesso aos dados de todos os autores que Najafi *et al.* (2019) [20] mostra, nos limitando a fazer o comparativo apenas com os dados do autor supracitado. O comportamento esperado para os *sets* foram todos observados e o valor no estado relaxado em 14 nm também concorda com os autores a menos erros absolutos de 0,03 – 0,05 para as componentes x e y , como vemos na Tab. (4.9).

No geral, consideramos que nosso programa está apto para ser utilizado em problemas inéditos em micromagnetismo, o que já vem sendo feito em paralelo com os estudos de problemas-padrão, como no caso do artigo já publicado por Farias *et al.* (2023) [51] usando o *software* do grupo no tratamento de skyrmions sujeitos a aplicação de corrente *spin* polarizada em nanofitas curvadas. Além disso, o *standard-problem* #3, que trata do estudo de vórtices em sistemas cúbicos a partir da interação dipolar, também já foi resolvido pelo grupo, e os resultados obtidos concordaram (com uma certa margem de erro) com os resultados propostos.

Temos duas perspectivas futuras, uma delas envolve a publicação de um artigo dos resultados obtidos com esses três problemas-padrão e com outros estudos em andamento do grupo, como a dinâmica de paredes de domínio em nanofitas curvadas sujeitas a uma corrente polarizada em *spin*. Usaremos de tal publicação para servir de referência de confiabilidade de nosso *software* quando outros estudos que o utilizem forem eventualmente feitos. Além disso, desde o início da formulação do programa escrito em Fortran 90 que há um interesse íntimo em utilizar programação paralela a fim de diminuir consideravelmente o tempo real de simulação, fator este que impacta fortemente nos programas que envolvem interação dipolar, constando este então como uma outra perspectiva para o referido grupo de pesquisa.

REFERÊNCIAS

- ¹ YAKOUT, S. M. Spintronics and innovative memory devices: a review on advances in magnetoelectric bifeo₃. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Springer, v. 34, n. 2, p. 317–338, 01 2021. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s10948-020-05764-z>>. Acesso em: 05 de agosto de 2024.
- ² Wikipédia. *Escala nanoscópica*. 2021. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Escala_nanosc%C3%B3pica>. Acesso em: 27 de agosto de 2024.
- ³ Wikipédia. *Circuito Eletrônico*. 2023. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Circuito_eletr%C3%B4nico>. Acesso em: 25 de agosto de 2024.
- ⁴ New World Encyclopedia contributors. *Hard Disk Drive*. 2007. Disponível em: <https://www.newworldencyclopedia.org/entry/Hard_disk_drive>. Acesso em: 21 de agosto de 2024.
- ⁵ Site do Marcelo Lopes. *A estonteante evolução dos discos rígidos*. 2018. Disponível em: <<https://www.marcelolopes.jor.br/noticia/detalhe/14174/a-estonteante-evolucao-dos-discos-rigidos>>. Acesso em: 25 de agosto de 2024.
- ⁶ BAIBICH, M. N. et al. Giant magnetoresistance of (001) fe/(001) cr magnetic superlattices. *Physical review letters*, APS, v. 61, n. 21, p. 2472, 1988. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.61.2472>>. Acesso em: 07 de agosto de 2024.
- ⁷ BINASCH, G. et al. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical review B*, APS, v. 39, n. 7, p. 4828, 1989. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.39.4828>>. Acesso em: 07 de agosto de 2024.
- ⁸ ACCIOLY, A. D. *Estudo do efeito de transferência de spin*. 66 p. Dissertação (Mestrado em Física) — UFRGS, 2011. Disponível em: <<https://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/29508>>. Acesso em: 22 de nov. de 2023.
- ⁹ BERGER, L. Exchange interaction between ferromagnetic domain wall and electric current in very thin metallic films. *Journal of Applied Physics*, American Institute of Physics, v. 55, n. 6, p. 1954–1956, 1984. Disponível em: <<https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/55/6/1954/13285/Exchange-interaction-between-ferromagnetic-domain>>. Acesso em: 07 de agosto de 2024.
- ¹⁰ SLONCZEWSKI, J. C. Current-driven excitation of magnetic multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 159, n. 1-2, p. L1–L7, 1996. Disponível em:

- <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0304885396000625>>.
Acesso em: 07 de agosto de 2024.
- ¹¹ PAIXÃO, E. L. M. da. *Estudo da parede de domínio transversal na presença de impurezas magnéticas sob efeito de corrente elétrica polarizada em spin via simulação micromagnética*. 139 p. Dissertação (Doutorado em Física) — UFJF, 2018. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/7209>>. Acesso em: 20 de maio de 2024.
- ¹² TOSCANO, D. *Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas*. 187 p. Tese (Doutorado em Física) — UFJF, 2015. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/4904>>. Acesso em: 15 de fev. de 2023.
- ¹³ ONO, T. et al. Reversing the magnetic vortex core by electrical current. *Nature Materials*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 3, p. 269–272, 2007. Disponível em: <https://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/sites/icr/topics/topics_070318/>. Acesso em: 21 de agosto de 2024.
- ¹⁴ JUNIOR, M. G. M. *Simulação da dinâmica do micromagnetismo de vórtices implementados em plataformas de programação em paralelo*. 118 p. Dissertação (Mestrado em Física) — UFJF, 2016. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/13514>>. Acesso em: 11 de julho de 2024.
- ¹⁵ YASIN, F. S. et al. Heat current-driven topological spin texture transformations and helical q-vector switching. *Nature Communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 14, n. 1, p. 7094, 2023. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41467-023-42846-7>>. Acesso em: 07 de agosto de 2024.
- ¹⁶ HOFFMANN, M. et al. Skyrmion-antiskyrmion racetrack memory in rank-one dmi materials. *Frontiers in Physics*, Frontiers Media SA, v. 9, p. 769873, 2021. Disponível em: <<https://www.frontiersin.org/journals/physics/articles/10.3389/fphy.2021.769873/full>>. Acesso em: 21 de agosto de 2024.
- ¹⁷ CORTÉS-ORTUÑO, D. et al. Proposal for a micromagnetic standard problem for materials with dzyaloshinskii–moriya interaction. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 20, n. 11, p. 113015, 2018. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/aaea1c>>. Acesso em: 10 de nov. de 2023.
- ¹⁸ NAGAOSA, N.; TOKURA, Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group UK London, v. 8, n. 12, p. 899–911, dez 2013. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/24302027/>>. Acesso em: 20 de out. de 2023.
- ¹⁹ GROUP, M. M. A. *The Mumag Standard Problem*. Gaithersburg, MD: [s.n.], 2008. Disponível em: <<https://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>>. Acesso em: 15 de dez. de 2023.

- ²⁰ NAJAFI, M. et al. Proposal for a standard problem for micromagnetic simulations including spin-transfer torque. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 105, n. 11, 2009. Disponível em: <<https://pubs.aip.org/aip/jap/article/105/11/113914/147406/Proposal-for-a-standard-problem-for-micromagnetic>>. Acesso em: 10 de nov. de 2023.
- ²¹ EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica, Ed.* [S.l.: s.n.], 1979.
- ²² NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de física básica: Eletromagnetismo (vol. 3)*. [S.l.]: Editora Blucher, 2015. v. 3.
- ²³ FARIAS, W. S. *Comportamento estático e dinâmico de skyrmions em nanofitas magnéticas curvadas via simulação micromagnética*. 101 p. Tese (Doutorado em Física) — UFJF, 2023. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/15352>>. Acesso em: 10 de nov. de 2023.
- ²⁴ CHANDLER, D. *Introduction to modern statistical mechanics*. 1. ed. [S.l.]: Oxford University Press, 1987.
- ²⁵ ZHANG, X. et al. Skyrmion-electronics: writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 32, n. 14, p. 143001, jan 2020. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ab5488>>. Acesso em: 15 de out. de 2023.
- ²⁶ FERT, A. et al. From early theories of dzyaloshinskii–moriya interactions in metallic systems to today’s novel roads. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 92, n. 8, p. 081001, 2023. Disponível em: <<https://journals.jps.jp/doi/full/10.7566/JPSJ.92.081001?mobileUi=0>>. Acesso em: 17 de mar. de 2024.
- ²⁷ MORIYA, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical review*, APS, v. 120, n. 1, p. 91, 1960. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.120.91>>. Acesso em: 10 de jan. de 2024.
- ²⁸ QUÍMICA DE COORDENAÇÃO. Disponível em: <<https://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/coord.pdf>>. Acesso em: 22 de agosto de 2024.
- ²⁹ BORISOV, V. et al. Heisenberg and anisotropic exchange interactions in magnetic materials with correlated electronic structure and significant spin-orbit coupling. *Physical Review B*, APS, v. 103, n. 17, p. 174422, 2021. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.103.174422>>. Acesso em: 10 de out. de 2024.
- ³⁰ BOGDANOV, A. N.; YABLONSKII, D. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 95, n. 1, p. 178, 1989. Disponível em: <http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/dn/e_068_01_0101.pdf>. Acesso em: 09 de fev. de 2024.

- ³¹ MUHLBAUER, S. et al. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 323, n. 5916, p. 915–919, 2009. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1166767>>. Acesso em: 14 de fev. de 2024.
- ³² MIAO, B. et al. Experimental realization of two-dimensional artificial skyrmion crystals at room temperature. *Physical Review B*, APS, v. 90, n. 17, p. 174411, 2014. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.90.174411>>. Acesso em: 14 de fev. de 2024.
- ³³ SANTECE, I. A. *Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional Aplicados em Nanofitas de Co/Pt*. 68 p. Dissertação (Mestrado em Física) — UFJF, 2019. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/15879>>. Acesso em: 20 de fev. de 2024.
- ³⁴ ROHART, S.; THIAVILLE, A. Skyrmion confinement in ultrathin film nanostructures in the presence of dzyaloshinskii-moriya interaction. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 184422, Nov 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.184422>>. Acesso em: 17 de mar. de 2024.
- ³⁵ RYBAKOV, F. N.; BORISOV, A. B.; BOGDANOV, A. N. Three-dimensional skyrmion states in thin films of cubic helimagnets. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 87, p. 094424, Mar 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.094424>>. Acesso em: 17 de mar. de 2024.
- ³⁶ HUBERT, A.; SCHÄFER, R. *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*. Springer Science & Business Media, 2008. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-85054-0>>. Acesso em: 02 de outubro de 2024.
- ³⁷ SILVA, J. H. *Estudo via simulação computacional do efeito de impurezas no modo girotrópico em nanodisco magnético*. 94 p. Dissertação (Mestrado em Física) — UFJF, 2011. Disponível em: <<https://repositorio.ufjf.br/jspui/handle/ufjf/3540>>. Acesso em: 02 de outubro de 2024.
- ³⁸ ROCHA, J. C. S. *Um estudo de nano-partículas magnéticas via simulação computacional*. 76 p. Dissertação (Doutorado em Física) — UFMG, 2011. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/1843/BUOS-8S5GZK>>. Acesso em: 02 de outubro de 2024.
- ³⁹ GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE transactions on magnetics*, IEEE, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004. Disponível em: <<https://ieemagnetics.org/presentation/magnetization-dynamics-and-damping>>. Acesso em: 18 de fev. de 2024.
- ⁴⁰ S. ZHANG, Z. LI. Roles of nonequilibrium conduction electrons on the magnetization dynamics of ferromagnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*,

- Physical Review Letters, v. 93, set 2004. Disponível em:
<<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.93.127204>>. Acesso em: 15 de out. de 2023.
- 41 PAIXÃO, E. L. M. et al. Depinning of the transverse domain wall trapped at magnetic impurities patterned in planar nanowires: Control of the wall motion using low-intensity and short-duration current pulses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Science Direct, v. 451, p. 639–646, 2018. Disponível em:
<<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317313148>>. Acesso em: 29 de fev. de 2024.
- 42 KRÜGER, B. et al. Current-driven domain-wall dynamics in curved ferromagnetic nanowires. *Phys. Rev. B*, IOP Publishing, v. 75, p. 054421, fev 2007. Disponível em:
<<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.75.054421>>. Acesso em: 24 de maio de 2024.
- 43 BAZALIY, Y. B.; JONES, B. A.; ZHANG, S.-C. Modification of the landau-lifshitz equation in the presence of a spin-polarized current in colossal- and giant-magnetoresistive materials. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 57, p. R3213–R3216, Feb 1998. Disponível em:
<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.R3213>>. Acesso em: 02 de setembro de 2024.
- 44 VANHAVERBEKE, A.; BISCHOF, A.; ALLENSPACH, R. Control of domain wall polarity by current pulses. American Physical Society, v. 101, p. 107202, Sep 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.107202>>. Acesso em: 24 de maio de 2024.
- 45 FISCHBACHER, T. et al. A systematic approach to multiphysics extensions of finite-element-based micromagnetic simulations: Nmag. *IEEE*, v. 43, p. 2896–2898, May 2007. Disponível em:
<<https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/4202717>>. Acesso em: 24 de maio de 2024.
- 46 KRÜGER, B. et al. Harmonic oscillator model for current-and field-driven magnetic vortices. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 76, n. 22, p. 224426, 12 2007. Disponível em:
<<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.76.224426>>. Acesso em: 24 de maio de 2024.
- 47 OOMMF. Disponível em: <<https://math.nist.gov/oommf/>>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.
- 48 GPMAGNETS. Disponível em: <<https://gp-magnets.com/>>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.
- 49 MUMAX3. Disponível em: <<https://mumax.github.io/>>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.
- 50 MICROMAGNUM. Disponível em:
<<https://github.com/MicroMagnum/MicroMagnum>>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.

- ⁵¹ FARIAS, W.; SANTECE, I.; COURA, P. The influence of curved surfaces on the propagation of skyrmions in a magnetic racetrack. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 568, p. 170386, 2023. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885323000355>>. Acesso em: 08 de julho de 2024.

APÊNDICE A - Conservação do módulo do momento de dipolo magnético na LLG (sem o termo de corrente)

A partir da Eq. (3.4a), aplicamos em ambos os lados um produto escalar em todos os termos e multiplicamos por γ , isso nos dá o seguinte:

$$\left(\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = -\gamma \overbrace{\mathbf{m} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff})}^{\text{Parte 1}} + \frac{\alpha}{|\mathbf{m}|} \underbrace{\mathbf{m} \cdot \left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right)}_{\text{Parte 2}}. \quad (\text{A.1})$$

Vamos tomar a relação vetorial $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$. Se associarmos $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \mathbf{m}$ e $\mathbf{C} = \mathbf{B}^{eff}$ na **Parte 1**; e fizermos $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \mathbf{m}$ e $\mathbf{C} = \frac{d\mathbf{m}}{dt}$ na **Parte 2**, então é possível que escrevamos a seguinte relação:

$$\left(\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = \gamma \mathbf{B}^{eff} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{m}) + \frac{\alpha}{|\mathbf{m}|} \frac{d\mathbf{m}}{dt} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{m}) \quad (\text{A.2})$$

Isso nos mostra diretamente que

$$\boxed{\left(\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = 0} \quad (\text{A.3})$$

ou seja, \mathbf{m} é perpendicular a $\frac{d\mathbf{m}}{dt}$, o que está evidenciado na Fig. (3.1a) e (3.1b).

Para continuar a verificação da invariância do momento de dipolo magnético, temos que garantir que a $d\mathbf{m}/dt$ seja nulo. Vamos utilizar a seguinte relação entre derivadas de um produto escalar: $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})' = \mathbf{A}' \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}'$. Se tomamos $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \mathbf{m}$, então é possível que escrevamos:

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) = \frac{d\mathbf{m}}{dt} \cdot \mathbf{m} + \mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt}. \quad (\text{A.4})$$

Uma vez que vale a comutatividade para o produto escalar entre vetores, ou seja, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$, podemos escrever a Eq. (A.4) acima como:

$$\frac{dm^2}{dt} = 2\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \quad (\text{A.5})$$

Portanto, a partir da Eq. (A.3), mostramos que:

$$\frac{dm^2}{dt} = 0 \quad (\text{A.6})$$

ou seja, o módulo do momento de dipolo magnético se conserva.

APÊNDICE B - Demonstração da forma explícita da LLG (sem o termo de corrente)

Vamos iniciar tomando a Eq. (3.4a) e multiplicar ambos os lados por γ e fazer o produto vetorial de \mathbf{m} em todos os termos. Isso nos dá o seguinte:

$$\left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = -\gamma \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) + \boxed{\frac{\alpha}{|\mathbf{m}|} \mathbf{m} \times \left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right)}. \quad (\text{B.1})$$

Vamos utilizar a identidade vetorial $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C}$. Ao aplicá-la no termo destacado na Eq. (B.1), utilizando o fato de que o produto escalar entre o vetor momento magnético e sua derivada no tempo é nulo e também que $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = A^2$, temos:

$$\left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = -\gamma \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) + \frac{\alpha}{m} \left[\left(\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) - \underbrace{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m})}_{m^2} \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right], \quad (\text{B.2})$$

reorganizando:

$$\left(\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = -\gamma \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) - \alpha m \frac{d\mathbf{m}}{dt}. \quad (\text{B.3})$$

Vamos substituir a relação (B.3) acima na forma implícita da LLG na (3.4a). Isso nos dará que:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff} + \alpha \frac{1}{m\gamma} \left[-\gamma \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) - \alpha m \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right] \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff} - \frac{\alpha}{m} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} \quad (\text{B.5})$$

Ao isolarmos $d\mathbf{m}/dt$, ficamos com:

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff} - \frac{\alpha}{m} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{B}^{eff}) \quad (\text{B.6})$$

Que reescrita para um dos N momentos magnéticos da rede fica:

$$\boxed{\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \left[\mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} + \frac{\alpha}{m} \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) \right]} \quad (\text{B.7})$$

Vale destacar que uma vez que os vetores que compõem a LLG são tridimensionais, devemos resolver 3N equações diferenciais acopladas.