

Universidade Federal de Juiz de Fora
Pós-Graduação em Ciências Exatas
Doutorado em Física

DANILO TOSCANO

**Estudo via simulação computacional da dinâmica
da magnetização em nanomagnetos contendo uma
distribuição de impurezas magnéticas**

Juiz de Fora
Fevereiro de 2015

DANILO TOSCANO

**Estudo via simulação computacional da dinâmica
da magnetização em nanomagnetos contendo uma
distribuição de impurezas magnéticas**

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

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Prof. Dr. Fernando Sato

Juiz de Fora

Fevereiro de 2015

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES
TRABALHOS, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Agradecimentos

- À minha família e aos velhos amigos pela compreensão da minha ausência em inúmeros feriados. A eles dedico esta tese.
- Ao meu orientador, o professor Sidiney, pela orientação, incentivo e confiança em meu trabalho. Expresso a minha sincera gratidão pela oportunidade que me foi dada para aperfeiçoar meus conhecimentos e assim colher os frutos do mestrado. Desculpe pelos momentos de incertezas e muito obrigado por você se preocupar e, sobretudo, agilizar o meu pós-doutorado;
- Aos meus co-orientadores, os professores Pablo, Rodrigo e Sato, que muito me ajudaram não apenas no desenvolvimento e otimização do código computacional mas também pelas discussões e sugestões durante todos esses anos. Sem vocês, com certeza, este trabalho não teria sido realizado;
- Ao professor Bismarck, meu futuro supervisor, pela colaboração em diversos momentos;
- Ao professor Sato com quem aprendi a linguagem Fortran-90 e, em especial, pela sua dedicação ao Laboratório de Simulação Computacional;
- À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de estudos.
- À Pós-graduação e ao grupo de pesquisa pelo apoio financeiro, que tornou possível a minha participação em eventos;
- Ao Domingos pela sua competência e agilidade na secretaria da Pós-graduação em Física;

- Aos discentes que integram ou integraram o grupo de pesquisa, Damião, Evandro, Everton, Josiel, Zé Henrique e Vanessa;
- A todos que porventura, eu tenha me esquecido de mencionar, mas que direta ou indiretamente contribuíram para a elaboração desta tese;
- Aos colegas da Pós-graduação que se revelaram verdadeiros amigos, que não apenas nos momentos felizes estiveram presentes como também nos momentos difíceis. Aqui eu poderia citar alguns nomes, mas provavelmente me esqueceria de outros. A fim de evitar tamanha injustiça, prefiro me conter a alguns nomes curingas, tais como: o famoso Zandro, Vantruil (não sei se é assim que se escreve), o ilustríssimo senhor Samir, a conhecida Samirinha, Elizandra (mais conhecida como Zandra) e Zé Bobim. Se alguma vez você foi chamado por um destes nomes, então com certeza você está dentro da minha lista de amigos que eu deveria ter citado acima.

Resumo

Durante as últimas décadas a dinâmica da magnetização em sistemas nano-estruturados tornou-se um assunto de importância fundamental não apenas para o Micromagnetismo, mas também às suas aplicações tecnológicas. Nanomagnetos são sistemas interessantes para estudar estruturas magnéticas exóticas, tais como vórtices, skyrmions e paredes de domínio. A compreensão das propriedades estáticas e dinâmicas dessas configurações de spins em nano-escala é um requerimento crucial para a realização de futuros dispositivos baseados em spintrônica. Devido à anisotropia de forma que se origina da interação dipolar, as configurações magnéticas que surgem em sistemas nano-estruturados são bastante sensíveis à forma geométrica e às dimensões do nanomagneto. Este trabalho é focado no estudo de nanomagnetos planares, nos formatos de disco e fita, feitos com um material magnético macio como o Permalloy. O vórtice magnético é observado num nanodisco com dimensões adequadas, porque ele é um estado intermediário entre os regimes de mono e multi-domínio. Sob condições apropriadas, uma única parede de domínio transversal pode ser experimentalmente injetada num nanofio retangular. Tanto o núcleo do vórtice quanto a parede de domínio comportam-se como quasipartículas, cujas propriedades podem ser manipuladas por um agente externo (campo magnético ou corrente de spin-polarizado). Para pequenas amplitudes de excitação, é sabido que o núcleo do vórtice descreve um movimento circular (modo girotrópico), enquanto que a parede de domínio transversal fica restrita a um movimento unidimensional. Neste regime, cada quasipartícula evolui sem mudar a sua polaridade; uma propriedade estrutural associada a um estado duplamente degenerado. Para uma amplitude de excitação forte o suficiente, a quasipartícula sofre uma deformação na sua estrutura, tal que a ocorre a inversão da polaridade. Do ponto de vista tecnológico, o controle do mecanismo de reversão da polaridade é fundamental, porque essa degenerescência de dois estados pode funcionar como “zero” ou “um”, sendo útil para codificar informação no armazenamento de dados ou mesmo para realizar operações lógicas. Alguns trabalhos reportaram que nanomagnetos contendo defeitos podem influenciar ou modificar fortemente a dinâmica da quasipartícula. Imperfeições são geradas durante o processo de fabricação dos nanomagnetos, ou então elas podem ser intencionalmente incorporadas para uma finalidade específica. Como exemplo, a fim de controlar o movimento da parede de domínio é muito importante impor determinadas posições ao longo do nanofio onde a parede possa parar. Há várias maneiras de se estabelecer tais pontos críticos para a quasipartícula. Variações na geometria do nanomagneto, cavidades, entalhes e assim por diante podem ser classificadas como defeitos não-magnéticos. Em geral, esse tipo de defeito funciona como um centro atrator para a quasipartícula. Um defeito magnético surge a partir de uma falta de homogeneidade do meio magnético, ou seja, uma variação local das propriedades magnéticas. Num trabalho anterior, nosso grupo modelou uma impureza magnética como uma variação local da constante de troca. Como um resultado imediato da inserção de uma impureza magnética no nanomagneto, demonstramos via simulações numéricas, que impurezas magnéticas podem induzir dois tipos de armadilhas para a quasipartícula: uma redução local da constante de troca corresponde a um sítio de aprisionamento (poço de potencial), enquanto que um aumento local da constante de troca representa um sítio

de bloqueio (barreira de potencial). Esta tese investiga a dinâmica da quasipartícula confinada por uma distribuição de impurezas magnéticas: para o caso do núcleo do vórtice considerou-se um anel de impurezas, concêntrico ao nanodisco; para o caso da parede de domínio foi considerado dois aglomerados de impurezas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio. Os resultados obtidos para o nanodisco modificado mostraram que é possível modular a frequência girotrópica do núcleo do vórtice, que depende fortemente da razão de aspecto do disco (espessura/diâmetro). Num disco com o anel de impurezas, um ajuste fino na frequência girotrópica pode ser obtido pela variação dos parâmetros do anel. Além disso, foi observado que a inversão da polaridade do núcleo do vórtice pode ocorrer devido à interação entre o núcleo do vórtice com o anel; a reversão da polaridade num disco com o anel requer amplitudes de excitação menores do que aquelas requeridas no disco sem o anel. Os resultados obtidos para o nanofio modificado indicaram que é possível controlar posição da parede de domínio transversal; a parede pode ser movida de um aglomerado até o outro pela simples inversão do sentido do campo magnético aplicado. A reversão da polaridade da parede de domínio transversal também foi investigada e o uso dessa distribuição de impurezas mostrou-se útil para estabilizar o movimento da parede que ocorre após a inversão da polaridade; assim a mudança da polaridade ocorre de uma forma rápida e reversível. Como um exemplo de aplicação desse nanofio modificado, propomos o seu uso como uma célula num dispositivo de memória não-volátil, que usa 2 bits por célula; ou seja, a informação pode ser armazenada tanto na posição quanto na polaridade da parede de domínio transversal. Embora os resultados apresentados aqui sejam para simples distribuições de impurezas magnéticas acreditamos que as suas consequências possam ser planejadas e estendidas para o desenvolvimento e realização de futuros dispositivos.

Palavras-chave: Nanodiscos. Vórtice. Modo girotrópico. Reversão da polaridade. Nanofios. Parede de domínio transversal. Impurezas magnéticas.

Abstract

During the last decades the magnetization dynamics in nanostructured systems has become a subject of relevance from fundamental micromagnetism as well as for their new potential technological applications. Nanomagnets are interesting systems to study exotic magnetic structures like vortices, skyrmions and domain walls. The detailed understanding of the static and dynamic properties of these nanoscale spin configurations is a crucial requirement for the realization of future spintronic device. Due to the shape anisotropy that originates from dipolar interaction, the magnetic configurations that emerge in nanostructured systems are very sensitive to the geometric form and dimensions of the nanomagnet. This work is focused on the study of planar nanomagnets, in the formats of disk and strip, made of a soft magnetic material like Permalloy. The magnetic vortex is observed in a nanodisk with appropriate dimensions, because it is an intermediate state between the mono and multi-domain regimes. Under suitable conditions, a single transverse domain wall can be experimentally injected into a rectangular nanowire. Both the vortex core and the wall behaves as a quasiparticle, whose the properties can be manipulated by an external agent (magnetic field or spin polarized current). At low excitation amplitudes, it is known that the vortex describes a circular movement, whereas the wall is restricted to an unidirectional movement. In this regime, each quasiparticle evolves without changing its polarity; a structural property associated with a two-fold degenerate state. For an excitation amplitude strong enough, the quasiparticle experiences a deformation on its structure so that, it occurs the switching of the polarity. From the technological point of view, the control of the polarity reversing mechanism is fundamental, because this two-fold degeneracy can work as “zero” or “one”, being useful to encode information for data storage or even to perform logical operations. Some works reported that nanomagnets containing defects can influence or modify strongly the dynamic of the quasiparticle. Imperfections are generated during the fabrication process of the nanomagnets or else they can be intentionally incorporated for a specific purpose. As an example, in order to control the domain wall motion it is very important to impose certain positions along the nanowire where the wall can stop. There are several means of establishing such critical points for the quasiparticle. Variations of geometry, cavities, notches, and so on can be classified as non-magnetic defects. Generally, this type of defect acts as a pinning site for the quasiparticle. A magnetic defect emerges from an inhomogeneity of the magnetic environment, in other words, a local variation of the magnetic properties. In a previous study, our team has modeled a magnetic impurity as a local variation of the exchange constant. As an immediate result of the insertion of a magnetic impurity into a nanomagnet, we have demonstrated via numerical simulations that magnetic impurities can induce two types of traps for the quasiparticle: a local reduction of the exchange constant corresponds to a pinning site (potential well), whereas a local increase of the exchange constant represents a blocking site (potential barrier). This thesis investigates the dynamic of the quasiparticle confined by a distribution of magnetic impurities: for the case of the vortex core it has been considered a ring of impurities, concentric to the nanodisk; and for the case of the domain wall it has been considered two clusters of impurities, identical and equidistant from the nanowire width axis. The found results

for the modified nanodisk have shown that it is possible to modulate the gyrotropic frequency that depends strongly on the disk aspect ratio (thickness/diameter). In a disk with the ring of magnetic impurities, a fine tuning of the gyrotropic frequency can be obtained by varying of the ring parameters. Furthermore, it was found that the polarity switching of the vortex core can occur due to the interaction between the vortex core and the ring; the polarity reversing in a disk with a ring requires smaller excitation amplitudes than the disk without the ring does. The found results for the nanowire have indicated that it is possible to control the transverse domain wall position; the wall can be moved from a cluster to the other by simply reversing of the magnetic field direction. The switching of the transverse domain wall polarity was also investigated and the use of this impurity distribution demonstrated to be useful to stabilize the motion wall motion after occurring polarity reversal; thus the changing of the polarity occurs in a fast and reversible way. As an example of the application of this modified nanowire, we propose its use as a cell in a nonvolatile memory device based on 2 bits per cell, in other words, the information can be encoded in the position as well as the polarity of the transverse domain wall. Although the results presented here are for a very simple distribution of magnetic impurities, we believe their consequences can be planned and extended for the design and realization of future devices.

Keywords: Nanodisks. Vortex. Gyrotropic mode. Polarity switching. Nanowire. Transverse domain wall. Magnetic impurities.

Lista de Figuras

- Figura 1.1 - Representação esquemática de filmes finos contendo réplicas de um dado nanomagneto. A magnetização de cada elemento pode apontar em dois sentidos, correspondendo ao estado binário: “0” ou “1”. Assim cada nanomagneto, apresentando a configuração de monodomínio, representa ou corresponde a 1 bit. 24
- Figura 1.2 - Possíveis configurações para o estado fundamental de um nanodisco feito com um material magnético macio. Nanodiscos com diâmetros abaixo de um certo diâmetro crítico apresentam a configuração cebola (a), enquanto que nanodiscos com diâmetros acima de um certo diâmetro crítico apresentam a configuração de vórtice. 26
- Figura 1.3 - Representação do estado de vórtice num nanodisco magnético. Trata-se de uma configuração dos momentos magnéticos em três dimensões. A figura (a), temos uma visão superior, que enfatiza a circulação dos momentos magnéticos no plano do disco, sendo que na região em vermelho os momentos magnéticos saem do plano. Na figura (b) tem-se uma visão lateral, que ressalta a componente perpendicular ao plano do disco, ou seja, o núcleo do vórtice. 27
- Figura 1.4 - Os quatro estados possíveis para a configuração do vórtice magnético. Degenerescência do estado de vórtice para um nanodisco, as quatro possíveis combinações de quiralidade e polaridade. Figura retirada da referência (11). 28

- Figura 1.5 - A reversão da magnetização num nanofio retangular compreende dois fenômenos importantes: a nucleação e a propagação de uma parede de domínio. Quando um campo magnético é aplicado no sentido contrário ao da magnetização, uma parede de domínio é nucleada numa das extremidades do nanofio, à medida que o domínio com magnetização no sentido do campo vai crescendo, a parede de domínio vai se propagando através do nanofio. Se a parede for expelida pela extremidade oposta àquela em que ela foi criada, ocorre a reversão da magnetização do nanofio. Evitando que isso ocorra, o nanofio magnético pode apresentar uma única parede de domínio, que está limitada a um movimento unidimensional. Figura adaptada da referência (52). 31
- Figura 1.6 - Representação esquemática para as duas topologias de uma parede de domínio que pode ser nucleadas num nanofio planar. (a) Uma estrutura de domínios antiparalelos na configuração cabeça-com-cabeça, sendo a parede de domínio representada por uma linha pontilhada. Na fronteira entre os domínios pode haver (b) uma parede de domínio do tipo transversal ou (c) uma parede de domínio do tipo vórtice. Figura retirada da referência (55). 32
- Figura 1.7 - As duas polaridades possíveis para uma parede de domínio transversal. 32
- Figura 1.8 - Representação esquemática de um nanodisco modificado. Os círculos em azul representam as impurezas magnéticas e o modo como elas foram distribuídas define o anel de impurezas magnéticas. O anel pode corresponder a um arranjo de impurezas atrativas ou repulsivas. 37
- Figura 1.9 - Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, dois aglomerados de impurezas magnéticas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio. O par de aglomerados de impurezas pode atuar como uma armadilha de aprisionamento ou como uma armadilha de bloqueio. 37

- Figura 2.1 - Linhas de campo para a indução magnética e campo magnético, $\vec{B}$ e $\vec{H}$, para uma esfera uniformemente magnetizada, $\vec{M} = M\hat{z}$. As linhas de $\vec{B}$ são contínuas e fechadas, entretanto as de $\vec{H}$ não. As linhas de campo de $\vec{H}$ são descontínuas porque na superfície da esfera há uma densidade superficial de carga de magnetização σ_M . Figura adaptada da referência (101). 49
- Figura 2.2 - Representação esquemática para a origem do campo desmagnetizante, ou seja, o campo magnético dentro da amostra. O campo magnético fora da amostra não é mostrado nesta figura. Os momentos magnéticos da amostra são representados por pequenos ímãs. (a) No interior da amostra pólos magnéticos são compensados pelos pólos do momento magnético adjacente. (b) Nas bordas do material, onde os pólos não são compensados, há o surgimento de pólos livres. Pode-se dizer que o campo desmagnetizante é gerado por uma densidade de “cargas magnéticas” no próprio material. Figura retirada da referência (102). 49
- Figura 2.3 - Exemplos de amostras em que a configuração da magnetização é tal que o campo magnetostático é nulo, tanto dentro quanto fora da amostra. Devido à geometria, os pólos magnéticos são mutuamente compensados, resultado num campo desmagnetizante nulo. Se o fluxo da magnetização for interrompido, por exemplo, removendo um pedaço do anel ou da moldura de quadro, a amostra passa a se comportar como um ímã. Nas extremidades onde foi feito o “corte” haverá pólos magnéticos não compensados e, dessa forma, tem-se um ímã no formato de ferradura. Figura retirada da referência (103). 50
- Figura 2.4 - Magnetização $\vec{M}$, campo magnético $\vec{H}$ e indução magnética $\vec{B}$ para um elipsoide uniformemente magnetizado. Dentro da amostra, $\vec{H} = -N\vec{M}$ e $\vec{B} = \mu_0(1 - N)\vec{M}$. Fora da amostra, $\vec{M} = \vec{0}$ e $\vec{B} = \mu_0\vec{H}$. Figura retirada da referência (103). 54
- Figura 2.5 - Elipsoide apresentando uma magnetização numa direção arbitrária. É possível decompor $\vec{M}$ em termos das suas componentes em relação aos eixos principais do elipsoide. . 56

Figura 2.6 - Esferoides (elipsoides de revolução). O eixo de simetria de rotação é o eixo z. Um esferoide prolato é caracterizado por $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{c}{a} > 1$ enquanto que um esferoide oblato é caracterizado por $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{c}{a} < 1$	59
Figura 2.7 - Ordenamento magnético. A figura (a) ilustra um paramagneto que é desordenado magneticamente. As figuras (b) e (c) ilustram sistemas que são ordenados magneticamente, um ferromagneto e um antiferromagneto, respectivamente. Figura retirada da referência (105).	64
Figura 2.8 - Representação esquemática de materias ordenados magneticamente. (a) Ferromagneto - uma rede ou mais sub-redes com magnetizações paralelas, resultando numa magnetização total não nula. (b) Antiferromagneto - a rede é dividida em duas sub-redes com magnetizações anti-paralelas e de mesmo módulo, resultando numa magnetização total nula. (c) Ferrimagneto - a rede também é dividida em duas sub-redes com magnetizações anti-paralelas mas com módulos diferentes, resultando numa magnetização total não nula. Figura retirada da referência (105).	64
Figura 3.1 - O torque de precessão e o torque de amortecimento agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência (112). . .	76
Figura 3.2 - Evolução temporal de um único momento magnético. Na dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$), o momento magnético apenas processiona em torno do campo; o sistema é conservativo. Já na dinâmica com amortecimento ($\alpha > 0$) o momento magnético espirala em torno do campo, quando o alinhamento é atingido, o torque total é nulo e a energia do sistema é mínima. Figura adaptada da referência (52).	76

Figura 3.3 - Trajetórias no espaço de fase para o núcleo do vórtice, considerando o sistema como conservativo $D = 0$. Nas figuras (a) e (b) um campo magnético $\mathbf{B} = [0; 2]$ é mantido ligado, o núcleo do vórtice parte da origem e gira no sentido horário ou anti-horário dependendo da sua polaridade. O ponto no qual ele gira depende do sentido do campo e também da sua quiralidade, neste caso $\mathbf{X}_c = [-2; 0]$. Em (c) o campo magnético externo é nulo, assim se o núcleo do vórtice está na origem, ele permanece. Por outro lado, se ele está deslocado, ele gira em torno dela, pois neste caso é $\mathbf{X}_c = [0; 0]$	90
Figura 3.4 - Trajetórias no espaço de fase para o núcleo do vórtice, considerando o sistema como dissipativo $D = 0.025$. O núcleo é caracterizado por $(p = 1, q = 1)$ e um campo magnético constante é aplicado no sentido positivo do eixo-x, $\mathbf{B} = [2; 0]$. O vórtice parte da origem e espirala em torno do ponto $\mathbf{X}_c = [0; 2]$ no sentido anti-horário, uma vez que $p = 1$. Uma reta horizontal em azul, $X_2 = 2$, foi plotada para realçar o ponto crítico.	91
Figura 4.1 - Representação esquemática da aproximação micromagnética. (a) Sistema real, constituído por muitos momentos atômicos. (b) Sistema equivalente do ponto de vista micromagnético, os momentos magnéticos atômicos são substituídos por um momento magnético resultante localizado no centro de cada célula, ou seja, o momento magnético da célula.	104
Figura 4.2 - Célula convencional de uma estrutura cúbica de face centrada.	111
Figura 4.3 - Representação esquemática de um aglomerado de impurezas magnéticas incorporado a um nanomagnet. Por simplicidade, os momentos magnéticos estão distribuídos numa rede quadrada. Os sítios em roxo representam impurezas magnéticas, correspondendo aos sítios do material do hóspede. J caracteriza a constante de troca das interações entre sítios do material hospedeiro. J' descreve a constante de troca das interações do tipo mista, que acoplam um sítio do material hóspede e outro do material hospedeiro. J'' representa a constante de troca das interações entre dois sítios do material hóspede, isto é a constante das interações impureza-impureza.	113

Figura 5.1 - Representação esquemática de um nanodisco modificado, contendo uma distribuição circular de impurezas. Os círculos em azul representam as impurezas magnéticas e o modo como elas foram distribuídas define o anel de impurezas magnéticas, que é concêntrico ao disco. Figura retirada da referência (128).	116
Figura 5.2 - Perfil do pulso de campo magnético usado para perturbar o estado de vórtice.	117
Figura 5.3 - Dependência da frequência girotrópica com os parâmetros do anel de impurezas magnéticas. Gráfico da frequência girotrópica f em função do diâmetro do anel de impurezas magnéticas d' para alguns valores da variação local da constante de troca J'/J . Figura adaptada da referência (128).	118
Figura 5.4 - Resposta da polaridade desde o instante em que o pulso de campo magnético foi aplicado. Gráfico da polaridade em função do tempo. A inversão da polaridade ocorre devido a interação entre o núcleo do vórtice e uma impureza magnética caracterizada por uma redução local na constante de troca, $J'/J < 1$	119
Figura 5.5 - Diagrama do controle da polaridade do núcleo do vórtice em nanodiscos contendo um anel de impurezas magnéticas. Triângulos em vermelho representam combinações de parâmetros em que a polaridade pôde ser controlada, ou seja, após a aplicação do pulso, ocorreu uma única inversão da polaridade. Círculos em preto incluem os seguintes eventos: inversões múltiplas, nenhuma inversão ou a captura do núcleo do vórtice. Figura adaptada da referência (128).	120
Figura 5.6 - Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, duas impurezas magnéticas, idênticas e equidistantes do eixo da largura do nanofio. Os pontos marcados com (*) representam impurezas magnéticas; elas podem atuar como sítios de aprisionamento ou sítios de bloqueio. Figura adaptada da referência (129).	122

Figura 5.7 - Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, duas impurezas magnéticas, idênticas e equidistantes do eixo da largura do nanofio. Os pontos marcados com (*) representam impurezas magnéticas; elas podem atuar como sítios de aprisionamento ou sítios de bloqueio. Figura adaptada da referência (129).	122
Figura 5.8 - Perfil do pulso de campo magnético usado para mover a parede de domínio transversal.	123
Figura 5.9 - Algumas posições de equilíbrio do sistema que foram usadas como configurações iniciais. Nas figuras (a) e (b) as impurezas são caracterizadas por $J'/J < 1$ assim a parede encontra-se aprisionada pela impureza da direita. Nas figuras (c) e (d) as impurezas são caracterizadas por $J'/J > 1$ assim a parede encontra-se bloqueada pela impureza da direita.	124
Figura 5.10 - Diagrama de eventos para o controle da posição da parede de domínio transversal usando um par de impurezas magnéticas atuando como poços de potencial. Triângulos em preto representam combinações de parâmetros em que a parede de domínio permaneceu presa à impureza da direita. Quadrados em vermelho correspondem às situações em que o movimento da parede pôde ser controlado, ou seja, após a aplicação do pulso, a parede foi desprendida da impureza da direita, a parede então se moveu rumo a impureza da esquerda e em seguida foi aprisionada. Quadrados em azul representam eventos em que a parede foi desprendida da impureza da direita, mas em seguida ela foi expelida por uma das extremidades do nanofio. Não há uma região de quadrados em vermelho nas figuras (c) e (d) porque não há uma terceira impureza mais à direita, que seria capaz de prender a parede. Figura adaptada da referência (129).	126

Figura 5.11 - Diagrama de eventos para o controle da posição da parede de domínio transversal usando um par de impurezas magnéticas atuando como barreiras de potencial. Triângulos em preto correspondem a combinações de parâmetros em que a parede permaneceu na sua posição de equilíbrio, nas proximidades da impureza da direita. Quadrados em vermelho correspondem às situações em que o movimento da parede pôde ser controlado, ou seja, após a aplicação do pulso, a parede se moveu rumo a impureza da esquerda e em seguida foi bloqueada. Quadrados em azul representam eventos em que a parede superou a barreira criada por uma impureza, mas em seguida ela foi expelida por uma das extremidades do nanofio. Não há uma região de quadrados em vermelho nas figuras (c) e (d) porque não há uma terceira impureza mais à direita, que seria capaz de bloquear a parede. Triângulos em vermelho nas figuras (b) e (d) representam o evento em que a parede foi rebatida pela armadilha de bloqueio; essa situação particular ocorre sempre que o pulso de campo e os efeitos de repulsão são muito intensos. Figura adaptada da referência (129). 128

Figura 5.12 - Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, dois aglomerados de impurezas magnéticas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio. O par de aglomerados de impurezas pode atuar como uma armadilha de aprisionamento ou como uma armadilha de bloqueio. 129

Figura 5.13 - Algumas posições de equilíbrio do sistema que foram usadas como configurações iniciais. Nas figuras (a) e (c) os aglomerados de impurezas são caracterizadas por $J''/J < 1$, assim, a parede encontra-se aprisionada pelo aglomerado da direita. Nas figuras (b) e (d) os aglomerados de impurezas são caracterizadas por $J''/J > 1$, dessa forma, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da direita. 131

Figura 5.14 - Perfil do pulso de campo magnético usado para excitar a mudança da polaridade da parede de domínio transversal. 132

Figura 5.15 - Diagrama de eventos para o controle da posição depois da ocorrência de uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal usando um par de armadilhas. Quadrados em preto incluem eventos em que ocorreu a inversão da polaridade, mas a parede foi imediatamente expelida por uma das extremidades do fio. Triângulos correspondem a combinações de parâmetros para os quais a posição da parede pode ser controlada depois da ocorrência de uma única inversão da polaridade. Triângulos em vermelho representam eventos em que ocorreu apenas a inversão da polaridade (a parede retornou à sua posição inicial com a polaridade invertida); um exemplo desse evento pode ser visualizado na figura (5.16). Triângulos em azul indicam eventos em que tanto a polaridade quanto a posição da parede foram intercambiados (a parede com a polaridade invertida permaneceu na posição oposta à sua posição inicial); um exemplo desse outro evento pode ser visualizado na figura (5.17). 134

Figura 5.16 - Configurações instantâneas durante o controle da posição após uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal. Nesta simulação o par de aglomerados de impurezas magnéticas era caracterizado pelos seguintes parâmetros $D_c = 300$ [nm] e $J''/J = 2,0$. A parede de domínio foi excitada usando um pulso de campo magnético com duração de 1 [ns] e intensidade de 17,5 [mT]. A figura (a) mostra a configuração inicial de equilíbrio da parede em $t = 0$, antes do pulso ter sido aplicado. As figuras de (b) até (i) mostram configurações instantâneas depois de 0,14; 0,28; 0,52; 0,68; 0,77; 0,87; 1,01; 5,06 [ns], respectivamente. A simulação para tempos posteriores mostra que a posição da parede em $t = 5,06$ [ns] é uma configuração de equilíbrio (Novamente, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da direita.). Com essa sequência de configurações instantâneas para a dinâmica da magnetização podemos ver que a parede de domínio retornou à sua posição inicial com a polaridade invertida. Esse evento corresponde aos triângulos em vermelho da figura (5.15). 135

Figura 5.17 - Configurações instantâneas durante o controle da posição após uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal. Nesta simulação o par de aglomerados de impurezas magnéticas era caracterizado pelos seguintes parâmetros $D_c = 300$ [nm] e $J''/J = 2,0$. A parede de domínio foi excitada usando um pulso de campo magnético com duração de 1 [ns] e intensidade de 18,0 [mT]. A figura (a) mostra a configuração inicial de equilíbrio da parede em $t = 0$, antes do pulso ter sido aplicado. As figuras de (b) até (i) mostram configurações instantâneas depois de 0,28; 0,52; 0,68; 0,77; 0,87; 1,01; 1,24; 5,36 [ns], respectivamente. A simulação para tempos posteriores mostra que a posição da parede em $t = 5,36$ [ns] é uma configuração de equilíbrio (Agora, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da esquerda.). Com essa sequência de configurações instantâneas para a dinâmica da magnetização podemos ver que a parede com a polaridade invertida permaneceu na posição oposta à sua posição inicial. Esse evento corresponde aos triângulos em azul da figura (5.15). . 136

Figura 5.18 - Os quatro estados possíveis para a configuração de uma única parede de domínio transversal confinada entre dois aglomerados de impurezas magnéticas. A posição da parede é mapeada por M_x , a componente da magnetização ao longo do eixo do comprimento do nanofio. Enquanto que a polaridade é mapeada por M_y , a componente da magnetização ao longo do eixo da largura. 138

Figura 6.1 - A parede de domínio transversal pode ocorrer em duas configurações: cabeça-com-cabeça ou cauda-com-cauda. Essa nomenclatura surge da orientação relativa das magnetizações dos domínios antiparalelos (a) e (c). Em (b) nota-se que a parede na configuração cabeça-com-cabeça é mais estreita no pólo sul da parede, ou seja, a região da parede em que os momentos magnéticos estão entrando pela lateral do nanofio. Por outro lado, em (c) nota-se que a parede na configuração cauda-com-cauda é mais estreita no pólo norte da parede, ou seja, a região da parede em que os momentos magnéticos estão saindo pela lateral do nanofio. 140

Figura 6.2 - Representação esquemática de um nanofio contendo várias paredes de domínio, paredes adjacentes se alternam entre as configurações cabeça-com-cabeça e cauda-com-cauda.	140
Figura 6.3 - Representação esquemática da atração e subsequente aniquilação de duas paredes de domínio transversal apresentando polaridades paralelas.	141
Figura 6.4 - Representação esquemática da repulsão entre de duas paredes de domínio transversal apresentando polaridades antiparalelas.	142
Figura C.1 - Representação esquemática do campo de forças devido a um anel de impurezas, $\vec{F}_a = \pm \hat{r} \Delta k r$, que atua sobre o núcleo do vórtice, quando este se encontra dentro e fora do anel, a circunferência em azul. A circunferência em vermelho representa a fronteira do nanodisco. A força desmagnetizante sempre aponta para o centro do disco, $\vec{F}_k = -\hat{r} k r$, essa força não está representada nesta figura. A força desmagnetizante efetiva é $\vec{F} = -\hat{r} k' r = \vec{F}_k + \vec{F}_a$, em que $\vec{F}_k$ é o componente dominante, uma vez que $ \vec{F}_a \ll \vec{F}_k $. Dessa forma, dependendo do tipo do anel (que pode ser constituído por impurezas magnéticas do tipo atrativa ou do tipo repulsiva) e também da região onde o núcleo do vórtice descreve a trajetória girotrópica (dentro ou fora do anel) a constante elástica efetiva k' pode ser aumentada ($k' > k$) ou diminuída ($k' < k$). Para um nanodisco sem o anel, a equação de Thiele prevê que a frequência girotrópica é proporcional à constante elástica ($\omega \propto k$). Assim, num nanodisco com o anel de impurezas magnéticas, a frequência girotrópica pode ser aumentada ou diminuída uma vez que ($\omega' \propto k'$). Portanto, num nanodisco contendo o anel de impurezas magnéticas é possível modular a frequência girotrópica.	167

Sumário

1	INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO	24
1.1	VÓRTICE MAGNÉTICO NUM NANODISCO	25
1.2	PAREDE DE DOMÍNIO TRANSVERSAL NUM NANOFIO RETANGULAR	30
1.3	UMA VISÃO GERAL SOBRE ESTA TESE	35
2	INTERAÇÕES FUNDAMENTAIS EM MATERIAIS MAGNÉTICOS	38
2.1	ALGUNS CONCEITOS FUNDAMENTAIS	38
2.2	INTERAÇÃO ZEEMAN	40
2.2.1	Energia Zeeman	42
2.3	INTERAÇÃO DIPOLAR	42
2.3.1	Energia magnetostática	45
2.3.2	Anisotropia de forma	53
2.4	INTERAÇÃO DE TROCA	63
2.4.1	Modelo de Heisenberg	65
2.4.2	Energia de troca	69
3	DINÂMICA DA MAGNETIZAÇÃO	74
3.1	A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT	75
3.2	A EQUAÇÃO DE THIELE PARA O VÓRTICE NUM NANODISCO	80

4	MODELAGEM COMPUTACIONAL DE NANOMAGNETOS	102
4.1	HAMILTONIANA DE UM NANOMAGNETO	102
4.2	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	104
4.3	PARÂMETROS DO MATERIAL E UMA ESTIMATIVA PARA O NÚMERO DE MOMENTOS MAGNÉTICOS ATÔMICOS NUMA CÉLULA MICRO- MAGNÉTICA	111
4.4	MODELO DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS	112
4.4.1	Simulação micromagnética de um nanomagnetos contendo impurezas magnéticas	114
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	115
5.1	NANODISCOS MAGNÉTICOS CONTENDO UM ANEL DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS	115
5.1.1	Modulação da frequência girotrópica	117
5.1.2	Controle da polaridade do núcleo do vórtice	118
5.2	NANOFIOS MAGNÉTICOS CONTENDO DOIS AGLOMERADOS DE IM- PUREZAS MAGNÉTICAS	121
5.2.1	Controle da posição da parede de domínio transversal	121
5.2.2	Controle da polaridade da parede de domínio transversal	129
6	CONCLUSÕES, PERSPECTIVAS E TRABALHOS FUTUROS	139
6.1	CONCLUSÕES	139
6.2	PERSPECTIVAS	139
6.3	TRABALHOS FUTUROS	140

REFERÊNCIAS	143
Apêndice A – Interação de troca entre dois spins	151
Apêndice B – Métodos numéricos para a integração da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	159
Apêndice C – Modulação frequência girotrópica através do anel de impurezas magnéticas: uma explicação qualitativa dada pela equação de Thiele	162
Anexo A – TRABALHOS PUBLICADOS	168

1 INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO

Materiais magnéticos são empregados em inúmeras aplicações tecnológicas, dentre as quais se destaca a gravação magnética. A crescente demanda por dispositivos cada vez mais rápidos e com grande capacidade de armazenamento, tem impulsionado o desenvolvimento de materiais magnéticos nanoestruturados (1–4), que são conhecidos como nanomagnetos.

Nano-estruturas podem ser fabricadas numa ampla variedade de geometrias. Um filme fino contendo réplicas de um dado nanomagneto pode ser usado como mídia para a gravação de dados em futuros discos rígidos ou em memórias magnéticas não-voláteis. A informação seria armazenada em elementos discretos, as chamadas partículas monodomínio, cuja magnetização pode apontar em qualquer um dos dois sentidos do eixo de fácil. Essa situação corresponde a um estado binário: “0” ou “1”. Portanto, cada um desses nanomagnetos é capaz de armazenar um bit de dados.

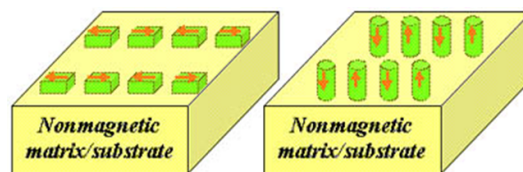


Figura 1.1 – Representação esquemática de filmes finos contendo réplicas de um dado nanomagneto. A magnetização de cada elemento pode apontar em dois sentidos, correspondendo ao estado binário: “0” ou “1”. Assim cada nanomagneto, apresentando a configuração de monodomínio, representa ou corresponde a 1 bit.

De uma forma geral, amostras ferromagnéticas apresentam uma estrutura de domínios magnéticos, que se formam para reduzir a energia magnetostática. Entretanto, para amostras com dimensões nanométricas, a sub-divisão em domínios pode não ser conveniente do ponto

de vista energético. Partículas monodomínio são muito comuns na escala nanométrica e, isso se deve ao fato do tamanho da partícula ser da mesma ordem de grandeza do que alguns comprimentos característicos em Nanomagnetismo, tais como o comprimento de troca e a largura de uma parede de domínio.

Nesta escala do comprimento, a configuração de monodomínio não é a única possível, desde que as condições sejam favoráveis, outras configurações mais interessantes podem ocorrer. A interação dipolar dá origem à anisotropia de forma e as configurações magnéticas que surgem em nano-escala são bastante sensíveis à forma geométrica e às dimensões do nanomagnet. Portanto, materiais magnéticos nanoestruturados podem ser fabricados para apresentarem diferentes estados de magnetização.

Nanomagnetos são sistemas interessantes para estudar estruturas magnéticas exóticas, tais como vórtices, skyrmions e paredes de domínio. A compreensão das propriedades estáticas e dinâmicas dessas configurações de spins em nano-escala é um requerimento crucial para a realização de futuros dispositivos baseados em spintrônica.

Este trabalho é focado no estudo de nanomagnetos planares, nos formatos de disco e fita, feitos com um material macio, como o Permalloy.

1.1 VÓRTICE MAGNÉTICO NUM NANODISCO

O **vórtice magnético** é observado em nanodiscos ferromagnéticos com diâmetros da ordem de centenas de nanômetros (5–9), trata-se de uma configuração rotacional de momentos magnéticos que ocorre como um estado intermediário entre os regimes de mono e multidomínio (10). Nanodiscos com diâmetros abaixo de um certo diâmetro crítico, cerca de 100 [nm], apresentam uma estrutura de monodomínio, que às vezes é referenciada como **cebola**, veja, a figura (1.2).

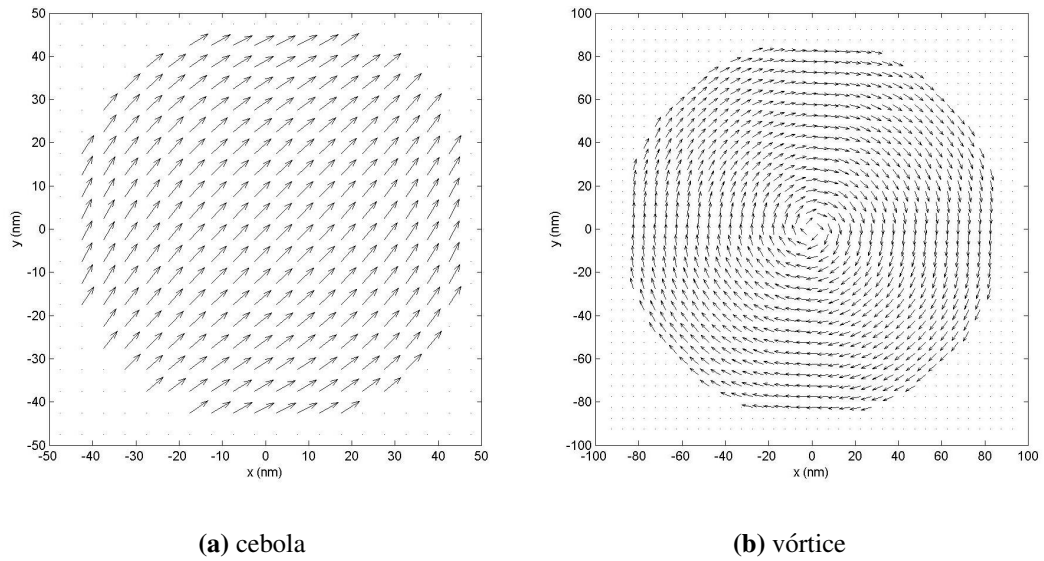


Figura 1.2 – Possíveis configurações para o estado fundamental de um nanodisco feito com um material magnético macio. Nanodiscos com diâmetros abaixo de um certo diâmetro crítico apresentam a configuração cebola (a), enquanto que nanodiscos com diâmetros acima de um certo diâmetro crítico apresentam a configuração de vórtice.

O vórtice magnético é uma estrutura tridimensional de momentos magnéticos. A maioria dos momentos magnéticos estão confinados no plano do disco, mas numa pequena região, denominada o **núcleo do vórtice**, eles desenvolvem um componente que é perpendicular ao plano do disco, veja a figura (1.3).

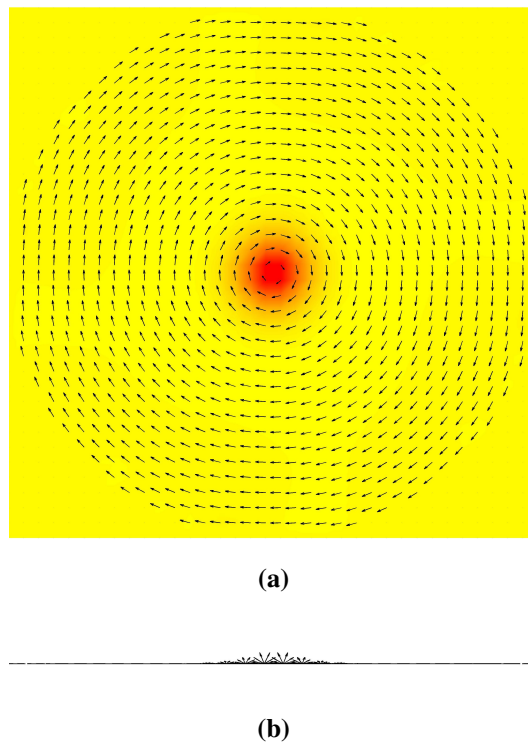


Figura 1.3 – Representação do estado de vórtice num nanodisco magnético. Trata-se de uma configuração dos momentos magnéticos em três dimensões. A figura (a), temos uma visão superior, que enfatiza a circulação dos momentos magnéticos no plano do disco, sendo que na região em vermelho os momentos magnéticos saem do plano. Na figura (b) tem-se uma visão lateral, que ressalta a componente perpendicular ao plano do disco, ou seja, o núcleo do vórtice.

A configuração de vórtice é caracterizado por dois parâmetros: **quiralidade** e **polaridade**. A quiralidade especifica o sentido da circulação dos momentos magnéticos, ela pode ser horária ou anti-horária. A polaridade especifica o sentido em que os momentos magnéticos que se projetam para fora do plano, eles podem apontar para cima ou para baixo em relação ao eixo da espessura do nanodisco.

A polaridade e a quiralidade são mutuamente independentes, de forma que o estado de vórtice é **quadruplamente degenerado**, veja a figura (1.4). Vórtices ocorrem em nanomagnetos “grandes”, mas em compensação, eles são muito estáveis e além disso, apresentam a capacidade de armazenar o dobro de informação em relação a uma partícula monodomínio. Um nanodisco apresentando um vórtice magnético pode armazenar até 2 bits de dados: um na quiralidade e outro na polaridade (11, 12).

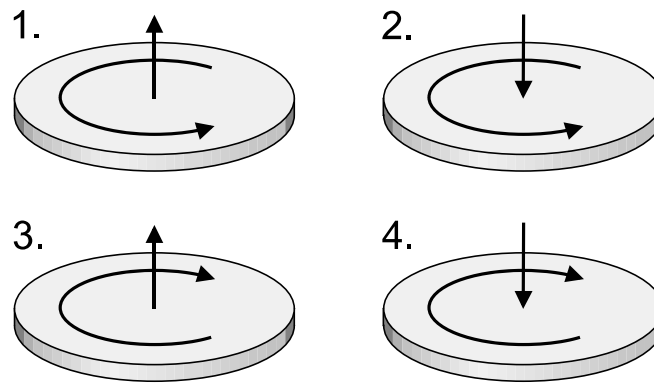


Figura 1.4 – Os quatro estados possíveis para a configuração do vórtice magnético. Degenerescência do estado de vórtice para um nanodisco, as quatro possíveis combinações de quiralidade e polaridade. Figura retirada da referência (11).

Para detectar a quiralidade (5, 13–15) pode-se usar a microscopia de Lorentz (LM - “*Lorentz Microscopy*”) ou a microscopia eletrônica de foto-emissão (PEEM - “*Photoemission Electron Microscopy*”). A polaridade (7, 13) pode ser detectada através da Microscopia de Força Magnética (MFM - “*Magnetic Force Microscopy*”).

O efeito mais simples induzido por uma perturbação aplicada no plano do disco é o deslocamento do núcleo do vórtice da sua posição de equilíbrio. Desde que o núcleo seja polarizado, ele descreve um movimento elíptico que é conhecido como **modo girotrópico** (14, 16–22). O sentido do giro do núcleo do vórtice depende apenas da sua polaridade. A frequência girotrópica é da ordem de algumas centenas de [MHz], sendo que essa autofrequência depende fortemente da razão de aspecto do disco. A dinâmica do vórtice apresenta um fraco amortecimento, assim, se a perturbação for desligada, o núcleo do vórtice acaba retornando para a sua posição de equilíbrio; o centro do disco.

Na referência (23) foi observado que não basta o vórtice ter polaridade não-nula para que o movimento girotrópico seja excitado, existe um valor mínimo na componente da magnetização fora do plano para que tal movimento seja observado. No caso de discos de Permalloy, a “altura do chapéu” encontra-se acima do valor crítico, de forma que o modo girotrópico sempre é observado.

A inversão da polaridade, mediante a aplicação de um campo perpendicular ao plano do nanodisco e sentido contrário à polaridade, foi reportado na referência (24). Essa forma de controlar a polaridade apresenta a vantagem de que o núcleo do vórtice permanece estático na sua posição de equilíbrio, entretanto, ela requer amplitudes de campo muito altas. Para se ter uma ideia (24), num disco de permalloy (Py-80, $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$) com diâmetro de 1 $[\mu\text{m}]$ e espessura 80 [nm], foi necessária uma amplitude de 2.5 [kOe] ≈ 0.25 [T] para que ocorresse a reversão da polaridade. Simulações numéricas realizadas com pulsos de campo magnético muito curtos [ps] e intensos 0.5 [T], aplicados nessa mesma direção, mostraram que era possível controlar a reversão quiralidade em nanodiscos (25). Uma forma alternativa para a inversão da quiralidade pode ser encontrada na referência (26), em que um campo magnético não homogêneo foi aplicado no plano do disco.

A reversão da inversão da polaridade do vórtice com um campo magnético oscilatório aplicado no plano do nanodisco foi observado experimentalmente (19). Esse esquema de inverter a polaridade exige amplitudes pouco intensas, da ordem de [mT], representando um grande avanço em relação aos métodos que empregavam campos perpendiculares ao plano do disco. A inversão da polaridade usando uma corrente de spin-polarizado foi previsto teoricamente (27) e observado experimentalmente (28). É sabido que a inversão da polaridade do núcleo do vórtice é mediada pela criação e aniquilação de um par vórtice-antivórtice (19, 27–34).

Também foi notado que o modo girotrópico podia ser usado para controlar a reversão da polaridade do núcleo do vórtice (35). Usando um agente externo oscilatório no modo ressonante, foi constatado que a inversão da polaridade ocorria sempre que o núcleo do vórtice atingia uma certa velocidade crítica ¹.

Durante os últimos anos, observou-se que dinâmica do núcleo do vórtice era influenciada pela presença de defeitos no nanodisco, tendo sido constatado que o núcleo do vórtice era atraído por um defeito não-magnético, por exemplo, uma vacância (ausência de momento magnético). O aprisionamento do núcleo do vórtice por uma cavidade foi previsto teoricamente (36) e observado experimentalmente (37). Tanto o modelo teórico quanto simulações

¹ Essa velocidade crítica depende do material, para o Permalloy ela foi estimada em 320 [m / s].

micromagnéticas descrevendo defeitos do tipo cavidade apresentaram boa concordância com os resultados experimentais (38–40). Portanto, pode-se dizer que um “buraco” no nanodisco atua como um sítio atrator para o núcleo do vórtice. A interação vórtice-buraco pode resultar na modificação da frequência natural do modo girotrópico (41, 42). Se o núcleo do vórtice for capturado, a sua magnetização fora do plano é substancialmente reduzida e, em alguns, ela pode desaparecer. Neste caso, o modo girotrópico é interrompido (43, 44). Uma amplitude de excitação forte o suficiente é capaz de fazer com que o núcleo do vórtice escape da cavidade (40). Além disso, simulações numéricas indicaram que a reversão da polaridade do vórtice podia ocorrer devido à interação do núcleo do vórtice com um defeito não-magnético (45). Um modelo para defeitos estruturais em nanomagnetos foi proposto na referência (46), tal modelo descrevia dois tipos de defeitos que podia corresponder a sítios de aprisionamento ou de espalhamento. Os autores levantaram a seguinte questão: É conhecido que impurezas não-magnéticas podem atuar como sítios de aprisionamento, mas o que poderia se comportar como sítios de espalhamento? A resposta a essa pergunta foi abordada na referência (47), em que foi observado que o núcleo do vórtice podia ser tanto atraído quanto repellido por impurezas magnéticas.

1.2 PAREDE DE DOMÍNIO TRANSVERSAL NUM NANOFIO RETANGULAR

Nesta tese também foi estudado nanofios magnéticos retangulares, ou seja, nanofitas magnética ². Do ponto de vista físico, um nanofio planar é interessante porque ele pode comportar uma estrutura com apenas dois domínios magnéticos, cujas magnetizações apontam em sentidos opostos ao longo do eixo do comprimento do nanofio; o eixo fácil. Assim, é possível estudar a dinâmica de uma única parede de domínio ³. Sob condições apropriadas é possível experimentalmente injetar uma única parede de domínio num nanofio (48–51). Como mostrado na figura (1.5), devido à anisotropia de forma, os momentos magnéticos encontram-se alinhados da direção do eixo do comprimento do nanofio, formando um monodomínio (a). Quando

² Na literatura, o termo nanofita não é muito usual, nanofio planar ou nanofio retangular são os termos mais usados.

³ Essa configuração magnética é induzida a partir de um estado de monodomínio, na literatura é comum dizer que a parede é nucleada ou injetada num nanofio.

um campo magnético é aplicado contra a magnetização, uma parede de domínio é nucleada na extremidade do nanofio (b) e o processo de reversão da magnetização ocorre via a propagação da parede através do nanofio (c). Se um aparato experimental for montado de forma a impedir que a parede seja expelida, o nanofio é capaz de comportar uma parede de domínio que está restrita a se mover numa única direção.

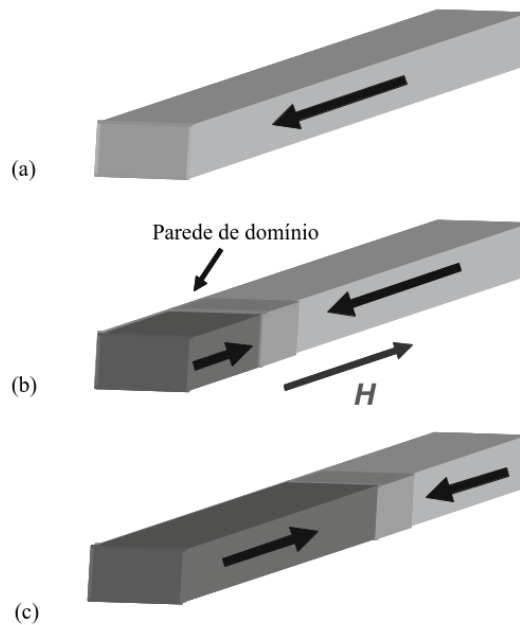


Figura 1.5 – A reversão da magnetização num nanofio retangular compreende dois fenômenos importantes: a nucleação e a propagação de uma parede de domínio. Quando um campo magnético é aplicado no sentido contrário ao da magnetização, uma parede de domínio é nucleada numa das extremidades do nanofio, à medida que o domínio com magnetização no sentido do campo vai crescendo, a parede de domínio vai se propagando através do nanofio. Se a parede for expelida pela extremidade oposta àquela em que ela foi criada, ocorre a reversão da magnetização do nanofio. Evitando que isso ocorra, o nanofio magnético pode apresentar uma única parede de domínio, que está limitada a um movimento unidimensional. Figura adaptada da referência (52).

A parede de domínio presente num nanofio retangular, feito com um material magnético macio, pode apresentar duas topologias, veja a figura (1.6). A **parede do tipo transversal** ocorre em nanofios mais finos e estreitos, enquanto que a **parede do tipo vórtice** é energeticamente favorável em nanofios mais espessos e mais largos (53, 54).

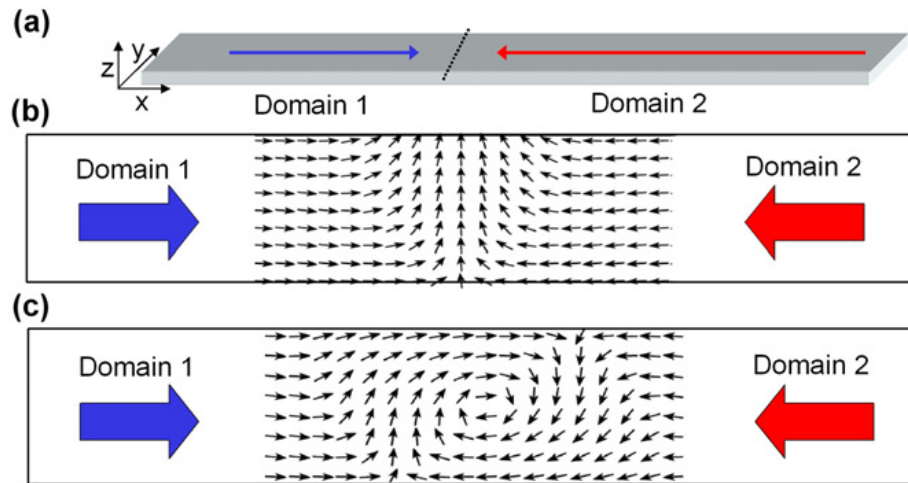
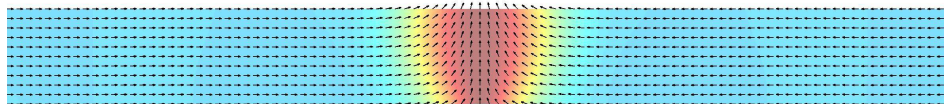
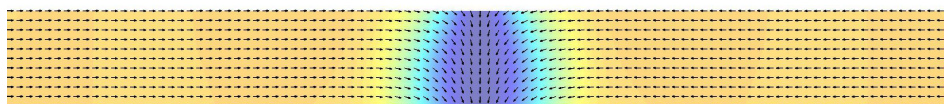


Figura 1.6 – Representação esquemática para as duas topologias de uma parede de domínio que pode ser nucleadas num nanofio planar. (a) Uma estrutura de domínios antiparalelos na configuração cabeça-com-cabeça, sendo a parede de domínio representada por uma linha pontilhada. Na fronteira entre os domínios pode haver (b) uma parede de domínio do tipo transversal ou (c) uma parede de domínio do tipo vórtice. Figura retirada da referência (55).

Este trabalho é focado num único tipo de parede: a parede de domínio transversal. Neste tipo de parede, os momentos magnéticos estão confinados no plano da nanofita. E na fronteira entre os domínios, os momentos magnéticos desenvolvem uma componente que é perpendicular ao eixo do comprimento da nanofita. Isso permite que eles variem gradualmente, de um domínio até o outro. A **polaridade**⁴ é uma propriedade estrutural que especifica o sentido dos momentos magnéticos da parede, que podem estar apontando ou para cima ou para baixo, em relação ao eixo da largura do nanofio, veja a figura (1.7).



(a) Parede de domínio transversal com polaridade para cima



(b) Parede de domínio transversal com polaridade para baixo

Figura 1.7 – As duas polaridades possíveis para uma parede de domínio transversal.

⁴ É importante ressaltar que alguns trabalhos se referem a esta propriedade estrutural da parede de domínio transversal como quiralidade ao invés de polaridade.

O controle do movimento de uma parede de domínio num nanofio é fundamental para a realização de futuros dispositivos baseados em spintrônica. Esses dispositivos poderiam ser empregados tanto para realizar operações lógicas (56, 57) quanto para codificar informação no armazenamento magnético (58, 59).

Uma parede de domínio pode ser manipulada por um campo magnético (60–65) ou por uma corrente de spin-polarizado (48, 66–68). Qualquer que seja o agente externo, a parede está restrita a se mover ao longo do eixo do comprimento do nanofio. É sabido que um campo magnético uniforme não pode ser usado para mover múltiplas paredes de domínio num nanofio. Neste caso, a manipulação do conjunto de paredes é feita usando uma corrente de spin-polarizado, pois isso evita que paredes adjacentes colidam e, eventualmente, se aniquilem (69). Quando uma corrente é aplicada num nanofio contendo várias paredes de domínio, o padrão de paredes se move coerentemente no sentido do fluxo de elétrons. Um futuro dispositivo conhecido como memória pista de corrida para bits “*racetrack memory*” (58) explora justamente esse fenômeno. Além da “*racetrack memory*”, um outro conceito para uma célula de memória multibit que emprega as propriedades estruturais da parede de domínio transversal aprisionada ao redor de entalhes feitos nas laterais do nanofio foi proposto por D. Atkinson *et al.* (70).

Para pequenas amplitudes de excitação, é sabido que a parede de domínio transversal move-se sem mudar a sua polaridade. Por outro lado, quando a parede se propaga sob a influência de uma amplitude suficientemente elevada, ela experimenta uma deformação na sua estrutura e isso pode ocasionar a inversão da sua polaridade. O colapso de Walker (71) (“*Walker breakdown*”) é acompanhado por transformações periódicas da parede na estrutura da parede de domínio via nucleação e aniquilação de um antivórtice. Uma vez que o antivórtice não é uma configuração magnética estável, a parede de domínio transversal permanece com uma das duas polaridades quando a amplitude de excitação for desligada (72). Para uma amplitude de excitação muito grande, pode ocorrer várias inversões da polaridade, ou mesmo, uma mudança na topologia da parede, isto é, a parede do tipo transversal transforma-se numa parede do tipo vórtice e vice-versa.

A inversão da polaridade da parede de domínio transversal foi observada experimentalmente num nanofio de dupla camada Permalloy / Ferro (73). Num trabalho bem interessante (74), os autores investigaram a propagação da parede num nanofio contendo um entalhe numa das suas bordas. Foi constatado que o potencial de aprisionamento dependia da polaridade da parede e foi apontado que isso poderia ser usado como um filtro de polaridade ⁵. A dinâmica da parede sob a influência de campos transversais foi estudada na referência (75).

Um dispositivo de memória capaz de armazenar informação na polaridade da parede foi proposto recentemente (76). O nanofio apresenta o formato de uma ampulheta e a parede de domínio permanece presa no centro geométrico do nanofio, onde se encontra o afunilamento do nanofio ⁶. Ao ser deslocada da sua posição de equilíbrio, os momentos magnéticos da parede projetam-se para fora do plano e dão um giro de π em torno do eixo do comprimento do nanofio. Ao final do processo, a parede retorna a sua posição inicial com a polaridade invertida.

Previamente foi reportado (62) que a reversão da polaridade da parede de domínio transversal é mediada pela nucleação e aniquilação de um antivórtice. A Física básica que descreve o mecanismo de inversão da polaridade foi amplamente discutida e pode ser encontrada na referência (77).

Diante do que foi dito, pode-se dizer que praticamente quase todos os dispositivos que são baseados no movimento de paredes de domínio requerem armadilhas para fixá-las em posições bem definidas ao longo do nanofio. Essas armadilhas definem pontos críticos, que podem ser sítios de aprisionamento ou sítios de bloqueio, correspondendo respectivamente a poços ou barreiras de potencial para a parede de domínio. A inclusão de tais armadilhas para as paredes de domínio num nanofio tem sido realizada basicamente de duas maneiras, pela variação local da geometria do nanofio (70, 78–87) ou então pela variação local das suas propriedades magnéticas (88–99).

⁵ Isto é, a parede com uma certa polaridade podia se mover livremente, enquanto que na polaridade oposta a parede era capturada pelo entalhe.

⁶ Esse estreitamento do nanofio define um ponto de equilíbrio estável para a parede.

1.3 UMA VISÃO GERAL SOBRE ESTA TESE

Tanto o núcleo do vórtice quanto a parede de domínio exibem o comportamento de uma quasipartícula, cujas propriedades podem ser manipuladas por um agente externo, que pode ser um campo magnético ou uma corrente de spin-polarizado. Para pequenas amplitudes de excitação, o núcleo do vórtice descreve um movimento circular, enquanto que a parede de domínio está restrita a um movimento unidimensional.

Para uma amplitude de excitação forte o suficiente, a quasipartícula sofre uma deformação na sua estrutura, tal que a ocorre a inversão da polaridade. O intervalo de tempo para a inversão da polaridade da quasipartícula é da ordem de nanossegundos. No caso do vórtice, a inversão da polaridade é mediada pela criação e aniquilação de uma par vórtice-antivórtice. Já no caso da parede de domínio transversal, a reversão da polaridade é feita por intermédio da nucleação e aniquilação de um antivórtice.

Imperfeições são geradas durante o processo de fabricação dos nanomagnetos e, em muitos casos, elas são intencionalmente incorporadas para uma finalidade específica. Por exemplo, para controlar o movimento da parede de domínio é muito importante impor certas posições ao longo do nanofio onde a parede possa parar. Há várias maneiras de se estabelecer tais pontos críticos para a quasipartícula. Variações na geometria do nanomagneto, cavidades, entalhes podem ser classificados como defeitos não-magnéticos. Em geral, esse tipo de defeito funciona como um centro atrator para a quasipartícula.

Um defeito magnético surge de uma falta de homogeneidade do meio magnético, ou seja, uma variação local das propriedades magnéticas do meio. Num trabalho anterior, nosso grupo modelou uma impureza magnética por uma variação local da constante de troca (47). Um resultado imediato da inserção de uma impureza magnética num nanodisco foi que núcleo do vórtice podia ser atraído ou repellido por impurezas magnéticas. Uma atração era observada se a impureza fosse caracterizada por uma redução local na constante de troca. Por outro lado, uma repulsão era ocorria se no local da impureza havia um aumento da constante de troca. O

alcance da interação vórtice-impureza foi estimado em 10 [nm]. Logo depois foi constatado que a frequência girotrópica era ligeiramente modificada quando o núcleo do vórtice descrevia sua trajetória nas proximidades de uma impureza magnética (100). Posteriormente, impurezas magnéticas foram inseridas num nanofio e os mesmos comportamentos de atração e repulsão foram também observados para o caso da parede de domínio transversal (99). Neste trabalho, ficou evidente que o nosso modelo de impurezas apresentava as seguintes propriedades: Uma impureza magnética caracterizada por uma redução local na constante de troca funciona como um poço de potencial para a quasipartícula, enquanto que uma outra caracterizada por um aumento local corresponde a uma barreira de potencial.

Esta tese investiga a dinâmica da quasipartícula confinada por uma distribuição de impurezas magnéticas. Para o caso do núcleo do vórtice, considerou-se um anel de impurezas, concêntrico ao nanodisco, veja a figura (1.8). E para o caso da parede de domínio foi considerado dois aglomerados de impurezas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio, veja a figura (1.9). Com uma distribuição radialmente simétrica, o núcleo do vórtice sofreria sucessivas interações com as impurezas, durante o movimento girotrópico. Dessa forma, era esperado que a frequência girotrópica fosse modificada de uma forma mais eficiente. Já com um arranjo de impurezas linearmente espaçado seria possível estabilizar o movimento da parede, em outras palavras, queríamos que a parede parasse nessas posições pré-definidas.

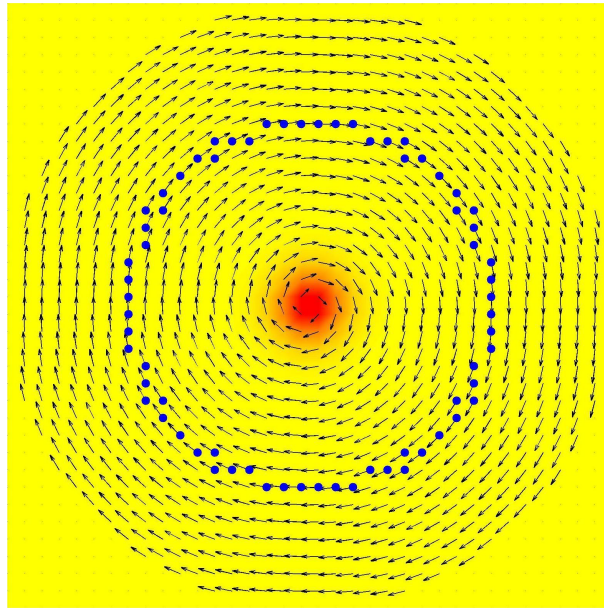


Figura 1.8 – Representação esquemática de um nanodisco modificado. Os círculos em azul representam as impurezas magnéticas e o modo como elas foram distribuídas define o anel de impurezas magnéticas. O anel pode corresponder a um arranjo de impurezas atrativas ou repulsivas.

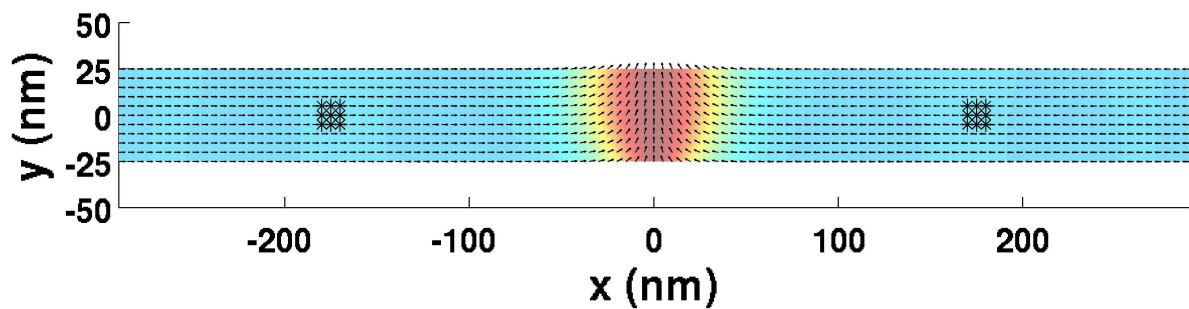


Figura 1.9 – Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, dois aglomerados de impurezas magnéticas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio. O par de aglomerados de impurezas pode atuar como uma armadilha de aprisionamento ou como uma armadilha de bloqueio.

2 INTERAÇÕES FUNDAMENTAIS EM MATERIAIS MAGNÉTICOS

Do ponto de vista do magnetismo, os materiais mais interessantes são aqueles formados por átomos que apresentam momento magnético resultante, ou seja, átomos com camadas eletrônicas incompletas (semi-preenchidas). Amostras ferromagnéticas, constituídas por átomos de metais de transição como Fe, Ni, Co e uma enorme variedade de ligas, exibem um forte acoplamento entre os momentos magnéticos atômicos, e isso conduz a um ordenamento que tende a alinhá-los paralelamente. A interação de troca é responsável por este ordenamento. Entretanto, existem outros tipos de interações entre momentos magnéticos, por exemplo, a interação dipolar, que além de dar origem à anisotropia de forma, também é a interação responsável pela formação dos domínios magnéticos. Dentro de cada domínio, os momentos magnéticos encontram-se alinhados, resultando numa magnetização local não nula. A magnetização de domínios vizinhos não aponta no mesmo sentido. Na fronteira entre dois domínios, os momentos magnéticos não variam de forma abrupta, ao invés disso, essa variação ocorre de forma gradual e a região de transição é chamada de parede de domínio magnético.

2.1 ALGUNS CONCEITOS FUNDAMENTAIS

O objeto fundamental em ferromagnetismo é o spin do elétron, uma propriedade intrínseca assim como a massa e a carga elétrica. O momento magnético associado ao spin do elétron encontra-se na mesma direção que a do spin, porém aponta no sentido contrário. A

relação entre momento magnético e momento angular de spin é dada por

$$\vec{m} = -\gamma \vec{S} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} = -\frac{ge}{2m_e} \vec{S} \quad (2.1)$$

em que a constante de proporcionalidade γ é denominada razão giromagnética. O fator g é adimensional, ele também é conhecido como fator de Landé; para o elétron o seu valor é $g \approx 2$. Em Mecânica Quântica, o momento angular, seja ele orbital ou de spin, é medido em unidades de $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34}$ [J . s], que é conhecida como constante de Planck normalizada. Portanto, pela equação (2.1) vemos que a dimensão de momento magnético m é a mesma da constante $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-24}$ [(A . m²) = (J / T)], que é denominado magnéton de Bohr; a unidade usual de momento magnético. Olhando novamente para a equação (2.1), é possível dizer que γ tem dimensão de carga sobre massa, [C / Kg], assim a razão giromagnética para o elétron vale $\gamma_e = 1,76 \times 10^{11}$ [(C / kg) = (A . m / N . s) = (T . s)⁻¹]. É muito comum expressar as unidades de μ_B , γ , etc, em termos do tesla

$$1 [\text{T}] = 1 \left[\frac{\text{N}}{\text{A} \cdot \text{m}} \right] \quad (2.2)$$

que é a unidade do campo $\vec{B}$.

No Sistema Internacional de Unidade, SI, os campos $\vec{B}$, $\vec{H}$ e $\vec{M}$ estão relacionados por

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.3)$$

em que $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ [(N / A²) = (T . m / A)] é a permeabilidade magnética do vácuo. Da relação (2.3), vemos que a unidade de $\vec{H}$ é a mesma que a de $\vec{M}$, ou seja [A / m]. A magnetização de uma amostra, $\vec{M}$, é definida como a soma dos momentos magnéticos dividida pelo volume que os contém V , isto é, uma densidade volumétrica de momentos magnéticos, ou seja

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{m}_i \quad (2.4)$$

Tratando-se de uma grandeza vetorial, para que haja magnetização, primeiro é preciso que os momentos magnéticos existam, e que eles apontem, em média, no mesmo sentido. Assim, a magnetização existe somente dentro do material magnético. Os campos $\vec{B}$ e $\vec{H}$ podem existir

dentro e/ou fora da amostra. O campo $\vec{B}$ é chamado de indução magnética e o campo $\vec{H}$ é o campo magnético.

Momento de dipolo magnético, dipolo magnético e momento magnético são sinônimos. O seu conceito é normalmente introduzido no Eletromagnetismo Clássico. Pode-se dizer que um momento magnético interage com um campo magnético, esse campo pode ser externo ou interno. Campo interno é o campo magnético que o próprio momento magnético cria ao seu redor. É claro que um momento magnético não interage com o seu próprio campo; um momento magnético interage com o campo criado por um outro momento magnético. Como exemplo de campo interno, pode-se citar o campo magnetostático e o campo de troca, que serão discutidos mais adiante. Por ora vamos recordar a interação de um momento magnético com um campo externo.

2.2 INTERAÇÃO ZEEMAN

A energia potencial de interação de um único momento magnético num campo magnético externo é

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B}^{ext} = -\mu_0 \vec{m} \cdot \vec{H}^{ext} \quad (2.5)$$

Quando o campo magnético é aplicado, o momento magnético sofre um torque,

$$\vec{T} = \vec{m} \times \vec{B}^{ext} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H}^{ext} \quad (2.6)$$

que tende a orientá-lo de uma tal forma que a energia de interação seja minimizada, assim o momento magnético tende a se alinhar no sentido do campo externo.

Para uma distribuição discreta de momentos magnéticos, a hamiltoniana que descreve a interação dos momentos magnéticos com um campo magnético externo é dado simplesmente pela soma das contribuições individuais de cada momento magnético interagindo com o campo externo,

$$H_{ext} = -\mu_0 \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_i^{ext} \quad (2.7)$$

No SI, tanto o campo magnético $\vec{H}$ quanto a magnetização $\vec{M}$ apresentam a dimensão de [A / m]. Pode-se então definir um campo magnético adimensional em termos de um parâmetro do material, a magnetização de saturação M_s , que pode ser obtida de uma curva de histerese. Com o campo magnético no i -ésimo sítio da rede definido por

$$\vec{h}_i = \frac{1}{M_s} \vec{H}_i^{ext} \quad (2.8)$$

é possível reescrever a hamiltoniana da interação Zeeman como

$$H_{ext} = -\mu_0 M_s \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \quad (2.9)$$

Além disso, é usual trabalhar com os versores momentos magnéticos,

$$\hat{m}_i = \frac{1}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i = \frac{1}{m_i} \vec{m}_i \quad (2.10)$$

Assim,

$$H_{ext} = - \sum_{i=1}^N \mu_0 M_s m_i \left(\hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right) \quad (2.11)$$

em que fica evidente que a constante da interação Zeeman é

$$Z_i = (\mu_0 M_s) m_i \quad (2.12)$$

Uma vez que o termo entre parênteses na equação (2.11) é adimensional, essa constante deveria ter dimensão de energia. Isso pode ser facilmente verificado lembrando que o produto que $(\mu_0 M_s)$ apresenta a dimensão de indução magnética, ou seja, sua unidade é o tesla [T]. Como discutido, uma forma de expressar a unidade de momento magnético é [J / T], assim Z_i apresenta dimensão de energia, ou seja, sua unidade é o [J].

No caso particular dos momentos magnéticos apresentarem o mesmo módulo, ou seja, $m_i = m$, a equação (2.11) pode ser reescrita como

$$H_{ext} = -Z \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \quad (2.13)$$

em que

$$Z = \mu_0 M_s m \quad (2.14)$$

Uma vez que o parâmetro da interação Zeeman é positivo, $Z_i > 0$ ou $Z > 0$, é possível ver que este termo de energia é minimizado quando os momentos magnéticos se alinham paralelamente na direção do campo magnético externo, $(\hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} > 0)$.

2.2.1 Energia Zeeman

A generalização para uma distribuição contínua de momentos magnéticos é feita particionando o volume do material em n elementos de volume ΔV_k , grandes o suficiente para conter muitos momentos magnéticos $\vec{m}_j$. Em cada elemento de volume, podemos associar um vetor magnetização local $\vec{M}_k = \frac{1}{\Delta V_k} \sum_j \vec{m}_j$ e, então formamos a soma

$$S_n = -\mu_0 \sum_{k=1}^n \Delta V_k \vec{M}_k \cdot \vec{H}_k^{ext} \quad (2.15)$$

No limite $n \rightarrow \infty$, a soma tende para o valor da integral tripla

$$E_{Zeeman} = -\mu_0 \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H}^{ext} \quad (2.16)$$

em que a integral é calculada sobre o volume do material V . A equação (2.16) é denominada **energia Zeeman**.

2.3 INTERAÇÃO DIPOLAR

Como já mencionado, um momento magnético cria um campo magnetostático ao seu redor. O campo magnético num ponto $\vec{r}_i$, gerado por um dipolo magnético pontual $\vec{m}_j$ localizado na posição $\vec{r}_j$, é dado por

$$\vec{H}_j(\vec{r}_i) = \frac{1}{4\pi} \left[3 (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{m}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^5} - \vec{m}_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right] \quad (2.17)$$

Definindo o versor que une os pontos $\vec{r}_i$ e $\vec{r}_j$

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2.18)$$

é possível notar que o módulo do campo dipolar decresce com o cubo da distância entre o ponto

fonte e o ponto de interesse, ou seja,

$$\vec{H}_j(\vec{r}_i) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{3 \hat{r}_{ij} (\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{m}_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.19)$$

Se no ponto de interesse $\vec{r}_i$ há um outro momento de dipolo $\vec{m}_i$, então a energia de interação dipolo-dipolo é dada por

$$U_{ij} = -\mu_0 \vec{m}_i \cdot \vec{H}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.20)$$

Notando que $\vec{m}_i \cdot \vec{H}_j(\vec{r}_i) = \vec{m}_j \cdot \vec{H}_i(\vec{r}_j)$, a energia da interação dipolar entre do par ij , pode ser expressa como

$$U_{ij}^{par} = \frac{U_{ij} + U_{ji}}{2} \quad (2.21)$$

Para uma distribuição discreta de momentos magnéticos, a hamiltoniana que descreve a interação dipolar é obtida somando todas as possíveis combinações envolvendo pares de momentos magnéticos

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.22)$$

Note que estamos evitando contar duas a vezes a mesma interação, e também excluindo a interação de um dipolo com ele mesmo, pois um dipolo não interagem com seu próprio campo.

Todas as distâncias relativas entre os momentos magnéticos podem ser escritas em termos da distância fundamental a , que é a menor distância entre dois sítios da rede, ou seja,

$$r_{ij} = \rho_{ij} a \quad (2.23)$$

Note que $\rho_{ij} = (r_{ij}/a)$ é a distância relativa adimensional. Além disso, pode-se definir o versor momento magnético no i -ésimo sítio da rede como

$$\hat{m}_i = \frac{\vec{m}_i}{|\vec{m}_i|} = \frac{\vec{m}_i}{m_i} \quad (2.24)$$

Com essas duas considerações, é conveniente escrever a equação (2.22) na seguinte forma

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^3} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (2.25)$$

em que fica evidente que a constante da interação dipolo-dipolo é

$$D_{ij} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi a^3} \right) m_i m_j \quad (2.26)$$

Pode-se verificar que essa constante de acoplamento tem dimensão de energia e que o termo entre colchetes na equação (2.25) é adimensional.

No caso particular em que os momentos magnéticos, distribuídos sobre os sítios de uma rede, apresentarem o mesmo módulo, ou seja, $m_i = m$ em todos os sítios, então a equação (2.25) pode ser reescrita como

$$H_{dip} = \frac{D}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (2.27)$$

em que

$$D = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi a^3} \quad (2.28)$$

Uma vez que o parâmetro da interação dipolar é positivo, $D_{ij} > 0$ ou $D > 0$, é possível ver que o primeiro termo na hamiltoniana que descreve a interação dipolar é minimizado quando os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente, ou seja, ele possui um caráter antiferromagnético. O segundo termo, que apresenta um fator 3 em relação ao primeiro, tende a alinhar os momentos magnéticos ao longo da direção que os une. Observa-se também que a interação dipolar é uma interação de longo alcance, que decai com o inverso do cubo da distância entre os momentos magnéticos.

A fim de ressaltar a interação dipolo-dipolo (e também o campo dipolar), podemos escrever a equação (2.22) da seguinte forma

$$H_{dip} = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{4\pi} \left[\frac{3 \hat{r}_{ij} (\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{m}_j}{r_{ij}^3} \right] \right\} = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_i \quad (2.29)$$

onde fica evidente que os momentos magnéticos $\vec{m}_j$ localizados nas posições $\vec{r}_j \neq \vec{r}_i$ criam um campo magnético resultante $\vec{H}_i$ na posição $\vec{r}_i$ onde se encontra o momento magnético $\vec{m}_i$. Portanto, cada momento magnético $\vec{m}_i$ interage com o campo dipolar efetivo $\vec{H}_i$, que contém a contribuição individual do campo dipolar criado pelos outros momentos magnéticos $\vec{m}_j$.

2.3.1 Energia magnetostática

A generalização para uma distribuição contínua de momentos magnéticos é feita de forma idêntica àquela que foi feita para a interação Zeeman (2.7). Por simples analogia, é possível obter que

$$E_{ms} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H} \quad (2.30)$$

em que a integral é calculada sobre o volume da amostra V . A expressão (2.30) é conhecida como **energia magnetostática**. Uma forma alternativa de expressá-la será obtida no final desta seção, veja a equação (2.49). A interpretação física da equação (2.30) é a seguinte: a magnetização de uma amostra gera um campo magnetostático (dipolar) e a magnetização interage com esse campo. Assim, pode-se dizer que a energia magnetostática (dipolar) é definida pela energia de interação da magnetização com o campo magnético que ela mesma cria. O fator $(1/2)$ presente na energia magnetostática explicita o fato de que este termo de energia surge da interação da magnetização com o seu próprio campo, ou seja, um campo interno.¹

Para entender as fontes do campo magnetostático assim como a natureza dos campos vetoriais $\vec{B}$, $\vec{H}$ e $\vec{M}$, vamos considerar que uma amostra feita com um magnético duro tenha sido submetida a um dado processo de imantação, o campo magnético externo foi desligado e a amostra apresenta uma magnetização permanente. Em outras palavras, ela passou a ser um ímã permanente, que gera um campo magnetostático no espaço ao seu redor. Suponhamos ainda que a magnetização da amostra seja conhecida de antemão, ou seja, conhecemos a distribuição da magnetização $\vec{M}(\vec{r})$.

¹ Tal fator não aparece, por exemplo, no termo de energia Zeeman, porque ele refere-se à interação da magnetização com um campo magnético externo.

As equações de Maxwell da Magnetostática, numa região finita do espaço onde a densidade de corrente é nula, $\vec{J} = \vec{0}$, são

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0} \quad (2.31a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.31b)$$

Como existe uma relação entre os campos $\vec{B}$ e $\vec{H}$, que é dada pela equação (2.3), ou seja, $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$, podemos escrever as equações (2.31) ou só em termos de $\vec{B}$ ou só em termos de $\vec{H}$. São duas formulações equivalentes, uma trata o campo $\vec{B}$ como sendo o campo fundamental, enquanto que a outra diz que o campo fundamental é o campo $\vec{H}$. No primeiro caso, temos que

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_M \quad (2.32a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.32b)$$

em que $\vec{J}_M = \vec{\nabla} \times \vec{M}$ é a densidade volumétrica de corrente de magnetização. A indução magnética $\vec{B}$ deriva do potencial vetor magnético $\vec{A}$,

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (2.33)$$

Na verdade o potencial vetor magnético é introduzido para que a equação (2.32b) seja automaticamente satisfeita ². Usando a identidade $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F}$ e o calibre de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, é possível mostrar que o potencial vetor $\vec{A}$ satisfaz a uma equação de Poisson, $\nabla^2 \vec{A} = -\mu_0 \vec{J}_M$, cuja solução é

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int dV' \frac{\vec{J}_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.34)$$

No segundo caso, as equações (2.31) também podem ser escritas como

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0} \quad (2.35a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = \rho_M \quad (2.35b)$$

² O divergente do rotacional de qualquer campo vetorial $\vec{F}$ se anula, $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = 0$, trata-se de uma identidade vetorial.

em que $\rho_M = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$ é a densidade volumétrica de pólo magnético (livre). Nessa formulação o campo magnético $\vec{H}$ deriva do potencial escalar magnético Φ ,

$$\vec{H} = -\vec{\nabla}\Phi \quad (2.36)$$

Na verdade o potencial escalar magnético é definido para que a equação (2.35a) seja automaticamente satisfeita ³. A equação que temos que resolver (2.35b) é uma equação de Poisson, $\nabla^2\Phi = -\rho_M$, cuja solução é

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int dV' \frac{\rho_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.37)$$

Num caso mais realístico, tal como um material ferromagnético duro com dimensões finitas, $\vec{M}$ sofre variações abruptas na superfície, porque $\vec{M} = \vec{0}$ fora do material. No limite idealizado em que $\vec{M}$ salta descontinuamente para zero na superfície do material, as equações (2.34) e (2.37) devem ser substituídas respectivamente por

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV' \frac{\vec{J}_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_S da' \frac{\vec{K}_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.38)$$

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V dV' \frac{\rho_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{1}{4\pi} \oint_S da' \frac{\sigma_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.39)$$

Em ambas as equações, a primeira integral é calculada sobre o volume V do material, e a segunda integral é calculada sobre a superfície S que limita o material. As quantidades $\vec{K}_M = \vec{M} \times \hat{n}$ e $\sigma_M = \vec{M} \cdot \hat{n}$ são denominadas densidade superficial de corrente de magnetização e densidade superficial de pólo magnético, respectivamente. $\hat{n}$ é a normal externa à superfície (um versor normal ao elemento de superfície da' que aponta de dentro para fora do material).

Há um paralelismo perfeito entre as duas formulações envolvendo correntes Amperianas e pólos magnéticos livres. O tratamento baseado em $\vec{H}$ geralmente é mais usado porque é mais simples lidar com potenciais escalares, e as distribuições de polós magnéticos (cargas magnéticas) fornecem uma representação que é muito mais intuitivo do que a representação em termos de correntes de magnetização. Por outro lado, a analogia eletrostática nada mais é do que

³ O rotacional do gradiente de qualquer campo escalar f se anula, $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} f) = \vec{0}$, trata-se de uma identidade vetorial.

uma analogia matemática. Correntes de superfície ou pólos livres não são formados apenas na superfície do material, de uma forma mais geral, elas são formadas sempre que a magnetização exibe descontinuidades.

Um problema clássico, tratado em muitos livros, é o da esfera uniformemente magnetizada. A esfera de raio R apresenta uma magnetização uniforme e permanente que está orientada na direção do eixo z , ou seja, $\vec{M} = M \hat{z}$. Ao resolver esse problema, encontra-se que o campo magnético fora da esfera é equivalente ao campo de um dipolo magnético pontual situado no centro dela,

$$\vec{H}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{3(\hat{r} \cdot \vec{m})\hat{r} - \vec{m}}{r^3} \right], \quad (r > R) \quad (2.40)$$

em que $\vec{m} = \frac{4\pi R^3}{3} \vec{M}$ é o momento de dipolo magnético associado à esfera uniformemente magnetizada. Em qualquer ponto dentro da esfera, esse o campo magnético é dado por

$$\vec{H}(\vec{r}) = -\frac{1}{3} \vec{M}, \quad (r < R) \quad (2.41)$$

A indução magnética nas regiões interior e exterior da esfera são obtidas pela relação, $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$. Na região externa à esfera, $\vec{M} = \vec{0}$, assim, $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$, ou seja,

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\hat{r} \cdot \vec{m})\hat{r} - \vec{m}}{r^3} \right], \quad (r > R) \quad (2.42)$$

No interior da esfera, a indução magnética é dada por

$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \left[-\frac{1}{3} + 1 \right] \vec{M} = \left[\frac{2}{3} \mu_0 \right] \vec{M}, \quad (r < R) \quad (2.43)$$

As linhas de campo para $\vec{B}$ e $\vec{H}$ estão representadas na figura (2.1). Observe nesta figura e também nas equações (2.43) e (2.41), que dentro da esfera, $\vec{B}$ é paralelo a $\vec{M}$, enquanto que $\vec{H}$ é antiparalelo a $\vec{M}$. O campo $\vec{H}$ dentro do material é usualmente denominado **campo de desmagnetização** ou **campo desmagnetizante**, devido à sua tendência de se opor à magnetização. Dessa forma, se o sentido da magnetização for invertido, então o sentido do campo desmagnetizante também se inverte.

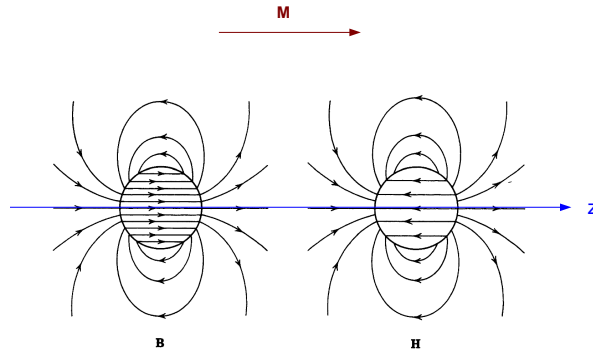


Figura 2.1 – Linhas de campo para a indução magnética e campo magnético, $\vec{B}$ e $\vec{H}$, para uma esfera uniformemente magnetizada, $\vec{M} = M\hat{z}$. As linhas de $\vec{B}$ são contínuas e fechadas, entretanto as de $\vec{H}$ não. As linhas de campo de $\vec{H}$ são descontínuas porque na superfície da esfera há uma densidade superficial de carga de magnetização σ_M . Figura adaptada da referência (101).

Na figura (2.2) mostra uma representação esquemática de uma amostra ferromagnética com magnetização uniforme e ressalta a origem do campo desmagnetizante.

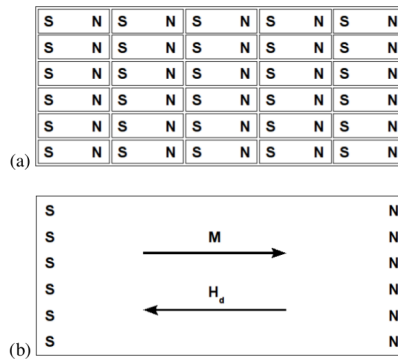


Figura 2.2 – Representação esquemática para a origem do campo desmagnetizante, ou seja, o campo magnético dentro da amostra. O campo magnético fora da amostra não é mostrado nesta figura. Os momentos magnéticos da amostra são representados por pequenos ímãs. (a) No interior da amostra pólos magnéticos são compensados pelos pólos do momento magnético adjacente. (b) Nas bordas do material, onde os pólos não são compensados, há o surgimento de pólos livres. Pode-se dizer que o campo desmagnetizante é gerado por uma densidade de “cargas magnéticas” no próprio material. Figura retirada da referência (102).

Uma amostra pode ser preparada para que a sua magnetização gere um campo magnetostático identicamente nulo, dois exemplo estão mostrados na figura (2.3).

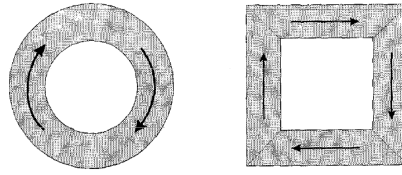


Figura 2.3 – Exemplos de amostras em que a configuração da magnetização é tal que o campo magnetostático é nulo, tanto dentro quanto fora da amostra. Devido à geometria, os pólos magnéticos são mutuamente compensados, resultado num campo desmagnetizante nulo. Se o fluxo da magnetização for interrompido, por exemplo, removendo um pedaço do anel ou da moldura de quadro, a amostra passa a se comportar como um ímã. Nas extremidades onde foi feito o “corte” haverá pólos magnéticos não compensados e, dessa forma, tem-se um ímã no formato de ferradura. Figura retirada da referência (103).

No caso particular da esfera uniformemente magnetizada, veja a equação (2.41), o campo desmagnetizante é dado simplesmente por

$$\vec{H} = -\frac{1}{3} \vec{M}$$

Mais adiante veremos que o fator $(1/3)$ está relacionado à simetria da esfera.

Este exemplo didático que estamos tratando foi escolhido porque o cálculo da energia magnetostática, dada pela equação (2.30) é muito simples, pois tanto $\vec{M}$ quanto $\vec{H}$ são uniformes. A energia magnetostática da esfera uniformemente magnetizada é obtida a seguir

$$\begin{aligned}
 E_{ms}^{esfera} &= -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H} \\
 &= -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \left(-\frac{1}{3} \vec{M} \right) \\
 &= +\frac{\mu_0}{6} (\vec{M} \cdot \vec{M}) \int_V dv \\
 &= \frac{\mu_0}{6} V |\vec{M}|^2
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

É importante ressaltar que, amostras com formatos não-elipsoidais, o campo desmagnetizante não é constante em todo o volume. Isso dificulta bastante o cálculo da energia magnetostática.

Na próxima seção será discutida a conexão entre o campo desmagnetizante e a anisotropia de forma. Além disso, também será feito o cálculo da energia magnetostática para elipsoides de revolução. No caso limite em que o eixo de simetria é muito menor ou muito maior que os outros dois eixos, tem-se um filme fino ou um fio, respectivamente.

Agora vamos obter uma versão alternativa para a energia magnetostática, veja equação (2.30). Para este propósito iremos usar o seguinte teorema

$$\int_{\text{todo espaço}} dv \vec{B} \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.45)$$

que é satisfeita sempre que um dos campos for irrotacional ($\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0}$) e outro for solenoidal ($\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$). Os campos $\vec{B}$ e $\vec{H}$ que satisfazem as equações de Maxwell da magnetostática podem apresentar os requisitos desse teorema e foi justamente por esse motivo, que ele foi enunciado com uma nomenclatura sugestiva. A sua demonstração é bem simples, sendo feita a seguir.

Na ausência de correntes, $\vec{J} = \vec{0}$, o campo magnético $\vec{H}$ é irrotacional, ou seja, conservativo, pode-se então introduzir o potencial escalar magnético Φ tal que o campo $\vec{H}$ seja dado por $\vec{H} = -\vec{\nabla}\Phi$. Isso é possível porque o rotacional do gradiente de campo escalar é o vetor nulo ⁴, $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla}f) = \vec{0}$. Dessa forma,

$$\int dv \vec{B} \cdot \vec{H} = - \int dv \vec{B} \cdot \vec{\nabla}\Phi = - \int dv \left[\vec{\nabla} \cdot (\Phi \vec{B}) - \Phi (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) \right] \quad (2.46)$$

em que usamos a seguinte identidade $\vec{\nabla} \cdot (f\vec{F}) = (\vec{\nabla}f) \cdot \vec{F} + f(\vec{\nabla} \cdot \vec{F})$. A última integral se anula porque $\vec{B}$ é solenoidal, ou seja, $(\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0)$. Na integral que restou pode-se usar o teorema da divergência,

$$\int dv \vec{B} \cdot \vec{H} = - \int dv \vec{\nabla} \cdot (\Phi \vec{B}) = - \oint da (\Phi \vec{B}) \cdot \hat{n} \quad (2.47)$$

desde que a distribuição de magnetização seja localizada, ao se considerar um volume e sua superfície limitante suficientemente grandes, não haverá fluxo do campo $(\Phi \vec{B})$ através dessa superfície, como consequência, a integral de superfície se anula. Portanto, o teorema (2.45) foi demonstrado.

⁴ Podemos pensar numa identidade de operadores $(\vec{\nabla} \times \vec{\nabla})f = \vec{0}f = \vec{0}$. Uma vez que $\vec{\nabla}$ é um operador vetorial diferencial, o produto vetorial de um vetor com ele mesmo gera o vetor nulo, neste caso o operador nulo.

Considere a seguinte integral,

$$\frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv \vec{H} \cdot \vec{H} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv \left(\frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \right) \cdot \vec{H} = -\frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv \vec{M} \cdot \vec{H} \quad (2.48)$$

no membro direito foi substituída a relação (2.3) e em seguida, foi utilizado o resultado (2.45). No último membro da equação (2.48), lembramos que $\vec{M} \neq \vec{0}$ apenas dentro do volume V do material, portanto, a **energia magnetostática** pode ser expressa por duas formas equivalentes,

$$E_{ms} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv \vec{H} \cdot \vec{H} \quad (2.49)$$

A primeira igualdade na equação (2.49) foi obtida na equação (2.30), cuja origem e interpretação física já foram discutidas. Dessa forma, aqui vamos abordar a segunda igualdade na equação (2.49). Uma vez que para qualquer vetor $\vec{V}$, o produto escalar dele com ele mesmo, resulta num valor positivo ou nulo, $\vec{V} \cdot \vec{V} = |\vec{V}|^2 \geq 0$, pode-se concluir pelo último membro da equação (2.49) que a energia magnetostática nunca assume valores negativos. A energia magnetostática apresenta o valor mínimo, $E_{ms} = 0$, quando ambos σ_M e ρ_M se anulam, ou seja, quando a amostra não apresenta pólos magnéticos livres; estes são justamente as “fontes” do potencial escalar magnético Φ , e conseqüentemente do campo $\vec{H}$. Este caso particular ocorre nos exemplos da figura (2.3).

Usando a equação (2.36) podemos escrever a energia magnetostática da seguinte forma,

$$E_{ms} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv \vec{H} \cdot \vec{H} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} dv |\vec{\nabla} \Phi|^2 \quad (2.50)$$

Com este último resultado, pode-se que a energia magnetostática é proporcional ao quadrado do módulo do gradiente do potencial escalar, isso significa que esta energia magnetostática mede a não-uniformidade do potencial escalar magnético. Se o potencial escalar magnético for uniforme, então a energia magnetostática será nula, isto é, ela será mínima.

Portanto, vimos que há duas expressões equivalentes que permitem o cálculo da energia magnetostática. Por ser mais simples, a primeira igualdade na equação (2.49) é a mais usada, uma vez que a integral é tomada sobre o volume da amostra. Por outro lado, a segunda igualdade na equação (2.49) esclarece o conceito de energia magnetostática.

2.3.2 Anisotropia de forma

Quando um sistema apresenta diferentes propriedades físicas dependendo da direção em que elas são estudadas, dizemos que o sistema apresenta anisotropia. Uma amostra apresenta anisotropia magnética se a sua magnetização espontânea tende a orientar-se numa direção preferencial (eixo fácil), ou tende a se afastar dela (eixo difícil). Isso ocorre porque a magnetização com tal orientação corresponde a um mínimo local na energia do sistema.

Existem vários tipos de anisotropia magnética. A anisotropia magnetocristalina refere-se a uma orientação preferencial da magnetização em relação aos eixos ou planos do cristal. Amostras com este tipo de anisotropia são conhecidos como materiais magnéticos duros. Materiais magnéticos macios são aqueles que apresentam anisotropia magnetocristalina muito pequena. Na seção 2.4.1 é discutido o modelo de Heisenberg anisotrópico, que pode ser usado para descrever um sistema magnético que apresenta anisotropia magnetocristalina. A anisotropia de forma, está relacionada à forma geométrica do material e manifesta-se em amostras finitas, devido ao campo desmagnetizante que surge dentro do material, gerando pólos nas superfícies. Um acoplamento anisotrópico deste tipo é conseguido levando-se em conta as interações dipolo-dipolo. Além da anisotropia magnetocristalina e da anisotropia de forma existem várias outras. É possível que um sistema magnético apresente mais de um tipo de anisotropia. Portanto, tal sistema apresentará uma competição de anisotropias e a expressão da energia de anisotropia efetiva será a soma da energia de anisotropia de cada parcela.

Nesta seção será abordada a anisotropia de forma, que também é conhecida como energia magnetostática. Na seção anterior vimos que a energia magnetostática é definida pela energia de interação da magnetização com o campo magnético que ela mesma cria, veja a equação (2.49), ou seja

$$E_{ms} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H} \quad (2.51)$$

em que a integral é realizada sobre o volume V da amostra.

Para uma amostra com uma forma arbitrária, o campo desmagnetizante é não-uniforme, mesmo se a magnetização for uniforme. Isso dificulta bastante o cálculo da energia magnetostática. Uma exceção ocorre quando a amostra apresenta o formato de um elipsoide; apenas neste caso, o campo desmagnetizante é uniforme. Embora possa parecer, à primeira vista, um caso muito particular, o estudo do elipsoide é muito importante, pois como veremos o comportamento limite de um elipsoide de revolução compreende duas geometrias de interesse: um **filme fino** e um **fio**.

Um caso importante é a situação particular em que a magnetização é uniforme em todo o volume do ferromagneto, $\vec{M}(\vec{r}) = \vec{M}$, nesse caso, $\rho_M = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$, assim, na equação (2.39) só há contribuição da integral de superfície,

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \vec{M} \cdot \left[\oint_S da' \frac{\hat{n}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \quad (2.52)$$

Essa expressão mostra que o potencial escalar magnético é determinado unicamente pela forma geométrica do material. Pode-se mostrar que o campo magnético calculado com a equação (2.52), ou seja, $\vec{H} = -\vec{\nabla}\Phi$ é uniforme em todo o volume do material desde que o ferromagneto apresente a forma de um elipsoide. Se $\vec{M}$ encontra-se ao longo de um dos eixos principais do elipsoide, então o campo $\vec{H}$ encontra-se na mesma direção de $\vec{M}$, mas no sentido contrário ao dela, veja a figura (2.4).

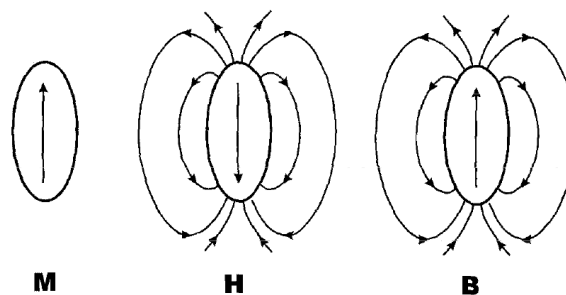


Figura 2.4 – Magnetização $\vec{M}$, campo magnético $\vec{H}$ e indução magnética $\vec{B}$ para um elipsoide uniformemente magnetizado. Dentro da amostra, $\vec{H} = -N\vec{M}$ e $\vec{B} = \mu_0(1 - N)\vec{M}$. Fora da amostra, $\vec{M} = \vec{0}$ e $\vec{B} = \mu_0\vec{H}$. Figura retirada da referência (103).

Uma vez que o campo magnético dentro do material é antiparalelo à magnetização,

$$\vec{H} = -N\vec{M} \quad (2.53)$$

o campo $\vec{H}$ dentro do material é usualmente denominado campo desmagnetizante, porque ele se opõe ao sentido da magnetização, e o coeficiente N é chamado de fator desmagnetizante, $0 \leq N \leq 1$. O valor de N depende de qual eixo do elipsoide a magnetização $\vec{M}$ se encontra. Portanto, há 3 fatores desmagnetizantes, N_a, N_b, N_c , associados a cada um dos 3 eixos principais do elipsoide, a, b, c . A relação entre campo-magnetização leva a forma matricial

$$\mathbf{H} = -\mathbf{N}\mathbf{M} \quad (2.54)$$

em que a matriz $\mathbf{N}$ representa o tensor desmagnetizante, que é diagonal quando os eixos cartesianos x, y, z são escolhidos ao longo dos eixos principais do elipsoide a, b, c , ou seja

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_a & 0 & 0 \\ 0 & N_b & 0 \\ 0 & 0 & N_c \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

Dessa forma, os fatores desmagnetizantes obedecem a uma restrição geral, no SI o tensor desmagnetizante tem traço unitário (104)

$$Tr(\mathbf{N}) = N_a + N_b + N_c = 1 \quad (2.56)$$

Na seção anterior comentamos o exemplo da esfera uniformemente magnetizada ao longo do eixo z , nesse caso, o campo desmagnetizante, de acordo com a equação (2.3.1), é dado por, $\mathbf{H} = -\frac{1}{3}\mathbf{M}$. Numa esfera, devido à simetria, conclui-se imediatamente que os fatores desmagnetizantes, ou seja, os autovalores de $\mathbf{N}$ são degenerados, $N_a = N_b = N_c = \frac{1}{3}$. Supondo que a magnetização encontra-se ao longo do eixo c , então $M_a = M_b = 0$, e a equação (2.54)

torna-se

$$\begin{bmatrix} H_a \\ H_b \\ H_c \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ M_c \end{bmatrix}$$

Dessa forma, como a magnetização apresenta uma única componente, o campo desmagnetizante também apresentará, ou seja, $H_c = -\frac{1}{3} M_c$ que encontra-se na mesma direção que a da magnetização, mas no sentido contrário ao dela.

No caso geral em que $\vec{M}$ não está orientada ao longo de um eixo principal do elipsoide, pode-se decompor $\vec{M}$ nos eixos principais do elipsoide, veja a figura (2.5).

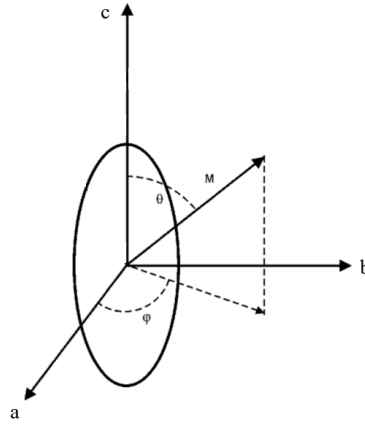


Figura 2.5 – Elipsoide apresentando uma magnetização numa direção arbitrária. É possível decompor $\vec{M}$ em termos das suas componentes em relação aos eixos principais do elipsoide.

Uma direção arbitrária da magnetização, relativa aos eixos principais do elipsoide,

$$\hat{\alpha} = \frac{\vec{M}}{|\vec{M}|} = (\alpha_a, \alpha_b, \alpha_c) \quad (2.57)$$

pode ser definida em termos dos cossenos diretores

$$\alpha_a = \sin \theta \cos \varphi \quad (2.58a)$$

$$\alpha_b = \sin \theta \sin \varphi \quad (2.58b)$$

$$\alpha_c = \cos \theta \quad (2.58c)$$

Os cossenos diretores satisfazem a condição

$$\alpha_a^2 + \alpha_b^2 + \alpha_c^2 = 1 \quad (2.59)$$

porque $\hat{\alpha}$ é um versor, $\hat{\alpha} \cdot \hat{\alpha} = |\hat{\alpha}|^2 = 1$.

Portanto, de acordo com a equação (2.57), o vetor magnetização numa direção arbitrária fica definido por

$$\begin{bmatrix} M_a \\ M_b \\ M_c \end{bmatrix} = |\vec{M}| \begin{bmatrix} \alpha_a \\ \alpha_b \\ \alpha_c \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

Então, a equação (2.54), ou seja, $\mathbf{H} = -\mathbf{N}\mathbf{M}$, torna-se

$$\begin{bmatrix} H_a \\ H_b \\ H_c \end{bmatrix} = -|\vec{M}| \begin{bmatrix} N_a & 0 & 0 \\ 0 & N_b & 0 \\ 0 & 0 & N_c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_a \\ \alpha_b \\ \alpha_c \end{bmatrix} = -|\vec{M}| \begin{bmatrix} N_a \alpha_a \\ N_b \alpha_b \\ N_c \alpha_c \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

É fácil calcular a energia magnetostática de amostras com formato elipsoidal, porque o campo desmagnetizante é o mesmo em cada ponto da amostra ⁵

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{H} = -\mathbf{N}\vec{M} \quad (2.62)$$

Neste caso, a equação (2.51) pode ser rescrita na forma matricial ⁶

$$E_{ms}^{\text{elipsoide}} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V dV \mathbf{M}^T (-\mathbf{N}\mathbf{M}) = \frac{\mu_0}{2} V (\mathbf{M}^T \mathbf{N}\mathbf{M}) \quad (2.63)$$

em que $\mathbf{M}^T$ representa a matriz transposta da magnetização.

⁵ Essa afirmação também é válida para amostras que são casos limites de um elipsoide, tais como um filme fino ou um fio.

⁶ O produto escalar pode ser representado por um produto matricial de um matriz linha por uma matriz coluna.

Substituindo o resultado (2.61) em (2.63), obtêm-se

$$E_{ms}^{\text{elipsoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \begin{bmatrix} \alpha_a & \alpha_b & \alpha_c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_a \alpha_a \\ N_b \alpha_b \\ N_c \alpha_c \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$E_{ms}^{\text{elipsoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 (N_a \alpha_a^2 + N_b \alpha_b^2 + N_c \alpha_c^2) \quad (2.64)$$

No caso particular de uma esfera, $N_a = N_b = N_c = \frac{1}{3}$, a energia magnetostática é

$$E_{ms}^{\text{esfera}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \frac{1}{3} (\alpha_a^2 + \alpha_b^2 + \alpha_c^2) = \frac{\mu_0}{6} V |\vec{M}|^2 \quad (2.65)$$

em que foi utilizado a condição de normalização dos cossenos diretores (2.59). Note que este resultado concorda com aquele que foi obtido na equação (2.44). No caso da esfera, encontramos um comportamento isotrópico porque todas as direções são energeticamente equivalentes. Em outras palavras, a energia magnetostática é sempre a mesma, ela não depende da direção em que a esfera se encontra magnetizada.

Embora a expressão para a energia magnetostática para um elipsoide seja simples, veja a equação (2.64), as expressões analíticas para os fatores desmagnetizantes em termos dos comprimentos dos semi-eixos principais do elipsoide é relativamente complicada. Os resultados de maior interesse ocorrem para os **elipsoides de revolução** ou **esferoides**, em que dois dos semi-eixos principais apresentam o mesmo comprimento, sendo que o terceiro é um eixo de simetria rotacional. Em geral, costuma-se escolher o eixo z como sendo o eixo de simetria rotacional. Para um esferoide, há expressões analíticas para os fatores desmagnetizantes como função da razão de aspecto, $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}}$, ou seja, a razão dos comprimentos dos semi-eixos paralelo e perpendicular ao eixo de simetria. Um **esferoide prolato** (charuto - quando o eixo de simetria coincide com o semi-eixo maior do elipsoide) apresenta uma razão de aspecto $\alpha > 1$, enquanto que um **esferoide oblato** (disco - quando o eixo de simetria coincide com o semi-eixo menor

do elipsoide) apresenta uma razão de aspecto $\alpha < 1$. A esfera representa a fronteira entre essas duas formas, veja a figura (2.6).

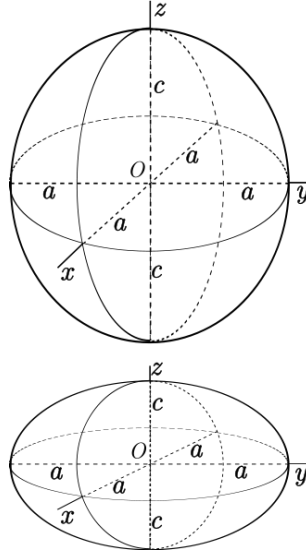


Figura 2.6 – Esferoides (elipsoides de revolução). O eixo de simetria de rotação é o eixo z . Um **esferoide prolato** é caracterizado por $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{c}{a} > 1$ enquanto que um **esferoide oblato** é caracterizado por $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{c}{a} < 1$.

Como no caso da esfera o tensor desmagnetizante apresenta 3 autovalores degenerados e no caso do elipsoide não há degenerescência $N_a \neq N_b \neq N_c$ é de se esperar que no caso do esferoide, $\mathbf{N}$ apresente uma dupla degenerescência, ou seja, dos três autovalores, dois deles são iguais. Portanto, $\mathbf{N}$ possui dois autovalores degenerados, assim só existem dois valores possíveis para os fatores desmagnetizantes, $N_{\parallel}$ paralelo ao eixo de simetria, e $N_{\perp}$ perpendicular a ele. Como o tensor desmagnetizante apresenta traço unitário segue que

$$N_{\parallel} + 2N_{\perp} = 1 \quad (2.66)$$

O valor do fator desmagnetizante para a direção paralela ao eixo de simetria $N_{\parallel}$ é dado a seguir⁷, os outros dois fatores idênticos, $N_{\perp}$, são obtidos pela relação (2.66).

$$N_{\parallel}^{\text{prolato}} = \frac{1}{\alpha^2 - 1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 - 1}} \ln(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 1}) - 1 \right], \quad \alpha > 1 \quad (2.67)$$

⁷ As expressões (2.67) e (2.68) foram obtidas da referência (103).

$$N_{\parallel}^{\text{oblato}} = \frac{1}{1-\alpha^2} \left[1 - \frac{\alpha}{\sqrt{1-\alpha^2}} \arcsin(\sqrt{1-\alpha^2}) \right], \quad \alpha < 1 \quad (2.68)$$

Vale a pena observar que os fatores desmagnetizantes ⁸, dados por (2.67) e (2.68), dependem da forma geométrica do material mas não das suas dimensões absolutas; lembre-se que α é a razão de aspecto do esferoide. Portanto, se variamos o tamanho de um material modificando todas as suas dimensões, mas mantendo a razão de aspecto, o campo desmagnetizante permanecerá o mesmo.

O comportamento assintótico das equações (2.67) e (2.68) são

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} N_{\parallel}^{\text{prolato}} = \frac{\ln(2\alpha) - 1}{\alpha^2}, \quad \alpha \gg 1 \quad (2.69)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} N_{\parallel}^{\text{oblato}} = 1, \quad \alpha \ll 1 \quad (2.70)$$

Estas expressões serão úteis quando analisarmos dois casos limites dos esferoides prolato e oblato, um fio e um plano, respectivamente.

Considere que θ seja o ângulo entre a magnetização e o eixo de simetria de rotação do elipsoide, que vamos considerar como paralelo ao semi-eixo c do elipsoide, veja por exemplo a figura (2.5). Nesse caso, $N_c = N_{\perp}$ e $N_a = N_b = N_{\parallel}$. Na equação (2.64) substitui-se os N_i e α_i são dados por (2.58), então a energia magnetostática de um esferoide (prolato ou oblato) é

$$E_{ms}^{\text{esferoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 [N_{\perp} (\sin^2 \theta \cos^2 \varphi) + N_{\perp} (\sin^2 \theta \sin^2 \varphi) + N_{\parallel} (\cos^2 \theta)]$$

$$E_{ms}^{\text{esferoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 [N_{\perp} (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \sin^2 \theta + N_{\parallel} (\cos^2 \theta)]$$

ou seja,

$$E_{ms}^{\text{esferoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 [N_{\perp} \sin^2 \theta + N_{\parallel} \cos^2 \theta] \quad (2.71)$$

⁸ E portanto, o campo desmagnetizante.

A expressão (2.71) pode ser simplificada para que ela dependa apenas de $N_{\perp}$ ou só de $N_{\parallel}$. Usando o fato que o tensor desmagnetizante tem traço 1, ou seja, impondo que $N_{\parallel} + 2N_{\perp} = 1$, pode-se eliminar $N_{\parallel}$ ou $N_{\perp}$ na equação (2.71), e os resultados que se obtém fazendo isso são

$$E_{ms}^{\text{esferoide}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \left[N_{\parallel} + \frac{1}{2}(1 - 3N_{\parallel}) \sin^2 \theta \right] = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 [N_{\perp} + (1 - 3N_{\perp}) \cos^2 \theta] \quad (2.72)$$

Para obter o primeiro resultado, pode-se, por exemplo, somar um termo nulo do tipo $(\frac{1}{2}N_{\parallel} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}N_{\parallel} \cos^2 \theta)$ a equação (2.71). O segundo resultado é obtido de forma semelhante, somando um termo nulo do tipo $(N_{\perp} \cos^2 \theta - N_{\perp} \cos^2 \theta)$. A última igualdade na equação (2.72) não é muito interessante, porque não temos expressões explícitas para $N_{\perp}$. Por outro lado, na primeira igualdade podemos substituir $N_{\parallel}$ dados por (2.67) ou (2.68) ou então os seus respectivos comportamentos assintóticos (2.69) ou (2.70). Uma vez obtido o fator $N_{\parallel}$, os outros dois fatores desmagnetizantes que são degenerados $N_{\perp}$ são obtidos pela relação (2.66).

No caso que estamos considerando, ou seja, o eixo de simetria de rotação é o eixo z , o tensor desmagnetizante para um esferoide é dado por

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & N_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & N_{\parallel} \end{bmatrix} \quad (2.73)$$

Agora vamos analisar os seguintes casos limites de um esferoide muito alongado e outro muito achatado.

Um fio (cilindro com comprimento infinito) é o caso limite de um esferoide prolato, com semi-eixos $a = b = r_{\perp}$ e $c = r_{\parallel} = \infty$, implica numa razão de aspecto $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{\infty}{r_{\perp}} = \infty$ e a equação (2.69) fornece $N_{\parallel} = N_c = 0$. Como o traço do tensor desmagnetizante tem que ser

unitário, veja a equação (2.66), infere-se que $N_{\perp} = N_a = N_b = \frac{1}{2}$. Portanto,

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Substituindo esses fatores desmagnetizantes na equação (2.71) ou (2.72) obtém-se que a energia magnetostática de um fio é dada por

$$E_{ms}^{\text{fio}} = \frac{\mu_0}{4} V |\vec{M}|^2 \sin^2 \theta \quad (2.74)$$

Com este resultado, vemos que energia magnetostática do fio é minimizada quando $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$, isso significa que a anisotropia de forma favorece a direção de magnetização ao longo do comprimento do fio, a magnetização pode apontar para cima ou para baixo em relação ao eixo de simetria do fio, ou seja, o eixo mais comprido é o eixo fácil.

Um filme fino (chapa muito fina de área infinita) é o caso limite de um esferoide oblato, com semi-eixos $a = b = r_{\perp} = \infty$ e $c = r_{\parallel}$, implica numa razão de aspecto $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{c}{\infty} = 0$ e a equação (2.70) fornece $N_{\parallel} = N_c = 1$. Novamente, como o traço do tensor desmagnetizante tem que ser unitário, deduz-se que $N_{\perp} = N_a = N_b = 0$. Portanto,

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Agora, substituindo esses fatores desmagnetizantes na equação (2.71) ou (2.72), obtém-se que a energia magnetostática de um filme fino é dada por

$$E_{ms}^{\text{filme}} = \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \cos^2 \theta \quad (2.75)$$

Esse resultado é importante para filmes finos magnéticos e multi-camadas. A equação (2.75) é

usualmente escrita como

$$\begin{aligned}
 E_{ms}^{\text{filme}} &= \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \cos^2 \theta + \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \left[\sin^2 \theta - \sin^2 \theta \right] \\
 &= \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) - \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \sin^2 \theta \\
 &= \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 - \frac{\mu_0}{2} V |\vec{M}|^2 \sin^2 \theta
 \end{aligned}$$

ou seja,

$$E_{ms}^{\text{filme}} = K_0 + K_{\text{forma}} \sin^2 \theta \quad (2.76)$$

em que $K_{\text{forma}} < 0$. Através das expressão (2.75) ou (2.76), vemos que a energia magnetostática de um filme fino é minimizada quando $\theta = \frac{\pi}{2}$, isso significa que a anisotropia de forma tende a favorecer uma direção de magnetização que é paralela à superfície do filme fino⁹. Em outras palavras, um filme fino feito com material magnético macio dificilmente apresentará uma magnetização perpendicular ao plano do filme; o eixo mais curto (eixo da espessura) é o eixo difícil, assim a magnetização fica confinada no plano do filme fino.

2.4 INTERAÇÃO DE TROCA

Sistemas que contém momentos magnéticos permanentes embora não ordenados são conhecidos como paramagnetos. No entanto, há materiais em que esses momentos magnéticos se arranjam seguindo uma certa ordem espacial, abaixo de uma certa temperatura crítica. Estes são denominados **materiais magneticamente ordenados**, veja a Figura (2.7).

⁹ Todas as direções dentro do plano são equivalentes.

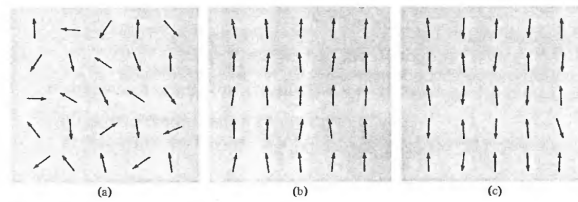


Figura 2.7 – Ordenamento magnético. A figura (a) ilustra um paramagneto que é desordenado magneticamente. As figuras (b) e (c) ilustram sistemas que são ordenados magneticamente, um ferromagneto e um antiferromagneto, respectivamente. Figura retirada da referência (105).

As principais classe de materiais que são ordenados magneticamente são: ferromagnetos, antiferromagnetos e ferrimagnetos, eles são definidos em termos da orientação relativa e da magnitude dos momentos magnéticos atômicos ou moleculares, veja a figura (2.8).

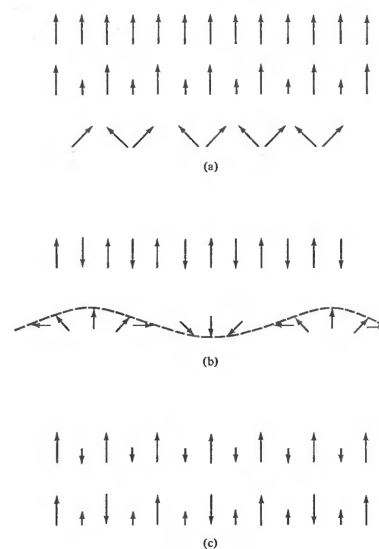


Figura 2.8 – Representação esquemática de materias ordenados magneticamente. (a) Ferromagneto - uma rede ou mais sub-redes com magnetizações paralelas, resultando numa magnetização total não nula. (b) Antiferromagneto - a rede é dividida em duas sub-redes com magnetizações anti-paralelas e de mesmo módulo, resultando numa magnetização total nula. (c) Ferrimagneto - a rede também é dividida em duas sub-redes com magnetizações anti-paralelas mas com módulos diferentes, resultando numa magnetização total não nula. Figura retirada da referência (105).

Acima de uma certa temperatura crítica o ordenamento magnético é destruído, assim, um ferromagneto, antiferromagneto ou ferrimagneto torna-se um paramagneto. A temperatura crítica na qual ocorre a transição de fase magnética é denominada temperatura de Curie T_C no caso do ferromagnetos, enquanto que no caso dos antiferromagnetos e dos ferrimagnetos ela é chamada de temperatura de Néel T_N .

Num paramagneto o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos é atingido somente com campos externos muito intensos e para temperaturas não muito elevadas. Assim, o ordenamento espontâneo observado num ferromagneto pode ser entendido supondo a existência de um campo magnético interno muito forte, que tende a alinhar os momentos magnéticos, em oposição às flutuações térmicas que preferem desordená-los. Foi notado que este campo interno não poderia ter origem na interação clássica dipolo-dipolo, porque ela não seria forte o suficiente para manter o ordenamento espontâneo dos ferromagnetos. Em 1928, Heisenberg mostrou que esse campo magnético interno é explicado pela Mecânica Quântica e que ele surge da interação entre momentos magnéticos de átomos vizinhos. Mais especificamente, a interação de troca (*exchange interaction*) é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana entre elétrons. A interação de troca é escrita usualmente em termos do spin e uma ótima discussão de que essa interação é do tipo $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ pode ser encontrada na referência (106). No apêndice A é feito um desenvolvimento muito parecido com aquele apontado nesta referência, como resultado obtém-se que a energia de interação de troca entre dois spins é dada por

$$H = -\frac{2J_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.77)$$

em que J_{12} é a constante do acoplamento de troca, ela apresenta dimensão de energia.

2.4.1 Modelo de Heisenberg

Para uma distribuição discreta de spins, a hamiltoniana que descreve a interação de troca é escrito como

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{2J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\sum_{i,j} \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.78)$$

em que o fator $(1/2)$ evita contar duas vezes a mesma interação. $\vec{S}_i$ é o spin do íon localizado no sítio i . A constante J_{ij} está associada à superposição das funções de onda espaciais dos íons i e j , que é apreciável apenas para um par de íons muito próximos. Assim, a contribuição significativa resulta das interações entre primeiros e segundos vizinhos. Portanto, a interação de

troca é uma interação de curto alcance. Uma boa aproximação é obtida ao considerar

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais casos} \end{cases} \quad (2.79)$$

A hamiltoniana da interação de troca (2.78) pode ser escrito da seguinte forma,

$$H = -\frac{J}{\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.80)$$

em que o símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que o somatório é feito sobre pares de spins que são primeiros vizinhos.

As expressões que obtivemos para as hamiltonianas das interações Zeeman e dipolar encontram-se expressos em termos de momentos magnéticos $\vec{m}_i$, não em termos do momento angular $\vec{S}_i$. A fim de padronizar nossas hamiltonianas vamos escrever a hamiltoniana da interação de troca em termos do versor momento magnético, uma vez que momento angular e momento magnético estão relacionados pela equação (2.1) podemos escrever

$$H = -\frac{J}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \quad (2.81)$$

No caso particular de todos os momentos magnéticos apresentarem o mesmo módulo, ou seja, em qualquer sítio da rede $|\vec{m}_i| = m$, podemos usar os versores momentos magnéticos

$$\hat{m}_i = \frac{1}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i = \frac{1}{m} \vec{m}_i \quad (2.82)$$

Neste caso, a equação (2.83) pode ser escrita como

$$H = -J \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.83)$$

É fácil ver que o termo que entre parênteses na equação (2.83) é adimensional. Pela equação (2.1) temos que

$$\gamma = \frac{g \mu_B}{\hbar} \quad (2.84)$$

Substituindo (2.84) em (2.83) encontra-se que

$$H = -J \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -J \left(\frac{m}{g \mu_B} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.85)$$

Uma vez que g é um fator adimensional e como os momentos magnéticos são expressões em termos do magnéton de Bohr, fica verificado que os termos entre parênteses na equação (2.85) são adimensionais. Agora na equação (2.1) toma-se o produto escalar dela com ela mesmo, ou seja, $\vec{m} \cdot \vec{m} = (-\gamma \vec{S}) \cdot (-\gamma \vec{S})$, portanto

$$m^2 = \gamma^2 S^2 \quad (2.86)$$

Levando este resultado na primeira igualdade da equação (2.85) encontra-se que

$$H = -J \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -J \left(\frac{S}{\hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.87)$$

Ressalta-se que S é o módulo do momento angular de spin, cuja dimensão é dada pela constante $\hbar$, assim definindo o parâmetro adimensional

$$\sigma = \frac{S}{\hbar} = \frac{m}{\gamma \hbar} = \frac{m}{g \mu_B} \quad (2.88)$$

que nada mais é do que o módulo do spin normalizado (e também o módulo do momento magnético normalizado), podemos reescrever a equação (2.87) como

$$H = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.89)$$

na primeira igualdade usamos o fato de que os vetores momento magnético e momento angular de spin do elétron são antiparalelos, ou seja, $\hat{m}_i = -\hat{S}_i$.

É usual englobar o fator adimensional σ^2 na constante de troca, assim, vamos definir uma nova constante de troca,

$$J \leftarrow J \sigma^2 \quad (2.90)$$

Assim a igualdade (2.89), pode ser reescrita como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (2.91)$$

A equação (2.91) em conjunto com o vínculo não linear

$$\hat{m}_i \cdot \hat{m}_i = (m_i^x)^2 + (m_i^y)^2 + (m_i^z)^2 = 1 \quad (2.92)$$

é conhecido na literatura como **modelo de Heisenberg isotrópico**. Se $J < 0$ na equação (2.91), ela descreve o ordenamento antiferromagnético, uma vez que a energia do sistema torna-se mínima quando os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente ($\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -1$). Seguindo esse mesmo raciocínio, notamos que $J > 0$ refere-se ao ordenamento ferromagnético, no qual a configuração de menor energia ocorre quando os momentos magnéticos se alinham paralelamente ($\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = +1$).

Embora a interação de troca seja responsável pelo ordenamento magnético, ela não especifica uma direção preferencial para tal ordenamento. Existem vários tipos de anisotropia magnética. É possível que um sistema magnético apresente mais de um tipo de anisotropia e neste caso, haverá uma competição entre as anisotropias. A anisotropia de forma foi discutida na seção 2.3.2, ela está relacionada à forma geométrica do material e manifesta-se em amostras finitas. Um acoplamento anisotrópico deste tipo é obtido ao se considerar as interações dipolo-dipolo. Além da anisotropia de forma, que é fundamental no estudo de nanomagnetos, um tipo de anisotropia bem comum é a anisotropia magnetocristalina, que favorece o alinhamento em relação a um eixo ou plano da rede cristalográfica do material. Amostras magnéticas que exibem este tipo de anisotropia são conhecidos como materiais magnéticos duros. Materiais magnéticos macios são aqueles que apresentam anisotropia magnetocristalina muito pequena. Um nanomagneto feito com um material magnético macio, tal como o Permalloy, apresenta uma anisotropia magnetocristalina desprezível, portanto, a anisotropia efetiva tem sua principal contribuição na anisotropia de forma. Uma maneira de descrever um sistema que apresenta uma anisotropia magnetocristalina considerável é obtida definindo uma hamiltoniana mais genérica, que leve em conta a existência de uma direção fácil ou difícil para os momentos magnéticos se alinharem. Por exemplo, a hamiltoniana (2.91) pode ser substituída por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \kappa m_i^z m_j^z \right) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[m_i^x m_j^x + m_i^y m_j^y + (1 - \kappa) m_i^z m_j^z \right] \quad (2.93)$$

em que κ é o parâmetro de anisotropia (adimensional). A hamiltoniana (2.93) em conjunto com o vínculo (2.92), é conhecido como **modelo de Heisenberg anisotrópico**. Dessa forma, para um ferromagneto $J > 0$, para $\kappa = 0$, recuperamos o modelo de Heisenberg isotrópico. Para $0 < \kappa < 1$, temos o modelo de Heisenberg de plano fácil, que é caracterizado pela preferência dos momentos magnéticos se alinharem paralelamente em qualquer direção dentro de um plano, que nesse caso é o plano-xy. Para $\kappa = 1$, temos o caso limite de uma anisotropia fortemente planar; aqui distingue-se dois modelos, o modelo XY e do modelo do rotor planar, basta considerar os momentos magnéticos com três ou duas componentes, respectivamente. Finalmente, para $\kappa < 0$, temos o modelo Heisenberg de eixo-fácil, que é caracterizado pela preferência dos momentos magnéticos se alinharem perpendicularmente a um plano, o eixo-fácil neste caso é o eixo-z. Resumindo, o parâmetro de anisotropia é tal que

- $\kappa = 0$ corresponde ao modelo isotrópico;
- $\kappa = 1$ corresponde a dois modelos: modelo XY e o modelo do rotor planar (os vetores momentos magnéticos são bidimensionais);
- $0 < \kappa < 1$ corresponde ao modelo de plano-fácil, que neste caso é o plano-xy;
- $\kappa < 0$ corresponde ao modelo de eixo-fácil, que neste caso é o eixo-z.

2.4.2 Energia de troca

A seguir será obtido o limite contínuo para o modelo de Heisenberg isotrópico. Neste desenvolvimento, emprega-se os mesmos procedimentos que foram seguidos nas referências (107, 108), embora aqui os momentos magnéticos serão distribuídos numa rede tridimensional, em particular um rede cúbica simples de parâmetro de rede a .

A equação (2.91) também pode ser escrita como ¹⁰

$$H = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} [m_i^x m_j^x + m_i^y m_j^y + m_i^z m_j^z] \quad (2.94)$$

¹⁰ Aqui não usaremos a definição (2.90).

Numa rede cúbica simples temos 6 primeiros vizinhos, assim considere o i -ésimo versor momento magnético $\hat{m}_i$ e os seus vizinhos mais próximos, $\hat{m}_{i\pm 1}$, $\hat{m}_{i\pm 2}$ e $\hat{m}_{i\pm 3}$. Definindo os elementos de interação entre primeiros vizinhos

$$T_i^\alpha = m_i^\alpha (m_{i+1}^\alpha + m_{i-1}^\alpha) + m_i^\alpha (m_{i+2}^\alpha + m_{i-2}^\alpha) + m_i^\alpha (m_{i+3}^\alpha + m_{i-3}^\alpha) \quad (2.95)$$

em que $\alpha = x, y, z$. Pode-se aproximar os somatórios na equação (2.94) por uma integral tripla sobre o volume do material V , ou seja

$$E_{tr} = -J \sigma^2 \int_V \frac{dv}{a^3} (T^x + T^y + T^z) \quad (2.96)$$

em que omitiu-se o índice i , pois qualquer sítio pode ser considerado. O valor da integral é conhecido como **energia de troca**.

Para baixas temperaturas, as flutuações térmicas são insignificantes e as variações nas direções dos momentos magnéticos são graduais, conseqüentemente, pode-se expandir as componentes dos momentos magnéticos dos primeiros vizinhos numa série de Taylor. Lembrando que, $f(\vec{r}) = f(\vec{r}_0) + (\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}_0) + \dots$, temos

$$m_{i+1}^\alpha = m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2}$$

$$m_{i-1}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2}$$

$$m_{i+2}^\alpha = m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2}$$

$$m_{i-2}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2}$$

$$m_{i+3}^\alpha = m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial z} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2}$$

$$m_{i-3}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial z} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2}$$

em que foi conservado termos até a segunda ordem, além disso, os termos envolvendo derivadas mistas foram desprezados.

Substituindo essas expansões em T_i^α , as derivadas primeiras se cancelam e portanto

$$T_i^\alpha = 6(m_i^\alpha m_i^\alpha) + a^2 m_i^\alpha \left(\frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2} \right) \quad (2.97)$$

ou seja,

$$T_i^\alpha = 6(m_i^\alpha)^2 + a^2 m_i^\alpha \nabla^2 S_i^\alpha \quad (2.98)$$

Levando este resultado na equação(2.96), temos que

$$\begin{aligned} E_{tr} = & -J \sigma^2 \int_V \frac{dv}{a^3} 6[(m^x)^2 + (m^y)^2 + (m^z)^2] + \\ & -J \sigma^2 \int_V \frac{dv}{a^3} a^2 [m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z] \end{aligned} \quad (2.99)$$

Com o uso da equação (2.92), a última expressão se reduz a

$$\begin{aligned} E_{tr} = & -\frac{6J\sigma^2 V}{a^3} + \\ & -\frac{J\sigma^2}{a} \int_V dv [m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z] \end{aligned} \quad (2.100)$$

em que o primeiro termo corresponde à energia E_0 do estado fundamental do sistema, desprezando esse termo, a energia do estado fundamental será renormalizada para zero. Portanto, podemos escrever,

$$E_{tr} = -\frac{J\sigma^2}{a} \int_V dv [m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z] \quad (2.101)$$

Definindo o parâmetro ¹¹

$$A = \frac{J\sigma^2}{a} \quad (2.102)$$

e também identificando o produto escalar, pode-se escrever a equação (2.101) numa forma mais compacta,

$$E_{tr} = -A \int_V dv [\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m}] \quad (2.103)$$

O parâmetro A é positivo e a energia de troca nunca é negativa, assim, uma forma mais conveniente de expressar o resultado (2.103) consiste em utilizar uma identidade vetorial, que será demonstrar a seguir. Partindo do fato que $\hat{m}$ é um versor, equação (2.92), temos que $\hat{m} \cdot \hat{m} = 1$, e tomando o laplaciano em ambos os membros, obtemos

$$\nabla^2(\hat{m} \cdot \hat{m}) = 0 \quad (2.104)$$

Em notação indicial, essa equação se escreve

$$\partial_i \partial_i (m_j m_j) = 0$$

$$\partial_i [\partial_i m_j m_j] = 0$$

$$\partial_i [(\partial_i m_j) m_j + m_j (\partial_i m_j)] = 0$$

$$2 \partial_i [(\partial_i m_j) m_j] = 0$$

$$\partial_i [(\partial_i m_j) m_j] = 0$$

$$(\partial_i \partial_i m_j) m_j + (\partial_i m_j) (\partial_i m_j) = 0$$

$$(\nabla^2 m_j) m_j + (\vec{\nabla} m_j) \cdot (\vec{\nabla} m_j) = 0$$

Portanto,

$$-\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m} = \sum_{j=1}^3 |\vec{\nabla} m_j|^2 \quad (2.105)$$

Dessa forma, podemos expressar (2.103) como

$$E_{tr} = -A \int_V dv [\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m}] = A \int_V dv \sum_{j=1}^3 |\vec{\nabla} m_j|^2 \quad (2.106)$$

¹¹ Mais adiante será discutido a sua interpretação física.

ou seja,

$$E_{tr} = -A \int_V dv [\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m}] = A \int_V dv (|\vec{\nabla} m^x|^2 + |\vec{\nabla} m^y|^2 + |\vec{\nabla} m^z|^2) \quad (2.107)$$

Pode-se ver a partir da expressão (2.107) que a energia de troca é proporcional ao módulo ao quadrado do gradiente da magnetização, isso significa que o termo de troca mede a não-uniformidade da magnetização (109). Se a magnetização for uniforme, a contribuição da energia de troca será a mínima possível, neste caso, ela será nula. Lembra-se que a equação (2.102) foi obtida para uma rede cúbica simples. A generalização para redes com simetria cúbica, como as redes de corpo centrado e a de face centrada, é dada pela expressão

$$A = \frac{nJ\sigma^2}{a} \quad (2.108)$$

onde $n = 1$ para a rede cúbica simples (SC, “*simple cubic*”), $n = 2$ para rede cúbica de corpo centrado (BCC, “*body-centered cubic*”) e $n = 4$ para a rede cúbica de face centrada (FCC, “*face-centered cubic*”). O parâmetro n nada mais é do que o número de sub-redes cúbicas simples que são necessárias para gerar as outras redes. Por exemplo, a rede cúbica de corpo centrado corresponde a duas sub-redes cúbicas deslocadas (uma rede adicional é necessária formar os sítios no centro do cubo). Já a rede cúbica de face centrada corresponde a quatro sub-redes cúbicas deslocadas (3 redes adicionais são necessárias para formar os sítios no centro das faces do cubo, planos x , y e z). A constante ou integral de troca J fornece um indicativo da intensidade da interação entre dois spins. O parâmetro A , denominado **dureza da constante de troca** (“*exchange stiffness constant*”) é mais adequado para descrever o material ferromagnético, uma vez que ele depende de J , do tipo de rede, do parâmetro de rede a e também do módulo do spin (normalizado). Através da equação (2.108) nota-se que o parâmetro A é positivo e possui dimensão de energia por comprimento, sendo medido em [J / m] no SI. Esse parâmetro fornece a intensidade do acoplamento magnético, portanto ele mede quão difícil é para um dado momento magnético desviar-se da direção do campo de troca (109).

3 *DINÂMICA DA MAGNETIZAÇÃO*

Neste capítulo discutimos dois métodos complementares para o estudo da dinâmica da magnetização em nanomagnetos. Inicialmente é abordado um método quantitativo fundamentado na integração da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (equação de LLG), que consiste num sistema de equações diferenciais não-lineares de 1^a ordem. Como uma única equação de LLG é na verdade um sistema de 3 equações diferenciais acopladas, ou seja, uma equação vetorial com 3 componentes (para os vetores magnetização ou momentos magnéticos), assim para um sistema magnético constituído por N momentos magnéticos é necessário resolver um sistema de $3N$ equações diferenciais de 1^a ordem. Um nanomagneto é um sistema interessante pois a sua configuração magnética pode comportar-se como uma quasipartícula. A equação de movimento para a quasipartícula é conhecida como equação de Thiele; ela pode ser útil ao se fazer um estudo qualitativo do sistema magnético. Ao descrever o sistema como uma única partícula é possível compreender as propriedades dinâmicas do sistema sem que seja necessário recorrer à equação de LLG, porque a equação de Thiele foi derivada da equação de LLG. Em particular, estudaremos a equação de Thiele para o vórtice magnético num nanodisco. Para esse sistema será obtido tanto a solução analítica quanto a solução geométrica. Dessa forma, veremos que a equação de Thiele é apropriada para o estudo do modo girotrópico da quasipartícula, que neste caso corresponde ao núcleo do vórtice.

3.1 A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT

A dinâmica do Micromagnetismo é governada por uma equação diferencial fenomenológica, trata-se de uma generalização da equação que descreve a precessão de um momento de dipolo em torno de um campo magnético. Em 1935, Landau e Lifshitz (110) propuseram uma equação que ficou conhecida como equação de Landau-Lifshitz (equação de LL), ela descrevia muito bem a dinâmica da magnetização para uma certa classe de materiais ($\alpha \ll 1$), entretanto, em alguns casos, ela conduzia a resultados que não eram observados experimentalmente. Em 1955, Gilbert (111) modificou a equação de LL para descrever também dos materiais que apresentavam altos valores do parâmetro de amortecimento e a equação ficou conhecida como equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (equação de LLG), que é dada por

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}| \gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (3.1)$$

em que α é um parâmetro fenomenológico, conhecido como parâmetro de “*damping*”. Ele é característico para cada material, sendo análogo a uma constante de amortecimento. Observa-se que α é adimensional. γ é a razão giromagnética, a constante de proporcionalidade que relaciona momento angular e momento magnético, veja a equação (2.1).

O primeiro termo na equação 3.1, descreve o torque de precessão. O segundo termo é conhecido como torque de “*damping*”, este torque de amortecimento é responsável pelo alinhamento do momento magnético na direção do campo magnético. Experimentos mostram que um momento magnético se move eventualmente na direção do campo magnético¹. O torque de precessão $\vec{T} = \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H})$ não é capaz de realizar tal alinhamento, porque ele é perpendicular a $\vec{H}$. Como mostrado na figura (3.1), um torque adicional, perpendicular tanto a $\vec{m}$ quanto a $\vec{T}$ é necessário para dar conta desse alinhamento. Esse torque de amortecimento, $\vec{T}_D$ é dado por

$$\vec{T}_D = \frac{\alpha}{|\vec{m}| \gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (3.2)$$

¹ Este fenômeno foi observado logo no primeiro dispositivo magnético: a bússola.

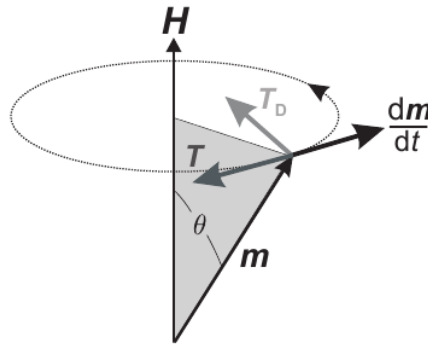


Figura 3.1 – O torque de precessão e o torque de amortecimento agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência (112).

A evolução temporal do momento magnético num campo magnético é mostrada na figura (3.2), vemos que na dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$) o momento magnético apenas precessiona, enquanto que na dinâmica com amortecimento ($\alpha > 0$) o momento magnético descreve uma precessão amortecida, espiralando em torno do campo.

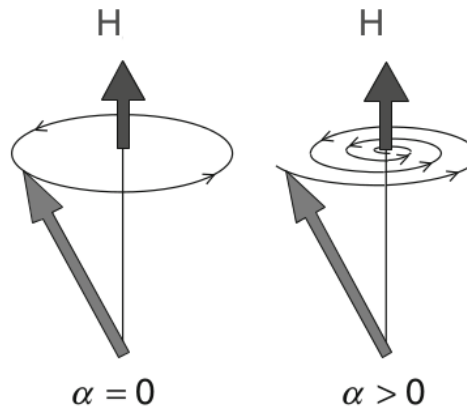


Figura 3.2 – Evolução temporal de um único momento magnético. Na dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$), o momento magnético apenas precessiona em torno do campo; o sistema é conservativo. Já na dinâmica com amortecimento ($\alpha > 0$) o momento magnético espirala em torno do campo, quando o alinhamento é atingido, o torque total é nulo e a energia do sistema é mínima. Figura adaptada da referência (52).

É possível mostrar que a equação de LLG preserva o módulo do vetor momento magnético, modificando apenas sua direção. Para essa demonstração, toma-se o produto escalar

com $\vec{m}$ em ambos os membros da equação (3.1)

$$\begin{aligned}
 \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} &= -\gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \cdot \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \\
 &= \gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{H} \times \vec{m}) - \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \cdot \left(\frac{d\vec{m}}{dt} \times \vec{m} \right) \\
 &= \gamma \mu_0 \vec{H} \cdot (\vec{m} \times \vec{m}) - \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \frac{d\vec{m}}{dt} \cdot (\vec{m} \times \vec{m})
 \end{aligned}$$

em que na última passagem utilizou-se a seguinte identidade do produto misto ²,

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (3.3)$$

Portanto,

$$\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} = 0 \quad (3.4)$$

isso significa que a taxa de variação do momento magnético é sempre perpendicular a ele próprio.

Por outro lado, usando a derivada de um produto escalar

$$\frac{d}{dt}(\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{dt} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{dt} \quad (3.5)$$

com $\vec{A} = \vec{B} = \vec{m}$ temos que,

$$\frac{d}{dt}(\vec{m} \cdot \vec{m}) = \frac{d\vec{m}}{dt} \cdot \vec{m} + \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt}$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt} |\vec{m}|^2 = 2 \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (3.6)$$

Agora usando o resultado (3.4), obtemos

$$\frac{d}{dt} |\vec{m}|^2 = 0 \quad (3.7)$$

e assim, demonstra-se que o momento magnético $\vec{m}$ evolui com módulo constante.

² Em particular a segunda igualdade na equação (3.3).

A equação (3.1) é conhecida como **forma implícita** da equação de LLG, porque o $\left(\frac{d\vec{m}}{dt}\right)$ aparece em ambos os membros dessa equação. A equação de LLG pode ser escrita na seguinte forma

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\frac{\mu_0}{1+\alpha^2} \left[\vec{m} \times \vec{H} + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \right] \quad (3.8)$$

que é conhecida como **forma explícita** da equação de LLG. Esse desenvolvimento é feito a seguir.

Para obter a forma explícita da equação de LLG devemos isolar o $\left(\frac{d\vec{m}}{dt}\right)$ num dos membros dessa equação. Para essa demonstração, toma-se o produto vetorial com $\vec{m}$ pela esquerda em ambos os membros da equação (3.1)

$$\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (3.9)$$

$$= -\gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \left[\left(\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \vec{m} - (\vec{m} \cdot \vec{m}) \frac{d\vec{m}}{dt} \right] \quad (3.10)$$

em que foi utilizado a seguinte identidade do produto duplo vetorial

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C}) \vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C} \quad (3.11)$$

com $\vec{A} = \vec{B} = \vec{m}$ e $\vec{C} = \frac{d\vec{m}}{dt}$,

O primeiro termo entre colchetes na equação (3.10) é nulo devido a equação (3.4), portanto

$$\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) - \alpha |\vec{m}| \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (3.12)$$

Substituindo a equação (3.12) no último membro da equação (3.1), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} &= -\mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}| \gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \\ &= -\mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{|\vec{m}| \gamma} \left[-\gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) - \alpha |\vec{m}| \frac{d\vec{m}}{dt} \right] \\ &= -\mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\mu_0 \alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\frac{1}{\gamma} [1 + \alpha^2] \frac{d\vec{m}}{dt} = -\mu_0 \left[(\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \right]$$

E, finalmente

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\frac{\mu_0}{1 + \alpha^2} \left[(\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \right] \quad (3.13)$$

Este último resultado coincide com a equação (3.8), que foi previamente apresentada como forma explícita da equação de LLG.

A solução analítica da equação de LLG é possível apenas em alguns casos particulares, a dificuldade reside no fato de que a equação de LLG é não-linear e, em geral, só pode ser resolvida numericamente.

A equação de LLG dada pela equação (3.8) descreve a evolução temporal de um único momento magnético, tratando-se de uma equação vetorial com 3 componentes, para uma coleção de N momentos magnéticos, temos que resolver um sistema com $3N$ equações diferenciais acopladas, ou seja,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1 + \alpha^2} \left[\vec{m}_i \times \vec{H}_i + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right] \quad (3.14)$$

em que o campo magnético $\vec{H}_i$ não é simplesmente um campo magnético externo e estático como aquele mostrado nas figuras (3.1) ou (3.2). O campo $\vec{H}_i$ é um campo interno, que contém a contribuição individual dos campos de troca e dipolar; um campo magnético externo pode se acoplar a esse campo magnético interno. Assim, cada momento magnético $\vec{m}_i$ descreve uma precessão amortecida em torno do seu respectivo **campo magnético efetivo local**, $\vec{H}_i$, que em geral não é estático; ele também precessa devido ao acoplamento dos momentos magnéticos.

O campo $\vec{H}_i$ deriva da hamiltoniana do sistema,

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} \quad (3.15)$$

Obviamente a hamiltoniana do sistema permite o cálculo da energia de uma dada configuração magnética. Uma vez especificada uma configuração inicial para o sistema, a dinâmica em tempo real é obtida integrando-se o sistema de equações diferenciais via algum método numérico. No

apêndice B é discutido dois métodos de integração numérica que são amplamente utilizados para integrar a equação de LLG.

Na literatura é muito comum encontrar a equação de LLG expressa em termos dos vetores magnetização $\vec{M}$ em lugar dos vetores momentos magnéticos $\vec{m}$. Além disso, ao invés de um campo magnético externo é muito comum incluir termos que descrevem a interação dos momentos magnéticos com uma corrente de spin-polarizado.

3.2 A EQUAÇÃO DE THIELE PARA O VÓRTICE NUM NANODISCO

O confinamento de um material magnético em nano-escala pode fazer a configuração magnética do sistema se comportar como uma quasipartícula. A quasipartícula pode ser a um vórtice, antivórtice, skyrmion e paredes de domínio em geral. Uma quasipartícula é caracterizada por suas propriedades estruturais e, já que estamos falando de uma partícula, pode-se associar variáveis dinâmicas tais como posição, velocidade, etc. Neste contexto, um método alternativo para o estudo da dinâmica da magnetização em nanomagnetos foi inicialmente desenvolvido por Thiele. Nesta formulação, a equação de Thiele descreve a dinâmica da quasipartícula. Em outras palavras, essa teoria fornece uma equação de movimento para a quasipartícula, que é útil para o estudo qualitativo de uma dada configuração magnética. Uma redução significativa no número de equações diferenciais a serem integradas é obtida neste método complementar, que dispensa a integração da equação de LLG.

Na década de 70, Thiele formulou uma teoria para simplificar o cálculo das propriedades dinâmicas de estruturas micromagnéticas (113, 114). Partindo da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert ele obteve uma equação de movimento para uma estrutura, para isso ele supôs que a quasipartícula se movia com velocidade constante e que ela não se deformaria durante a sua evolução temporal. Huber aplicou essa teoria à dinâmica de vórtices em sistemas bidimensionais com anisotropia de plano fácil (115). A seguir é feita uma revisão da teoria de Thiele aplicada ao caso do vórtice magnético num nanodisco. Uma resumo dos conceitos discutidos

nesta seção pode ser encontrado no apêndice C.

A **equação de Thiele** é escrita em termos de um equilíbrio de forças,

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = \vec{0} \quad (3.16)$$

A força $\vec{F}$ é dada por

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U \equiv -\frac{\partial U}{\partial \vec{X}} \quad (3.17)$$

ou seja, ela é obtida calculando o negativo do gradiente da energia potencial do vórtice, que é dada por

$$U(\vec{X}) = U(\vec{0}) + \frac{k}{2} |\vec{X}|^2 - \mu[\hat{e}_3 \times \vec{B}] \cdot \vec{X} \quad (3.18)$$

O primeiro termo na equação (3.18) é a energia potencial do núcleo do vórtice quando ele se encontra na sua posição de equilíbrio ³, ou seja, em $\vec{X} = \vec{0}$. O segundo termo está relacionado com as energias de troca e magnetostática devido ao deslocamento do núcleo do vórtice da posição de equilíbrio, o coeficiente k é uma função do raio e da espessura do disco (17), sendo análogo à constante elástica da lei de Hooke. O último termo na equação (3.18) corresponde a um termo de energia Zeeman que está relacionado com um campo magnético externo aplicado no plano do disco ⁴, a constante μ é dada por (116)

$$\mu = \frac{2}{3} \pi q R L M_S \quad (3.19)$$

ela dimensão de [A . m]. O parâmetro q é quiralidade do vórtice, que pode assumir os seguintes valores $q = \pm 1$, observando o disco de um ponto em que a coordenada z é positiva, $q = 1$ significa que a circulação da magnetização está no sentido anti-horário. M_S é a magnetização de saturação do material, L a espessura do disco e R é o seu raio. Assim, a constante μ pode ser positiva ou negativa dependendo do sinal da quiralidade q . A energia potencial do vórtice pode incluir outros termos além daqueles na equação (3.18), como correções do tipo $O(|\vec{X}|^4)$, potenciais devido a impurezas, interações com outros vórtices, etc.

³ $U(\vec{0})$ é uma constante.

⁴ O núcleo do vórtice só é deslocado da sua posição de equilíbrio se o campo for aplicado no plano do disco. O versor $\hat{e}_3$ é perpendicular a este plano. O campo aplicado pode variar no tempo.

Calculando o negativo do gradiente da equação (3.18), obtemos dois vetores componentes

$$\vec{F} = \vec{F}_{int} + \vec{F}_{ext} \quad (3.20)$$

explicitamente,

$$\vec{F}_{int} = -k \vec{X} \quad (3.21)$$

e

$$\vec{F}_{ext} = \mu [\hat{e}_3 \times \vec{B}] \quad (3.22)$$

O primeiro termo na equação (3.20), ou seja, a força interna $\vec{F}_{int}$ é uma força restauradora do tipo central. Ela possui um caráter desmagnetizante, que tende a trazer o núcleo do vórtice de volta para a sua posição de equilíbrio, trata-se de uma força radial que sempre aponta para o centro do disco. Por outro lado, a força devido ao campo magnético externo tende a deslocar o núcleo do vórtice para longe desse ponto de equilíbrio, a força $\vec{F}_{ext}$ atua no plano do disco.

Em termos dos seus componentes, a força $\vec{F} = F_1 \hat{e}_1 + F_2 \hat{e}_2$, da pela equação (3.20), pode ser escrita como

$$\vec{F} = -k(X_1 \hat{e}_1 + X_2 \hat{e}_2) - \mu(B_2 \hat{e}_1 - B_1 \hat{e}_2)$$

ou seja,

$$\vec{F} = (-kX_1 - \mu B_2) \hat{e}_1 + (-kX_2 + \mu B_1) \hat{e}_2 \quad (3.23)$$

A segunda força na equação (3.16) é conhecida como força girotrópica, ela é dada por

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times \vec{V} \quad (3.24)$$

em que $\vec{V}$ é a velocidade do núcleo do vórtice. $\vec{G}$ é o girovetor⁵, no caso do vórtice num nanodisco, ele é simplesmente um vetor constante, que é perpendicular ao plano do disco (117),

$$\vec{G} = - \left(\frac{2\pi p L M_S}{\gamma} \right) \hat{e}_3 = -G \hat{e}_3 \quad (3.25)$$

⁵ A teoria de Thiele (113) fornece uma expressão geral para cálculo do girovetor, que é uma propriedade intrínseca da estrutura magnética.

sendo γ é a razão giromagnética e p é a polaridade do núcleo do vórtice, que pode assumir os valores $p = \pm 1$. O versor $\hat{e}_3$ é normal ao plano do disco, assim se a polaridade do vórtice for $p = 1$ a componente da magnetização fora do plano aponta no sentido positivo do eixo-z, e devido ao sinal negativo, vemos que o girovetor aponta no sentido oposto ao da polaridade. Note que foi definida a constante ⁶

$$G = \frac{2\pi p L M_S}{\gamma} \quad (3.26)$$

que pode ser positiva ou negativa dependendo do sinal da polaridade p .

A força girotrópica apresenta a mesma estrutura matemática da força magnética que age sobre uma partícula carregada em movimento numa região onde existe um campo magnético,

$$\vec{F}_G = p \vec{V} \times \left(\frac{2\pi p L M_S}{\gamma} \hat{e}_3 \right) \Leftrightarrow F = q \vec{V} \times \vec{B} \quad (3.27)$$

Nessa analogia, a polaridade p corresponde a carga elétrica da partícula q , e dessa forma, é possível entender a relação entre a polaridade e o sentido do giro do núcleo do vórtice (modo girotrópico). Essa peculiaridade será discutida mais adiante.

O último termo na equação (3.16) é a força de “*damping*”, sendo análoga a uma força de atrito

$$\vec{F}_D = -D \vec{V} \quad (3.28)$$

pois ela sempre atua no sentido contrário à velocidade. O parâmetro D corresponde a um parâmetro de amortecimento ⁷, sendo que ele está relacionada ao parâmetro α da equação de LLG, explicitamente (117)

$$D = \alpha \frac{\pi L M_S}{\gamma} [2 + \ln(R/R_c)] \quad (3.29)$$

em que R_c é o raio do núcleo do vórtice, que é uma função da espessura do disco (118),

$$R_c(L) = 0.68 \lambda \sqrt[3]{\frac{L}{\lambda}}, \quad L \geq \lambda \quad (3.30)$$

⁶ A constante G não é o módulo do girovetor; G pode ser positivo ou negativo.

⁷ Em geral, D é um tensor, a teoria de Thiele (113) fornece uma expressão para cálculo do tensor de “*damping*”.

em que o comprimento de troca é lembrado ser

$$\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \quad (3.31)$$

O parâmetro de amortecimento é positivo ($D > 0$) e o sinal negativo na equação (3.28) indica que $\vec{F}_D$ se opõe à velocidade. Note que os parâmetros G e D apresentam a mesma dimensão, ou seja, $[(N \cdot s) / m] = [kg / s]$.

Wysin foi além da aproximação do vórtice rígido, permitindo que a estrutura de vórtice se deformasse quando em movimento, assim ele obteve uma **equação de Thiele generalizada** (119)

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = M \frac{d\vec{V}}{dt} \quad (3.32)$$

Essa equação permite que o núcleo do vórtice acelere durante seu movimento, M é denominado tensor de massa ⁸. Mesmo se $\vec{G} = \vec{0}$, a equação (3.32) ainda possui uma dinâmica. No entanto, essa equação não é apropriada para descrever uma excitação girotrópica, que é caracterizada por $\vec{G} \neq \vec{0}$, por exemplo, um vórtice com componente fora do plano (vórtice não-planar). O modo girotrópico é caracterizado pela rotação do núcleo do vórtice em torno de um ponto fixo, sendo que o sentido do giro depende apenas da sua polaridade e o sistema apresenta um única frequência. No entanto, um estudo da equação (3.32) mostra que ela apresenta um duplete de frequências para uma estrutura girotrópica (120).

Na teoria das variáveis coletivas considera-se que a estrutura sofre uma deformação durante o seu movimento. Além disso, essa teoria afirma que vórtices planares apresentam uma dinâmica newtoniana, ou seja, são governados por equações diferenciais de ordem par, enquanto que vórtices não-planares têm uma dinâmica não-newtoniana, sendo governados por equações de diferenciais de ordem ímpar. Uma discussão detalhada sobre esse assunto pode ser encontrada nas referências (117, 121, 122). Dessa forma, existe na literatura, uma equação de terceira ordem, que é mais apropriada que a equação (3.32) para descrever um vórtice não-planar. Thiaville generalizou a equação (3.16) para incluir o efeito de uma corrente de spin-

⁸ O tensor de massa foi calculado por Wysin (119). No caso do vórtice, M reduz-se a uma constante, cuja expressão possui uma dependência logarítmica semelhante àquela da energia do vórtice.

polarizado (123) e a solução analítica dessa equação é encontrada nas referências (124, 125).

A fim de entender as propriedades básicas do modo girotrópico do núcleo do vórtice num nanodisco, vamos nos ater à equação (3.16). Para alguns casos, essa equação admite uma solução analítica, entretanto, uma solução geométrica é mais interessante e nos conduzirá ao entendimento qualitativo do modo girotrópico. Ressalta-se que equação de Thiele descreve muito bem o movimento girotrópico, todavia ela não descreve o mecanismo de reversão da polaridade do vórtice, porque neste caso o vórtice sofre uma deformação na sua estrutura, e isso contradiz a suposição inicial de que o vórtice não se deforma durante a evolução temporal. Em outras palavras, pode-se dizer que uma vez especificadas as propriedades estruturais do vórtice (quiralidade e polaridade), elas não mudam durante a dinâmica do vórtice.

Substituindo as forças $\vec{F}_G$, $\vec{F}_D$ na equação (3.16), tem-se que

$$\vec{F} + \vec{G} \times \vec{V} - D\vec{V} = \vec{0} \quad (3.33)$$

A fim de reescrever a equação (3.33) como um sistema de equações para $\vec{V} = \frac{d\vec{X}}{dt}$, vamos tomar o produto externo com $\vec{G}$ pela esquerda, em ambos os membros dessa equação, ou seja, $\vec{G} \times (\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D) = \vec{G} \times \vec{0} = \vec{0}$, assim,

$$\vec{G} \times \vec{F} + \vec{G} \times (\vec{G} \times \vec{V}) + \vec{G} \times (-D\vec{V}) = \vec{0} \quad (3.34)$$

Usando a identidade vetorial do produto externo duplo

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C} \quad (3.35)$$

com $\vec{A} = \vec{B} = \vec{G}$ e $\vec{C} = \vec{V}$ obtém-se que

$$\vec{G} \times \vec{F} + (\vec{G} \cdot \vec{V})\vec{G} - (\vec{G} \cdot \vec{G})\vec{V} - D\vec{G} \times \vec{V} = \vec{0} \quad (3.36)$$

Uma vez que $(\vec{G} \cdot \vec{V}) = 0$, pois esses vetores são perpendiculares, temos

$$\vec{G} \times \vec{F} - |\vec{G}|^2 \vec{V} - D\vec{G} \times \vec{V} = \vec{0} \quad (3.37)$$

Esse resultado também pode ser escrito como ⁹

$$\vec{G} \times \vec{V} = \frac{1}{D} \left[\vec{G} \times \vec{F} - G^2 \vec{V} \right] \quad (3.38)$$

Levando a equação (3.38) na equação de Thiele, ou seja, na equação (3.33), temos

$$\vec{F} + \frac{1}{D} \left[\vec{G} \times \vec{F} - G^2 \vec{V} \right] - D \vec{V} = \vec{0} \quad (3.39)$$

E isolando $\vec{V}$, obtemos

$$(D^2 + G^2) \vec{V} = D \vec{F} + \vec{G} \times \vec{F} \quad (3.40)$$

Calculando o produto externo, temos

$$\vec{G} \times \vec{F} = (-G \hat{e}_3) \times (F_1 \hat{e}_1 + F_2 \hat{e}_2) = (G F_2) \hat{e}_1 + (-G F_1) \hat{e}_2 \quad (3.41)$$

Esse resultado pode ser escrito numa forma matricial, ou seja,

$$\begin{bmatrix} 0 & +G \\ -G & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +G F_2 \\ -G F_1 \end{bmatrix}$$

Usando a matriz identidade, podemos escrever

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D F_1 \\ D F_2 \end{bmatrix}$$

O vetor velocidade $\vec{V} = \frac{d\vec{X}}{dt}$, na equação (3.40) será escrito como

$$\begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix}$$

Dessa forma, podemos escrever a equação (3.40) numa forma matricial, ou seja,

$$\begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix} = \frac{1}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} D & +G \\ -G & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix}$$

⁹ Note que $|\vec{G}|^2$ foi substituído por G^2 , sendo G a constante que foi definida na equação (3.26). Uma vez que $\vec{G} = -G \hat{e}_3$, temos que $|\vec{G}|^2 = \vec{G} \cdot \vec{G} = (-G \hat{e}_3) \cdot (-G \hat{e}_3) = G^2$.

(3.42)

que nada mais é do que equação de Thiele escrita em termos de matrizes.

Substituindo os componentes de $\vec{F}$, dados pela equação (3.23), temos

$$\begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix} = \frac{1}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} D & +G \\ -G & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -(kX_1 + \mu B_2) \\ -(kX_2 - \mu B_1) \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

Efetuada o produto matricial, a equação de Thiele pode ser escrita numa forma explícita, ou seja,

$$\begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix} = \frac{k}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} -D & -G \\ +G & -D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} + \frac{\mu}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} +G & -D \\ +D & +G \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

Assim fica evidente que a equação de Thiele é um sistema de equações diferenciais lineares de 1^a ordem com os coeficientes constantes,

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b} \quad (3.45)$$

em que a matriz dos coeficientes é

$$\mathbf{A} = \frac{k}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} -D & -G \\ +G & -D \end{bmatrix}$$

e o termo independente

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \frac{\mu}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} +G & -D \\ +D & +G \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \frac{\mu}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} (G B_1 - D B_2) \\ (D B_1 + G B_2) \end{bmatrix}$$

Pontos críticos são pontos onde $\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{b} = \mathbf{0}$. Uma vez que $\mathbf{X}' = \mathbf{0}$ nestes pontos, eles correspondem a **soluções constantes** ou **soluções de equilíbrio**. Se $\det \mathbf{A} \neq 0$, $\mathbf{A}$ é não singular, ou seja, $\mathbf{A}^{-1}$ existe. Então, multiplicado a inversa pela esquerda, $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}_c = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, temos que os pontos críticos são dados por

$$\mathbf{X}_c = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \quad (3.46)$$

A matriz inversa da matriz $\mathbf{A}$ é dada por

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{k} \begin{bmatrix} -D & +G \\ -G & -D \end{bmatrix}$$

então, efetuando a multiplicação (3.46), obtemos

$$\mathbf{X}_c = \frac{\mu/k}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} -D & +G \\ -G & -D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} +G & -D \\ +D & +G \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$\mathbf{X}_c = \frac{\mu/k}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} 0 & -(D^2 + G^2) \\ +(D^2 + G^2) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

Portanto, encontramos que o ponto crítico ocorre em

$$\mathbf{X}_c = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ +1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \frac{\mu}{k} \begin{bmatrix} -B_2 \\ +B_1 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Notamos que se o campo externo for nulo, então $\mathbf{X}_c = [0; 0]$, ou seja, a origem é o único ponto crítico do sistema. Por outro lado, se um campo magnético está presente, então o ponto crítico está localizado num ponto que depende do campo e da quiralidade ($\mu \propto q$) do vórtice ¹⁰.

¹⁰ A constante $k > 0$. O ponto crítico $\mathbf{X}_c$ não depende da polaridade, pois a constante $G \propto p$ foi cancelada na multiplicação (3.47). Pelo mesmo motivo, $\mathbf{X}_c$ também é independente da constante de amortecimento D .

Os autovalores da matriz dos coeficientes determinam o tipo do ponto crítico que o sistema apresenta. Os autovalores de $\mathbf{A}$ são

$$\lambda_1 = Z = \frac{k}{D^2 + G^2} (-D + i G) \quad (3.49a)$$

$$\lambda_2 = Z^* = \frac{k}{D^2 + G^2} (-D - i G) \quad (3.49b)$$

uma vez que eles são complexos conjugados, segue da teoria dos sistemas de equações lineares (126) que o ponto crítico do sistema é do tipo **espiral**. No caso particular, $D = 0$, os autovalores de $\mathbf{A}$ são imaginários puros, $\lambda = \pm i \left(\frac{k}{G} \right)$ e o ponto crítico do sistema é do tipo **centro**, mas as coordenadas do ponto crítico continuam sendo dadas pela equação (3.48).

Antes de analisar o caso geral, $D \neq 0$ é interessante discutir o caso em que o sistema é conservativo, ou seja, $D = 0$. Calculando os valores de $\mathbf{AX} + \mathbf{b}$ para um grande número de pontos $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ e plotando os vetores resultantes ¹¹, obtém-se um campo de direções de vetores tangentes às soluções do sistema de equações diferenciais ¹². Na figura (3.3a) é mostrado a trajetória do núcleo do vórtice com polaridade e quiralidade $(p, q) = (1, 1)$, para plotar o campo de direções assumiu-se $G = p$, $\mu = q$ e $k = 1$. A partir de $t = 0$ um campo magnético foi mantido ligado no sentido positivo do eixo y, $\mathbf{B} = [0; 2]$. Assim, o núcleo do vórtice gira em torno do ponto $\mathbf{X}_c = [-2; 0]$ no sentido anti-horário. Na figura (3.3b), manteve-se o mesmo campo, porém o estado inicial do vórtice foi considerado com a polaridade contrária $(p, q) = (-1, 1)$, nota-se que campo de velocidades é invertido e o núcleo do vórtice gira no sentido horário. *É importante não confundir quiralidade com o sentido de rotação do campo de direções* ¹³. Na figura (3.3c), vemos que se o campo externo for nulo ou for desligado, o ponto crítico neste caso é $\mathbf{X}_c = [0; 0]$, então o vórtice permanece na origem ou possui uma tendência natural de girar em torno dela, sendo o sentido da rotação unicamente determinado pela polaridade do vórtice. Portanto, no caso em que o ponto crítico é do tipo **centro**, que ocorre

¹¹ Existem vários programas que fazem isso facilmente.

¹² Neste caso, o campo de direções corresponde a um campo de vetores velocidade.

¹³ Aqui nós estamos no espaço de fase, que coincide como o espaço das coordenadas, mas os vetores não são momentos magnéticos.

quando o sistema é conservativo, $D = 0$, as trajetórias do núcleo do vórtice no espaço de fase são elipses centradas no ponto crítico $\mathbf{X}_c$ e percorridas no sentido anti-horário se $p = 1$ e no sentido horário se $p = -1$.

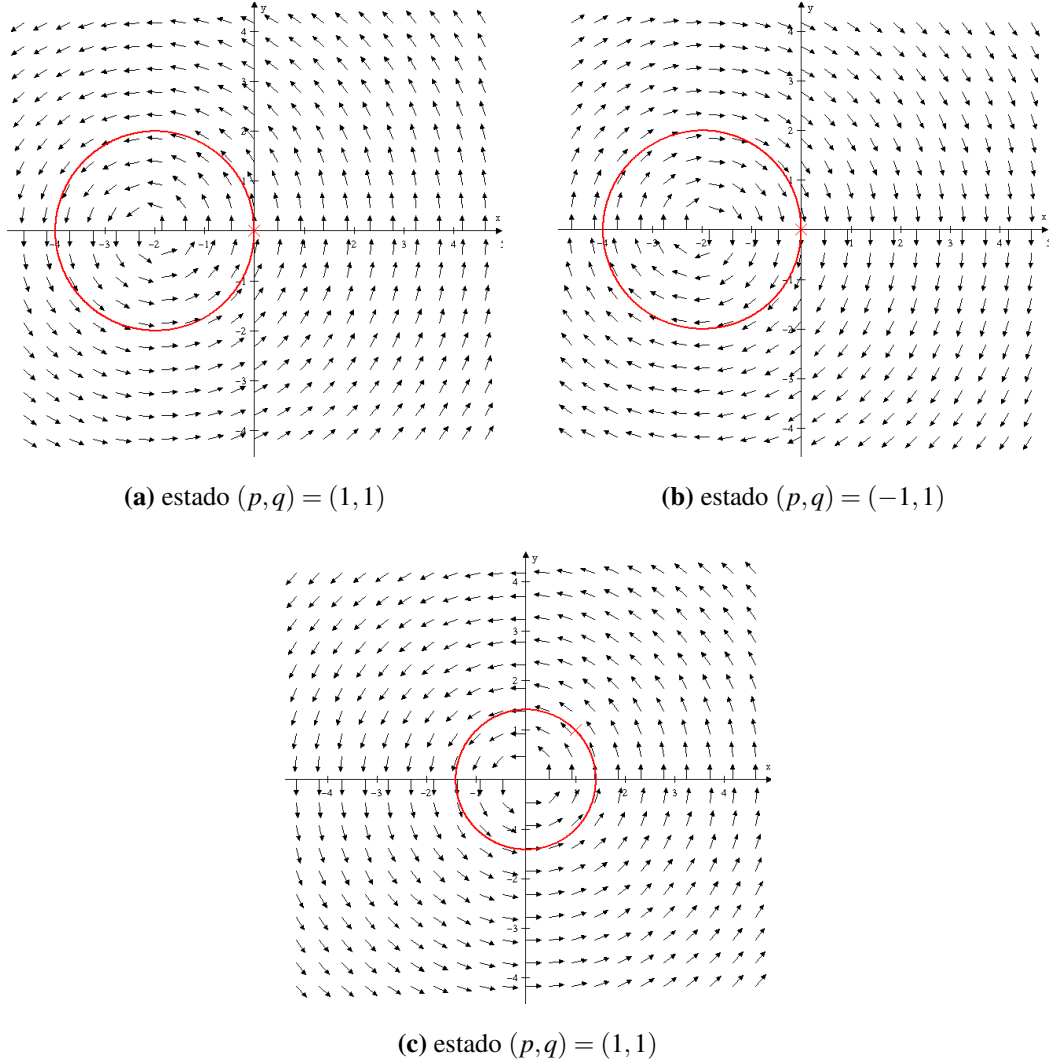


Figura 3.3 – Trajetórias no espaço de fase para o núcleo do vórtice, considerando o sistema como conservativo $D = 0$. Nas figuras (a) e (b) um campo magnético $\mathbf{B} = [0; 2]$ é mantido ligado, o núcleo do vórtice parte da origem e gira no sentido horário ou anti-horário dependendo da sua polaridade. O ponto no qual ele gira depende do sentido do campo e também da sua quiralidade, neste caso $\mathbf{X}_c = [-2; 0]$. Em (c) o campo magnético externo é nulo, assim se o núcleo do vórtice está na origem, ele permanece. Por outro lado, se ele está deslocado, ele gira em torno dela, pois neste caso é $\mathbf{X}_c = [0; 0]$.

No caso em que o ponto crítico é do tipo **espiral**, que ocorre quando o sistema não é conservativo, $D \neq 0$, a dinâmica é praticamente a mesma, exceto que as trajetórias no espaço de fase são espirais ao invés de elipses. O fato da parte real dos autovalores de $\mathbf{A}$ ser negativa, já que $D > 0$, diz que essas espirais são dirigidas para o ponto crítico. Assim, todas as trajetória se

aproximam do ponto crítico quando $t \rightarrow \infty$. Atribuindo valores numéricos para os parâmetros do sistema: $D = 0.025$, $\mu = q = 1$, $k = 1$, $G = p = 1$ e $\mathbf{B} = [2; 0]$, o ponto crítico do sistema, de acordo com a equação (3.48) ocorre em $\mathbf{X}_c = [0; 2]$, e o estado do vórtice é $(p, q) = (1, 1)$, portanto ele deveria espiralar no sentido anti-horário. A fim de verificar a dinâmica do núcleo do vórtice no caso do sistema ser dissipativo, foi plotado o campo de direções do sistema de equações $\mathbf{X}' = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{b}$, o resultado é mostrado na figura (3.4). Como previsto, vemos que num campo magnético externo, o núcleo do vórtice parte da origem e espirala em torno do ponto $\mathbf{X}_c = [0; 2]$ no sentido anti-horário, já que a sua polaridade é $p = 1$. Na ausência de um campo externo o ponto crítico neste caso é $\mathbf{X}_c = [0; 0]$, então o vórtice permanece na origem ou possui uma tendência natural de espiralar em torno dela, sendo o sentido da rotação unicamente determinada pela polaridade do núcleo.

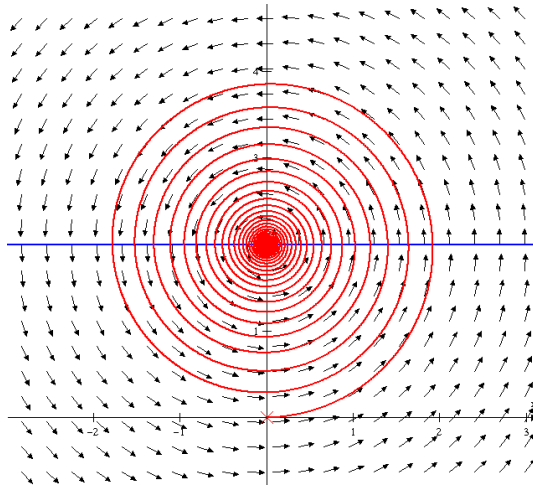


Figura 3.4 – Trajetórias no espaço de fase para o núcleo do vórtice, considerando o sistema como dissipativo $D = 0.025$. O núcleo é caracterizado por $(p = 1, q = 1)$ e um campo magnético constante é aplicado no sentido positivo do eixo-x, $\mathbf{B} = [2; 0]$. O vórtice parte da origem e espirala em torno do ponto $\mathbf{X}_c = [0; 2]$ no sentido anti-horário, uma vez que $p = 1$. Uma reta horizontal em azul, $X_2 = 2$, foi plotada para realçar o ponto crítico.

A seguir obteremos a solução analítica da equação de Thiele para o caso de um campo magnético independente do tempo. Vimos que se um campo magnético for mantido ligado, o núcleo do vórtice gira ou espirala em torno de um ponto crítico $\mathbf{X}_c \neq [0; 0]$, ou seja, ele não coincide com a origem do sistema de coordenadas; o centro geométrico do disco. Fazendo uma transformação $\mathbf{U} = \mathbf{X} - \mathbf{X}_c$ é possível transladar esse ponto crítico para a origem de um outro

sistema de coordenadas. Essa mudança do sistema de coordenadas não modifica a dinâmica do sistema uma vez que o sistema equivalente é descrito por $\mathbf{U}' = \mathbf{A} \mathbf{U}$, ou seja, apresenta a mesma matriz dos coeficientes $\mathbf{A}$. Uma vez obtida a solução do sistema equivalente, podemos usar a transformação inversa

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} + \mathbf{X}_c \quad (3.50)$$

e assim voltar para o sistema de coordenadas original.

Para obter a equação de Thiele no novo sistema de coordenadas, cuja origem coincide com o ponto crítico, substitui-se a equação (3.50) na equação de Thiele original, equação (3.45). Derivando essa transformação em relação ao tempo, obtém-se $\mathbf{X}' = \mathbf{U}'$, pois o ponto crítico é um ponto fixo. Assim, equação de Thiele original

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b}$$

torna-se

$$\mathbf{U}' = \mathbf{A} (\mathbf{U} + \mathbf{X}_c) + \mathbf{b}$$

$$\mathbf{U}' = \mathbf{A} \mathbf{U} + \mathbf{A} \mathbf{X}_c + \mathbf{b}$$

substituindo a equação (3.46) temos

$$\mathbf{U}' = \mathbf{A} \mathbf{U} + \mathbf{A} (-\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}) + \mathbf{b}$$

Portanto, no novo sistema de coordenadas, a equação de Thiele é

$$\mathbf{U}' = \mathbf{A} \mathbf{U} \quad (3.51)$$

De forma explícita, temos

$$\begin{bmatrix} U_1' \\ U_2' \end{bmatrix} = \frac{k}{D^2 + G^2} \begin{bmatrix} -D & -G \\ +G & -D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

Antes de prosseguir vamos definir novos parâmetros

$$\delta = \left(\frac{Dk}{D^2 + G^2} \right) \quad (3.53)$$

e

$$\tau = \left(\frac{Gk}{D^2 + G^2} \right) \quad (3.54)$$

assim o sistema (3.52), torna-se

$$\begin{bmatrix} U_1' \\ U_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\delta & -\tau \\ +\tau & -\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} \quad (3.55)$$

de forma explícita

$$\frac{dU_1}{dt} = -\delta U_1 - \tau U_2 \quad (3.56a)$$

$$\frac{dU_2}{dt} = +\tau U_1 - \delta U_2 \quad (3.56b)$$

Introduzindo coordenadas polares, r e θ ,

$$r^2 = U_1^2 + U_2^2 \quad (3.57)$$

e

$$\tan \theta = \frac{U_2}{U_1} \quad (3.58)$$

Derivando essas equações em relação ao tempo, obtém-se

$$r \frac{dr}{dt} = U_1 \frac{dU_1}{dt} + U_2 \frac{dU_2}{dt} \quad (3.59)$$

e

$$(\sec^2 \theta) \frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{U_1^2} \left[U_1 \frac{dU_2}{dt} - U_2 \frac{dU_1}{dt} \right] \quad (3.60)$$

Substituindo as equações (3.56) na equação (3.59), obtém-se

$$r \frac{dr}{dt} = U_1 [-\delta U_1 - \tau U_2] + U_2 [+ \tau U_1 - \delta U_2] \quad (3.61)$$

Com isso, os termos mistos $U_1 U_2$ são cancelados e depois de usar a equação (3.57), obtém-se a seguinte equação diferencial

$$\frac{dr}{dt} = -\delta r \quad (3.62)$$

cujas solução é

$$r(t) = r_0 e^{-\delta t} \quad (3.63)$$

em que r_0 é uma constante, ou seja, a distância do núcleo do vórtice em relação à origem do sistema de coordenadas no instante $t = 0$.

Analogamente, substituindo as equações (3.56) na equação (3.60), obtém-se

$$(\sec^2 \theta) \frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{U_1^2} [U_1 (+\tau U_1 - \delta U_2) - U_2 (-\delta U_1 - \tau U_2)] \quad (3.64)$$

Novamente, os termos mistos $U_1 U_2$ são cancelados e depois de usar a equação (3.57), obtém-se

$$(\sec^2 \theta) \frac{d\theta}{dt} = \frac{r^2}{U_1^2} [\tau] \quad (3.65)$$

Uma vez que

$$U_1 = r \cos \theta \quad (3.66)$$

e

$$U_2 = r \sin \theta \quad (3.67)$$

A equação (3.66) fornece

$$\frac{r^2}{U_1} = \frac{1}{\cos^2 \theta} = \sec^2 \theta \quad (3.68)$$

portanto, substituindo este resultado na equação (3.65), obtemos

$$\frac{d\theta}{dt} = \tau \quad (3.69)$$

A solução dessa equação diferencial é bem simples, ou seja,

$$\theta(t) = \tau t + \theta_0 \quad (3.70)$$

em que θ_0 é valor de θ quando $t = 0$.

A seguir reunimos as equações (3.63) e (3.70), ou seja,

$$r(t) = r_0 e^{-\delta t} \quad (3.71a)$$

$$\theta(t) = \tau t + \theta_0 \quad (3.71b)$$

elas são equações paramétricas das trajetórias do sistema (3.55) em coordenadas polares, quando for preciso voltar para o sistema de coordenadas cartesianas usaremos as equações (3.66) e (3.67).

Substituindo as constantes δ e τ , que foram definidas nas equações (3.53) e (3.54), o sistema (3.71) torna-se

$$r(t) = r_0 e^{-\left(\frac{Dk}{D^2+G^2}\right)t} \quad (3.72a)$$

$$\theta(t) = \left(\frac{Gk}{D^2+G^2}\right)t + \theta_0 \quad (3.72b)$$

Uma vez que $k > 0$ e $D > 0$, segue da equação (3.72a) que $r \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Se $G > 0$ (**vórtice com polaridade positiva**) segue da equação (3.72b) que θ aumenta quando t aumenta, assim o modo girotrópico ocorre no **sentido anti-horário**. Se $G < 0$ (**vórtice com polaridade negativa**) segue da equação (3.72b) que θ diminui quando t aumenta, de forma que o modo girotrópico ocorre no **sentido horário**. Portanto, as trajetórias que o núcleo do vórtice pode seguir são espirais ($D > 0$) ou elipses ($D = 0$). No sistema de coordenadas U , esse ponto crítico sempre corresponde à origem ¹⁴, $\mathbf{U}_c = [0; 0]$. No sistema de coordenadas X , o ponto crítico ocorre em $\mathbf{X}_c = \frac{\mu}{k}[-B_2; B_1]$, ou seja, ele depende da quiralidade e do campo externo, veja a equação (3.48).

¹⁴ Foi justamente por este motivo que este sistema de coordenadas foi escolhido.

Para um campo magnético independente do tempo, a **solução analítica** da equação de Thiele no sistema de coordenadas U é

$$U_1(t) = r_0 e^{-\delta t} \cos(\tau t + \theta_0) \quad (3.73a)$$

$$U_2(t) = r_0 e^{-\delta t} \sin(\tau t + \theta_0) \quad (3.73b)$$

Note que apenas foi substituído as equações (3.71) nas equações (3.66) e (3.67). Usando a transformação, $\mathbf{X} = \mathbf{U} + \mathbf{X}_c$, dada pela equação (3.50) e também a equação que fornece as coordenadas do ponto crítico, dada pela equação (3.48), obtemos a solução da equação de Thiele no sistema de coordenadas X , ou seja,

$$X_1(t) = r_0 e^{-\delta t} \cos(\tau t + \theta_0) - \frac{\mu}{k} B_2 \quad (3.74a)$$

$$X_2(t) = r_0 e^{-\delta t} \sin(\tau t + \theta_0) + \frac{\mu}{k} B_1 \quad (3.74b)$$

A seguir será obtida a **frequência girotrópica** prevista pela equação de Thiele. Pode ser tentador pensar que a constante entre parênteses da equação (3.72b), isto é, o parâmetro τ , seja uma auto-frequência do sistema, note que tanto δ quanto τ apresentam dimensão de inverso de tempo. Embora a dimensão de frequência esteja correta, veremos que a constante τ não é a frequência que estamos procurando ¹⁵. As constantes entre parênteses nas equações (3.72) estão relacionados com as partes real e imaginária dos autovalores (3.49) da matriz $\mathbf{A}$, ou seja,

$$\Re\{\lambda_1\} = -\left(\frac{Dk}{D^2 + G^2}\right) = \Re\{\lambda_2\} \quad (3.75a)$$

$$\Im\{\lambda_1\} = \left(\frac{Gk}{D^2 + G^2}\right) = -\Im\{\lambda_2\} \quad (3.75b)$$

¹⁵ No caso $D = 0$ há uma coincidência.

Uma vez que a soma e a multiplicação de dois números complexos conjugados geram números reais, podemos especular as seguintes constantes

$$\lambda_1 + \lambda_2 = Z + Z^* = 2\Re\{Z\} = \left(-\frac{2Dk}{D^2 + G^2}\right) < 0 \quad (3.76a)$$

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 = Z \cdot Z^* = |Z|^2 = \left(\frac{k^2}{D^2 + G^2}\right) > 0 \quad (3.76b)$$

Como a frequência é uma grandeza positiva, a soma dos autovalores não pode estar associada à frequência girotrópica. Por outro lado, o produto dos autovalores pode estar associado a essa autofrequência, uma vez que o produto fornece uma grandeza positiva ¹⁶.

Na verdade, o quadrado da frequência girotrópica é que está associado com o produto dos autovalores,

$$\omega^2 = \lambda_1 \cdot \lambda_2 = Z \cdot Z^* = |Z|^2 \quad (3.77)$$

Isso pode ser percebido quando se faz uma análise dimensional da equação (3.76b). D e G possuem a mesma dimensão $[(N \cdot s) / m] = [kg / s]$. Além disso, lembramos que k é análoga a uma constante elástica, ou seja, apresenta a dimensão $[N / m] = [kg / s^2]$. Assim, notamos que $\left(\frac{k^2}{D^2 + G^2}\right)$ tem dimensão

$$\left[\frac{(kg)^2}{(s)^4}\right] \cdot \left[\frac{(s)^2}{(kg)^2}\right] = \left[\frac{1}{(s)^2}\right] \quad (3.78)$$

de inverso do quadrado do tempo. Portanto, conclui-se que a dimensão de frequência $[1 / s]$ é obtida quando extraímos a raiz quadrada em ambos os membros da equação (3.76b), então propomos

$$\omega = \sqrt{\lambda_1 \cdot \lambda_2} = \sqrt{\frac{k^2}{D^2 + G^2}} \quad (3.79)$$

ou seja, a frequência girotrópica é dada pela raiz quadrada dos produto de autovalores. Será que isso está correto? Pelo menos o sinal e a unidade são coerentes para descrever uma frequência. Só falta verificar se este parâmetro se encaixa numa equação física, por exemplo, a equação diferencial que descreve um oscilador harmônico. Isso será verificado a seguir.

¹⁶ Uma forma equivalente, de associar autovalores de uma matriz é pensar nas suas propriedades como o traço e o determinante. Em nosso caso a matriz 2×2 , temos que $Tr(\mathbf{A}) = \lambda_1 + \lambda_2$ e $Det(\mathbf{A}) = \lambda_1 \cdot \lambda_2$.

Até então estudamos a equação de Thiele escrita como um sistema de duas equações diferenciais acopladas de 1ª ordem, é possível desacoplar essas equações, mas o preço que se paga é um aumento na ordem das equações diferenciais. Em outras palavras, é possível expressar a equação de Thiele como um sistema de duas equações diferenciais desacopladas de 2ª ordem. Como será demonstrado, as duas equações de 2ª ordem correspondem a equação de um oscilador harmônico amortecido. Isso deveria ser esperado em virtude das soluções analíticas que foram obtidas, veja por exemplo, as equações (3.73) ou (3.74). Como a equação diferencial de um oscilador harmônico é bem conhecida ¹⁷ será possível identificar a frequência do sistema como um parâmetro (ou coeficiente) dessa equação.

Assim a equação de Thiele, ou seja, a equação (3.45) escrita como um sistema de equações é

$$X_1' = -\delta X_1 - \tau X_2 + b_1 \quad (3.80a)$$

$$X_2' = +\tau X_1 - \delta X_2 + b_2 \quad (3.80b)$$

Note que estamos usando os parâmetros δ e τ que foram definidos nas equações (3.53) e (3.54).

Das equações (3.80) podemos isolar X_1 e X_2

$$-\tau X_2 = X_1' + \delta X_1 - b_1 \quad (3.81a)$$

$$\tau X_1 = X_2' + \delta X_2 - b_2 \quad (3.81b)$$

As equações (3.81) serão utilizadas posteriormente.

A fim de desacoplar o sistema de equações de 1ª ordem, derivamos as equações (3.80) em relação ao tempo, ou seja

$$X_1'' = -\delta X_1' - \tau X_2' + b_1' \quad (3.82a)$$

$$X_2'' = +\tau X_1' - \delta X_2' + b_2' \quad (3.82b)$$

¹⁷ Isto é, ela possui uma estrutura característica.

Agora, no segundo membro das equações (3.82) substituímos as equações (3.80), ou seja,

$$X_1'' = -\delta X_1' - \tau [+ \tau X_1 - \delta X_2 + b_2] + b_1' \quad (3.83a)$$

$$X_2'' = +\tau [-\delta X_1 - \tau X_2 + b_1] - \delta X_2' + b_2' \quad (3.83b)$$

que também podem ser escritas como

$$X_1'' = -\delta X_1' - \tau^2 X_1 - \delta [-\tau X_2] - \tau b_2 + b_1' \quad (3.84a)$$

$$X_2'' = -\delta [\tau X_1] - \tau^2 X_2 + \tau b_1 - \delta X_2' + b_2' \quad (3.84b)$$

Substituindo os termos entre colchetes nas equações (3.84) pelas equações (3.81), obtém-se que

$$X_1'' = -\delta X_1' - \tau^2 X_1 - \delta [X_1' + \delta X_1 - b_1] - \tau b_2 + b_1' \quad (3.85a)$$

$$X_2'' = -\delta [X_2' + \delta X_2 - b_2] - \tau^2 X_2 + \tau b_1 - \delta X_2' + b_2' \quad (3.85b)$$

ou seja,

$$X_1'' = -2\delta X_1' - (\delta^2 + \tau^2) X_1 - \delta b_1 - \tau b_2 + b_1' \quad (3.86a)$$

$$X_2'' = -2\delta X_2' - (\delta^2 + \tau^2) X_2 + \tau b_1 + \delta b_1 + b_2' \quad (3.86b)$$

Definido novos parâmetros

$$b = 2\delta = \frac{2kD}{D^2 + G^2} \quad (3.87)$$

e

$$\omega^2 = \delta^2 + \tau^2 = \frac{k^2}{D^2 + G^2} \quad (3.88)$$

e também os termos independentes ¹⁸

$$\Psi_1(t) = -\delta b_1 - \tau b_2 + b_1' \quad (3.89a)$$

$$\Psi_2(t) = +\tau b_1 + \delta b_1 + b_2' \quad (3.89b)$$

¹⁸ Eles são independentes das coordenadas. Eles dependem do campo magnético, que pode variar no tempo.

podemos fica evidente que as equações para X_1 e X_2 são idênticas

$$X_1'' + b X_1' + \omega^2 X_1 = \Psi_1(t) \quad (3.90a)$$

$$X_2'' + b X_2' + \omega^2 X_2 = \Psi_2(t) \quad (3.90b)$$

Portanto, vemos que a equação de Thiele, pode ser escrita como um **sistema de duas equações diferenciais de 2ª ordem desacopladas**, vetorialmente o sistema de equações (3.90) pode ser escrito como

$$\frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} + b \frac{d\vec{X}}{dt} + \omega^2 \vec{X} = \vec{\Psi}(t) \quad (3.91)$$

No caso particular de oscilações livres, $\vec{\Psi}(t) = \vec{0}$, temos que essas equações são homogêneas

$$\frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} + b \frac{d\vec{X}}{dt} + \omega^2 \vec{X} = \vec{0} \quad (3.92)$$

sendo que ambas as equações são formalmente idênticas à **equação de um oscilador harmônico amortecido**. Portanto, a auto-frequência prevista pela equação de Thiele, é dada por ¹⁹

$$\omega = \frac{k}{\sqrt{G^2 + D^2}} = \frac{k}{\sqrt{G^2 \left(1 + \frac{D^2}{G^2}\right)}} = \frac{k}{|G|} \left(1 + \frac{D^2}{G^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.93)$$

No caso do **sistema sem amortecimento**, $D = 0$, a auto-frequência do sistema é

$$\omega_0 = \frac{k}{|G|} \quad (3.94)$$

Manipulando a equação (3.88), podemos encontrar a relação entre ω , τ e ω_0 , segue que

$$\omega^2 = \frac{k^2}{D^2 + G^2} = \frac{k^2}{D^2 + G^2} \left(\frac{|G|}{|G|}\right) = \left(\frac{|G| k}{D^2 + G^2}\right) \left(\frac{k}{|G|}\right) = \tau \omega_0 \quad (3.95)$$

No caso particular em que $D = 0$, temos que $\tau = \omega_0$, assim, $\omega = \omega_0 = \tau$.

¹⁹ Lembra-se que essa previsão foi feita na equação (3.79).

Agora vamos analisar a “frequência” do sistema com amortecimento $D > 0$. É útil definir o parâmetro

$$\Gamma = \frac{D^2}{G^2} \quad (3.96)$$

para classificar o **tipo de amortecimento** que o sistema apresenta. Dessa forma, temos os seguintes casos:

- $\Gamma < 1$ o sistema apresenta um fraco amortecimento ;
- $\Gamma = 1$ o sistema apresenta um amortecimento crítico;
- $\Gamma > 1$ o sistema é superamortecido.

No caso do vórtice num nanodisco de Permalloy, sabe-se que o sistema apresenta uma fraco amortecimento, ou seja, $\Gamma < 1$. Usando as equações (3.26) e (3.29) pode-se estimar o valor da razão adimensional Γ . Por exemplo, para um nanodisco de Permalloy-79, com dimensões $R = 85$ [nm] e $L = 10$ [nm], o valor de $\left| \frac{D}{G} \right| \approx 0.025$ e o valor de $\Gamma \approx 0.000625$. Embora o movimento do núcleo do vórtice não seja harmônico simples, o parâmetro ω dado pela equação (3.93) determina a frequência de oscilação do núcleo do vórtice. Comparando a **quasifrequência** ω com a frequência ω_0 do sistema não-amortecido, encontramos ²⁰

$$\frac{\omega}{\omega_0} = (1 + \Gamma)^{-\frac{1}{2}} \approx 1 - \frac{1}{2} \Gamma \quad (3.97)$$

Dessa forma, pode-se dizer que *o efeito de um pequeno amortecimento é reduzir ligeiramente a frequência de oscilação.*

²⁰ Essa aproximação só é válida quando Γ for pequeno.

4 *MODELAGEM COMPUTACIONAL DE NANOMAGNETOS*

Sistemas magnéticos são constituídos por muitos momentos magnéticos atômicos, o tratamento analítico de tais sistemas não é fácil e na verdade deparamos-nos com um problema de muitos corpos. A simulação computacional é uma ferramenta poderosa que ajuda a entender a dinâmica da magnetização em sistemas nanoestruturados. Simulações numéricas podem ser calibradas para reproduzir e prever observações experimentais, utilizando inclusive os mesmos parâmetros e unidades empregados num laboratório. Atualmente, vários programas estão disponíveis e tem sido amplamente utilizados para resolver a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, entretanto, optamos por desenvolver e utilizar em nossas simulações um código computacional próprio, escrito na linguagem Fortran-90. Neste capítulo descrevemos a fundamentação teórica e a metodologia computacional que foram empregados para modelar um nanomagnetito.

4.1 HAMILTONIANA DE UM NANOMAGNETO

Para modelar o nanomagnetito foi suposto a existência de momentos magnéticos localizados. Em cada sítio de uma rede de Bravais associou-se um versor $\hat{m}_i$, que especifica a direção do momento magnético local. Um modelo clássico que pode ser usado para descrever as interações num nanomagnetito consiste na seguinte hamiltoniana

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (4.1)$$

que contém o modelo de Heisenberg isotrópico acrescido da anisotropia de forma. Aqui será feito uma breve revisão da interpretação física de cada um desses termos. O primeiro termo descreve a interação de troca, que é responsável pelo ordenamento magnético. A constante de acoplamento é positiva ($J > 0$) e esse termo de energia é minimizado quando os momentos magnéticos se alinham paralelamente. Portanto, o primeiro termo na equação (4.1) descreve o ordenamento ferromagnético. A interação de troca é uma interação de curto alcance, geralmente é considerado apenas as interações entre primeiros vizinhos, que estão separados por uma distância a . Todas as distâncias relativas entre os momentos magnéticos podem ser escritas em termos da distância fundamental a , que é a menor distância entre dois sítios da rede, assim, (r_{ij}/a) é uma distância relativa adimensional. O segundo termo na equação (4.1) descreve a interação dipolar. O parâmetro da interação dipolar também é positivo e, em geral, $(0 < D < J)$. A interação dipolar deve ser levada em conta ao se tratar um nanomagnetito porque ela descreve a anisotropia de forma. A interação dipolo-dipolo é uma interação de longo alcance, que decai com o inverso do cubo da distância entre momentos magnéticos. É possível notar que o primeiro termo da interação dipolar é minimizado quando os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente, ou seja, ele possui um caráter antiferromagnético. Enquanto que o segundo termo, que apresenta um fator 3 em relação ao primeiro, tende a alinhar os momentos magnéticos ao longo da direção que os une. Para um nanomagnetito feito com um material magnético macio, a anisotropia magnetocristalina é muito pequena em relação à anisotropia de forma e ela pode ser desprezada ¹.

Como já dito, sistemas magnéticos são constituídos por muitos momentos magnéticos atômicos, e mesmo para um nanomagnetito é inviável computacionalmente tratar as interações entre os momentos magnéticos numa escala atômica ². Devido a seu caráter de longo alcance, a computação das interações dipolo-dipolo gasta muito tempo. Para um sistema com N dipolos é necessário calcular $N(N - 1)$ interações dipolo-dipolo.

¹ Num nanomagnetito macio, a anisotropia predominante é a anisotropia de forma, que é automaticamente considerada ao se levar em conta as interações dipolo-dipolo.

² Isso significa utilizar o parâmetro de rede real de um dado material.

O Micromagnetismo é uma teoria de campo dos sistemas magnéticos, que trata semi-classicamente materiais ferromagnéticos na escala de comprimento que vai desde algumas dezenas de nanômetros até algumas centenas de micrômetros. Tais sistemas tornariam-se complexos demais se fossem tratados através da Mecânica Quântica. O Micromagnetismo descreve uma amostra magnética através de um campo clássico de vetores magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$, que são as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos.

4.2 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

Na aproximação micromagnética, o sistema é particionado em células, cada qual contendo muitos momentos atômicos. Por simplicidade, na figura (4.1) é mostrado uma discretização em duas dimensões³.

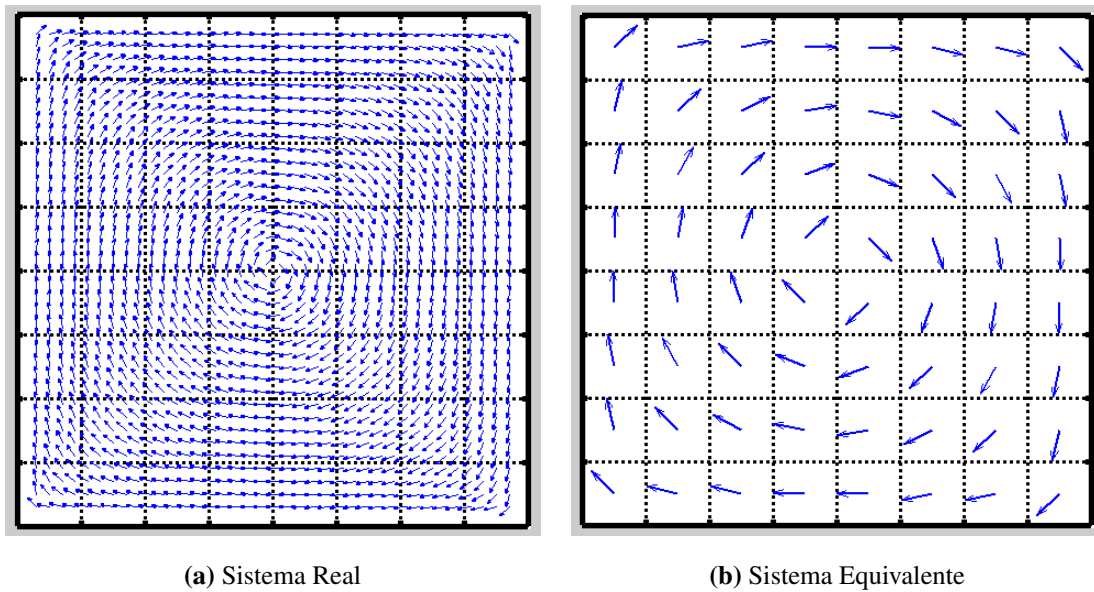


Figura 4.1 – Representação esquemática da aproximação micromagnética. (a) Sistema real, constituído por muitos momentos atômicos. (b) Sistema equivalente do ponto de vista micromagnético, os momentos magnéticos atômicos são substituídos por um momento magnético resultante localizado no centro de cada célula, ou seja, o momento magnético da célula.

Dentro de cada célula de volume V , os momentos magnéticos atômicos encontram-se praticamente alinhados, assim é possível associar um vetor magnetização local $\vec{M}$, que é uma

³ Em geral, esse particionamento é feito três dimensões.

espécie de densidade volumétrica de momentos magnéticos,

$$\vec{M}_i = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{\sim 10^4} \vec{m}_k^{\text{atom}} = \frac{1}{V} \vec{m}_i \quad (4.2)$$

Para se ter uma ideia, cada célula contém aproximadamente 10 mil momentos magnéticos atômicos ⁴, que são substituídos por um único momento magnético, $\vec{m}_i$, que é o **momento magnético da célula**. Dessa forma, ao invés de tratar as interações entre momentos atômicos, a aproximação micromagnética considera as interações entre os momentos magnéticos das células. Esta aproximação assume que os vetores magnetização $\vec{M}$ estão saturados no valor M_s . Dessa forma, escrevemos

$$\vec{M}_i = M_s \hat{m}_i \quad (4.3)$$

que corresponde a um parâmetro do material, M_s é a magnetização de saturação. Assim, de uma célula para outra, os vetores variam apenas a sua direção, que é dada pelo versor $\hat{m}_i$. Substituindo (4.3) na equação (4.2) vemos que o momento magnético de uma célula é dada por

$$\vec{m}_i = |\vec{m}_i| \hat{m}_i = m \hat{m}_i = (M_s V) \hat{m}_i \quad (4.4)$$

Assim, ele também tem módulo constante e aponta na direção do vetor magnetização.

A escolha do novo parâmetro de rede a é feita com base num outro parâmetro do material, o **comprimento de troca** λ , que fornece um “indicativo” do alcance da interação de troca, ou seja, até que distância essa interação consegue manter paralelismo dos momentos magnéticos atômicos. Assim se o parâmetro de rede escolhido for menor do que o comprimento de troca ($a < \lambda$) é possível garantir que os momentos atômicos estarão realmente saturados dentro de cada célula de trabalho. Portanto, na aproximação micromagnética, a discretização do material é ditada pelo comprimento de troca, que é dado por (109)

$$\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (4.5)$$

Esse comprimento característico depende de dois parâmetros do material, a dureza da constante de troca A e da magnetização de saturação M_s .

⁴ Essa estimativa é feita na seção 4.3.

Dessa forma, a escolha do novo parâmetro de rede dirá se essa aproximação será boa para descrever o sistema. Há uma certa arbitrariedade na escolha do tamanho da célula micro-magnética, uma vez que $a < \lambda$. O volume da célula de trabalho deve ser pequeno o suficiente para que os momentos atômicos no seu interior estejam praticamente alinhados e, ao mesmo tempo, esse volume tem que ser grande o suficiente para conter muitos momentos atômicos a fim de reduzir o número de momentos magnéticos, consequentemente, o número de interações a serem computadas.

Agora faremos a renormalização das constantes das interações magnéticas, e como veremos, as constantes das interações entre os momentos magnéticos das células dependem não apenas dos parâmetros do material mas também da maneira na qual o sistema é particionado em células.

A constante da interação de troca entre os momentos magnéticos das células será obtida seguindo a mesma ideia da referência (127), ou seja, a partir do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico sobre um rede cúbica simples. Na equação (2.107) obtemos a energia de troca, ou seja,

$$E_{tr} = A \int_V dv (|\vec{\nabla} m^x|^2 + |\vec{\nabla} m^y|^2 + |\vec{\nabla} m^z|^2) \quad (4.6)$$

Para o momento magnético da célula localizada na origem, $\hat{m}(\vec{0})$, os primeiros vizinhos estão localizados nas posições $\pm a\hat{x}$, $\pm a\hat{y}$ e $\pm a\hat{z}$. Usando o método de diferenças finitas na equação (4.6), a energia de troca dessa célula, na aproximação de mais baixa ordem, é

$$E_{tr}^{cel} = A a^3 \left(\left| \frac{\hat{m}(a\hat{x}) - \vec{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 + \left| \frac{\hat{m}(a\hat{y}) - \vec{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 + \left| \frac{\hat{m}(a\hat{z}) - \vec{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 \right) \quad (4.7)$$

em que foi considerado apenas esses três vizinhos para evitar a dupla contagem. Usando a identidade

$$|\vec{A} - \vec{B}|^2 = |\vec{A}|^2 - 2\vec{A} \cdot \vec{B} + |\vec{B}|^2$$

e em seguida, agrupando os termos, obtemos

$$E_{tr}^{cel} = Aa \left[|\hat{m}(a\hat{x})|^2 + |\hat{m}(a\hat{y})|^2 + |\hat{m}(a\hat{z})|^2 + 3|\hat{m}(\vec{0})|^2 - 2\hat{m}(\vec{0}) \cdot \{\hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z})\} \right]$$

Mas os $\hat{m}$ são versores, ou seja, $|\hat{m}| = 1$. Assim, a contribuição para a energia por célula é

$$E_{tr}^{cel} = A a \left[6 - 2 \hat{m}(\vec{0}) \cdot \{ \hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z}) \} \right] \quad (4.8)$$

ou seja,

$$E_{tr}^{cel} = 2 A a \left[3 - \hat{m}(\vec{0}) \cdot \{ \hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z}) \} \right] \quad (4.9)$$

Isso demonstra que a constante da interação de troca entre células é

$$J = 2 A a \quad (4.10)$$

No capítulo 2 obtemos as constantes das interações dipolar e Zeeman, veja as equações (2.28) e (2.14), para renormalizar esses parâmetros basta substituir a equação (4.4) nas respectivas expressões. A constante da interação dipolar entre células é

$$D = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 (M_s V)^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi} \quad (4.11)$$

A constante da interação do momento magnético da célula com um campo magnético externo é

$$Z = \mu_0 M_s m = \mu_0 M_s (M_s V) = \mu_0 M_s^2 a^3 \quad (4.12)$$

As constantes das interações renormalizadas que foram obtidas somente são válidas se a célula de trabalho for cúbica $V = a^3$, ou seja, se a discretização do material for feita numa rede cúbica simples, o que geralmente é feito.

As constantes da interações dipolar e Zeeman podem ser reescritas numa forma mais conveniente, isto é, em termos do comprimento de troca λ que é dado pela equação (4.5) e da constante da interação de troca efetiva J que é dada pela equação (4.10), assim

$$D = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) (2A a) a^2 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 J \quad (4.13)$$

e, de forma análoga

$$Z = \mu_0 M_s^2 a^3 = \left(\frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) (2A a) a^2 = \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 J \quad (4.14)$$

Dessa forma, fica evidente que as constantes das interações apresentam dimensão de energia, [J], e podemos computar a energia do sistema em unidades de J .

A hamiltoniana efetiva incluindo a interação Zeeman pode ser escrita como

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\} \quad (4.15)$$

O termo entre chaves na equação (4.15) pode ser identificado como a hamiltoniana adimensional

$$\mathcal{H} = \frac{H}{J} \quad (4.16)$$

Explicitamente, ela é dada por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\} \quad (4.17)$$

A indução magnética efetiva $\vec{B}_i$, medida em [T], é obtida derivando-se a hamiltoniana em relação às componentes dos momentos magnéticos $\vec{m}_i$, ou seja,

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} \quad (4.18)$$

Substituindo as relações (4.4) e (4.16), obtemos

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J}{|\vec{m}_i|} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i} \quad (4.19)$$

Comparando as equação (4.18) e (4.19), podemos definir uma indução magnética adimensional

$$\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i} \quad (4.20)$$

Dessa forma, a relação entre $\vec{B}_i$ e $\vec{b}_i$ é dada por

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J}{|\vec{m}_i|} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i} = +\frac{J}{|\vec{m}_i|} \left[-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i} \right] = \frac{J}{|\vec{m}_i|} \vec{b}_i \quad (4.21)$$

O fator de conversão, entre $\vec{B}_i$ e $\vec{b}_i$, apresenta dimensão de [T] e será definido como β . Ele pode ser expresso de uma forma mais conveniente, para isso usaremos as equações (4.4) e (4.10). Dessa forma, temos que

$$\beta = \frac{J}{|\vec{m}_i|} = \frac{2Aa}{M_s a^3} \left(\frac{\mu_0 M_s}{\mu_0 M_s} \right) = \left(\frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \right) \frac{1}{a^2} \mu_0 M_s$$

Por fim, usando a equação (4.5) que define o comprimento de troca, temos que

$$\beta = \frac{J}{|\vec{m}_i|} = \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 \mu_0 M_s \quad (4.22)$$

De acordo com (4.21) a relação entre a indução magnética e a sua correspondente adimensional, é

$$\vec{B}_i = \beta \vec{b}_i \quad (4.23)$$

O campo magnético $\vec{H}_i$, medido em [A / m], é obtido pela seguinte relação

$$\vec{H}_i = \frac{1}{\mu_0} \vec{B}_i = \frac{\beta}{\mu_0} \vec{b}_i \quad (4.24)$$

A seguir será obtido o fator de conversão entre o tempo real e o tempo computacional (tempo adimensional). Para isso será obtido a versão adimensional da equação de LLG. Uma forma de proceder é substituir as equações (4.4) e (4.24) na forma explícita da equação de LLG, veja a equação (3.14). Esse desenvolvimento é feito a seguir

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1+\alpha^2} \left[\vec{m}_i \times \vec{H}_i + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right]$$

$$\frac{1}{\gamma} |\vec{m}_i| \frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\frac{|\vec{m}_i| \mu_0}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{H}_i + \alpha \frac{|\vec{m}_i|}{|\vec{m}_i|} \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{H}_i) \right]$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \{\mu_0 \vec{H}_i\} + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \{\mu_0 \vec{H}_i\}) \right]$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{B}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{B}_i) \right]$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\frac{\beta}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right]$$

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = \beta \gamma \left\{ -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \right\} \quad (4.25)$$

Uma vez que α é adimensional, o termo entre chaves também é. Como o membro esquerdo dessa equação tem dimensão de inverso de tempo, $[1 / \text{s}]$, o produto $\beta \gamma$ também deve apresentar essa dimensão, caso contrário a equação não faria sentido. Dessa forma, definimos

$$\omega = \beta \gamma = \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 \mu_0 M_s \gamma \quad (4.26)$$

Ao definir β na equação (4.22), foi observado que ele tinha dimensão de $[\text{T}]$, devido a dimensão do produto $\mu_0 M_s$. Por outro lado, como observado no início do capítulo 2, a razão giromagnética γ tem dimensão de $[\text{T} \cdot \text{s}]^{-1}$, logo fica verificado que ω apresenta, de fato, dimensão de de inverso de tempo, $[\text{s}]^{-1}$.

Dessa forma, podemos definir o incremento de tempo computacional como

$$d\tau = \omega dt \quad (4.27)$$

Levando a equação (4.26) na equação (4.25) temos

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = \omega \left\{ -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \right\} \quad (4.28)$$

que também pode ser escrita como

$$\frac{d\hat{m}_i}{d(\omega t)} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (4.29)$$

Finalmente, usando a definição (4.27), obtemos

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (4.30)$$

que é a **versão adimensional** da equação de LLG em sua forma explícita.

De acordo com a equação (4.27), o fator de conversão entre intervalos de tempo, computacional e real, é dado por

$$\Delta t = \frac{1}{\omega} \Delta \tau \quad (4.31)$$

4.3 PARÂMETROS DO MATERIAL E UMA ESTIMATIVA PARA O NÚMERO DE MOMENTOS MAGNÉTICOS ATÔMICOS NUMA CÉLULA MICROMAGNÉTICA

Em nossas simulações o Permalloy-79, $\text{Fe}_{21}\text{Ni}_{79}$, foi escolhido como o material do nanomagnet. O conjunto de parâmetros desse material é: magnetização de saturação $M_s = 8,6 \times 10^5 \text{ [A / m]}$, dureza da constante de troca $A = 1,3 \times 10^{-11} \text{ [J / m]}$ e o parâmetro de amortecimento (presente na equação de movimento) $\alpha = 0,01$. Substituindo os valores numéricos de A e M_s na equação (4.5), estimamos o comprimento de troca do Permalloy-79 em

$$\lambda^{\text{Py-79}} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \approx 5,3 \text{ [nm]} \quad (4.32)$$

Com base neste parâmetro, a discretização do nanomagnet foi feita numa rede cúbica simples e o tamanho da célula micromagnética foi escolhida com lado $a = 5,0 \text{ [nm]}$

De acordo com a referência (127), esse material apresenta uma a estrutura cúbica de face centrada (rede FCC), cujo parâmetro de rede de uma célula convencional é $a_0 = 0,355 \text{ [nm]}$. É importante lembrar que o número de coordenação neste tipo de rede é $z = 12$, ou seja, são 12 o número de primeiros vizinhos, veja a figura (4.2).

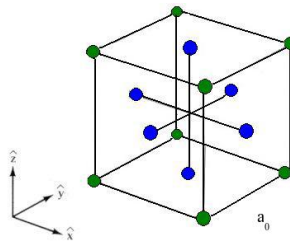


Figura 4.2 – Célula convencional de uma estrutura cúbica de face centrada.

O volume de uma célula convencional é $V_0 = a_0^3$ e uma célula micromagnética de volume $V = a^3$ contém

$$N_{cel} = \frac{V}{V_0} = \left(\frac{a}{a_0} \right)^3 = \left(\frac{5,0}{0,355} \right)^3 \approx 2794 \quad (4.33)$$

células convencionais cujas arestas medem a_0 .

Como cada célula convencional contribui com $(1/8) \times 8 + (1/2) \times 6 = 4$ momentos atômicos⁵, o número total de momentos atômicos numa célula micromagnética é

$$N = 4 \times N_{cel} = 4 \times (2794) = 11.176 \approx 10^4 \quad (4.34)$$

Portanto, cada célula micromagnética contém aproximadamente 10 mil momentos magnéticos atômicos.

4.4 MODELO DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS

Como já mencionado, consideramos um modelo simplificado para simular o efeito de impurezas magnéticas num nanomagnet. Nosso modelo é baseado na variação local da constante de troca. A figura (4.3) mostra uma representação esquemática de um aglomerado de material magnético inserido numa amostra. Ambos os materiais, tanto o hóspede quanto o hospedeiro, são materiais ferromagnéticos macios. Considerando-se apenas as interações entre primeiros vizinhos, podemos distinguir três valores possíveis para a constante de troca, uma para cada tipo de interação, veja a figura (4.3). J caracteriza a constante de troca das interações entre sítios do material hospedeiro. J' descreve a constante de troca das interações do tipo mista, que acoplam um sítio do material hóspede e outro do material hospedeiro. J'' representa a constante de troca das interações entre dois sítios do material hóspede, isto é a constante das interações impureza-impureza.

⁵ 1/8 em cada vértice e 1/2 em cada face.

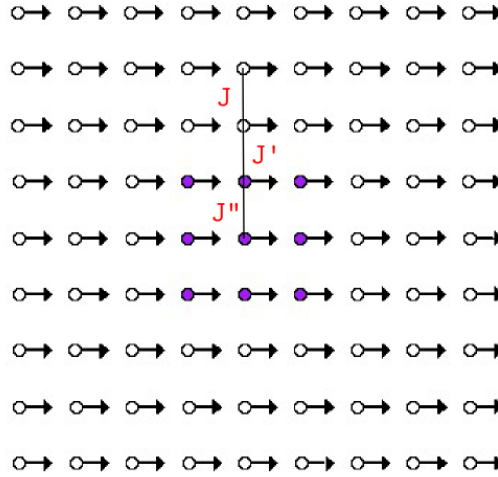


Figura 4.3 – Representação esquemática de um aglomerado de impurezas magnéticas incorporado a um nanomagneto. Por simplicidade, os momentos magnéticos estão distribuídos numa rede quadrada. Os sítios em roxo representam impurezas magnéticas, correspondendo aos sítios do material do hóspede. J caracteriza a constante de troca das interações entre sítios do material hospedeiro. J' descreve a constante de troca das interações do tipo mista, que acoplam um sítio do material hospedeiro e outro do material hospedeiro. J'' representa a constante de troca das interações entre dois sítios do material hóspede, isto é a constante das interações impureza-impureza.

O modelo ferromagnético clássico foi ligeiramente modificado para descrever o nanomagneto contendo impurezas magnéticas, consistindo na seguinte hamiltoniana

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i,j' \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_{j'} - \frac{J''}{2J} \sum_{\langle i',j' \rangle} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_{j'} + \right. \\ \left. + \frac{D}{2J} \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\} \quad (4.35)$$

em que $\hat{m}_k \equiv (m_k^x, m_k^y, m_k^z)$ é o vetor representando o momento magnético localizado no k -ésimo sítio da rede. Os três primeiros termos na equação (4.35) descrevem o acoplamento ferromagnético levando em conta a variação local da constante de troca. O primeiro e o terceiro termos descrevem as interações de troca individuais entre os momentos magnéticos localizados no material hospedeiro e no material hóspede, respectivamente. No segundo termo, as interações de troca na interface entre os dois materiais ferromagnéticos foram modeladas pelo acoplamento ferromagnético. Além disso, assumimos o seguinte vínculo entre as constantes de troca: $J' = \sqrt{J \cdot J''}$. Consequentemente, a constante de troca na interface J' sempre permanece dentro do intervalo definido pelos valores de J e J'' , que as constantes de troca dos

dois materiais ferromagnéticos. Para o caso $J'' < J \Rightarrow J'' < J' < J$, enquanto que para o caso $J'' > J \Rightarrow J < J' < J''$. Os dois últimos termos na equação (4.35) correspondem às versões adimensionais das interações dipolar e Zeeman, respectivamente. A hamiltoniana pode ser rescrita como $H = J \mathcal{H}$, em que $\mathcal{H}$ é a hamiltoniana adimensional correspondente, sendo a energia do sistema medida em unidades de J . Dessa forma, descrevemos dois comportamentos distintos de um aglomerado de impurezas magnéticas sobre a dinâmica da quasipartícula, uma armadilha de aprisionamento é obtida quando se tem uma redução local da constante de troca $J''/J < 1$, enquanto que uma armadilha de bloqueio é obtida sempre que há um aumento local na constante de troca $J''/J > 1$. É importante ressaltar que os efeitos de aprisionar e bloquear tornam-se mais fracos quando $J''/J \rightarrow 1^-$ (tende a um por valores menores do que um) e $J''/J \rightarrow 1^+$ (tende a um por valores maiores do que um) respectivamente.

4.4.1 Simulação micromagnética de um nanomagnet contendo impurezas magnéticas

A Dinâmica do Micromagnetismo é governada pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, cuja versão discreta e adimensional é dada por

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (4.36)$$

em que $\hat{m}_i$ é o versor momento magnético localizado no i -ésimo sítio da rede, $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ é o campo magnético efetivo local, que contém a contribuição individual dos campos de troca, dipolar e do campo magnético externo. Explicitamente, o campo efetivo no i -ésimo sítio da rede é dado por

$$\vec{b}_i = \left\{ \sum_{\langle j \rangle} \hat{m}_j + \frac{J'}{J} \sum_{\langle j' \rangle} \hat{m}_{j'} + \frac{J''}{J} \sum_{\langle j'' \rangle} \hat{m}_{j''} + \frac{D}{J} \sum_j \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \frac{Z}{J} \vec{b}_i^{ext} \right\} \quad (4.37)$$

A evolução temporal dos momentos magnéticos é obtida integrando-se numericamente o sistema de equações diferenciais acopladas dado pela equação (4.36). Para isso, utilizamos o método de Previsão e Correção de 4ª ordem, veja o apêndice B.

5 *RESULTADOS E DISCUSSÕES*

Neste capítulo são apresentados os resultados para dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas. Para o caso do núcleo do vórtice, consideramos um anel de impurezas concêntrico ao nanodisco, enquanto que para o caso da parede de domínio transversal, foi considerado dois aglomerados de impurezas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio retangular. O estudo da dinâmica da quasipartícula confinada por uma distribuição de impurezas magnéticas resultou na publicação de dois artigos (128, 129). Até então os resultados obtidos para a mudança reversível da polaridade da parede de domínio transversal ainda não foram publicados, mas um trabalho foi submetido no final do ano passado.

5.1 NANODISCOS MAGNÉTICOS CONTENDO UM ANEL DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS

O objetivo principal deste estudo foi investigar como a dinâmica do núcleo do vórtice seria influenciada por uma distribuição de impurezas magnéticas. A partir de estudos anteriores, nosso grupo tinha observado que o núcleo do vórtice podia ser atraído ou repelido por uma única impureza magnética. Também já tinha sido demonstrado que a frequência girotrópica era ligeiramente modificada sempre que o núcleo do vórtice descrevia sua trajetória nas proximidades de uma impureza magnética. Além disso, algumas simulações tinham revelado que a reversão da polaridade do núcleo do vórtice podia ser mediada pela interação entre o núcleo do vórtice e uma impureza do tipo atrativa. Neste trabalho, foi proposto uma distribuição circular de impurezas como mostrado na figura (5.1). Com uma distribuição radialmente simétrica, o

núcleo do vórtice pode sofrer sucessivas interações com as impurezas durante a sua trajetória girotrópica. Dessa forma, era esperado que a frequência girotrópica fosse modificada de uma forma mais eficaz.

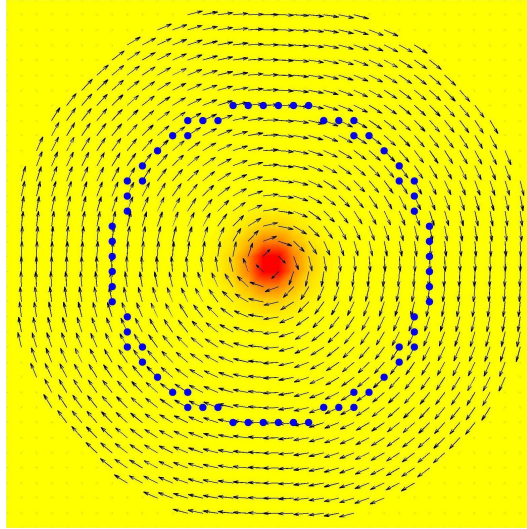


Figura 5.1 – Representação esquemática de um nanodisco modificado, contendo uma distribuição circular de impurezas. Os círculos em azul representam as impurezas magnéticas e o modo como elas foram distribuídas define o anel de impurezas magnéticas, que é concêntrico ao disco. Figura retirada da referência (128).

O conjunto de amostras era constituído de nanodiscos com a mesma razão de aspecto L/d , mas diferindo em relação aos parâmetros da distribuição de impurezas, ou seja, a variação local da constante de troca ao longo do anel J'/J e o diâmetro do anel de impurezas d' . O nanodisco correspondente sem o anel foi tomado como nanodisco de referência, com diâmetro $d = 170$ [nm] e espessura $L = 10$ [nm].

A fim de perturbar o estado de vórtice, utilizamos um pulso de campo magnético oscilante, aplicado no plano do disco e com duração de um período temporal,

$$\vec{B}_i^{ext} = \hat{y} B \sin(2\pi f t) \quad (5.1)$$

Todas as simulações foram realizadas usando a frequência do campo no valor $f = 0,5$ [GHz], isso equivale a um pulso de duração $\Delta t = 2$ [ns], veja a figura (5.2).

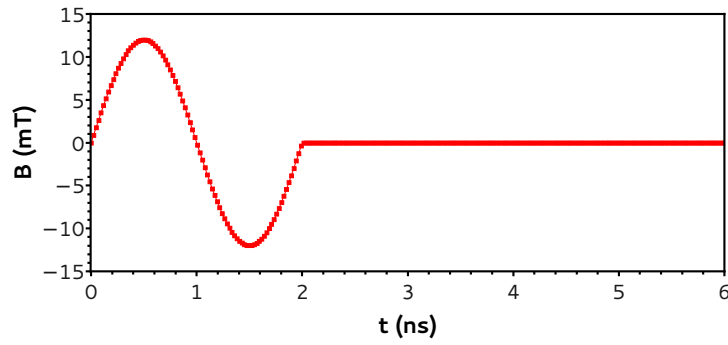


Figura 5.2 – Perfil do pulso de campo magnético usado para perturbar o estado de vórtice.

5.1.1 Modulação da frequência girotrópica

Para excitar o modo girotrópico, usamos uma pequena amplitude de excitação, $B = 3$ [mT], assim a trajetória girotrópica é descrita dentro do anel de impurezas. Determinamos a frequência girotrópica dos nanodiscos e observamos que ela depende dos parâmetros do anel. A figura (5.3) mostra a dependência da frequência girotrópica com os parâmetros do anel de impurezas magnéticas. Neste gráfico, no eixo-x está representado o diâmetro do anel e no eixo-y a frequência girotrópica. A reta horizontal tracejada corresponde ao valor numérico da frequência do nanodisco sem o anel; a nossa referência. É possível observar que se ao longo do anel há uma redução local na constante de troca (veja curvas roxa e vermelha) então a frequência girotrópica é sempre menor do que a do nanodisco de referência. Por outro lado, um aumento local na constante de troca faz com que a frequência seja sempre maior do que aquela observada no nanodisco sem o anel (veja as curvas azul e verde). A variação da frequência girotrópica é mais pronunciada quando o diâmetro do anel diminui, pois a interação entre o núcleo do vórtice e impurezas magnéticas é de curto-alcance. Para grandes valores do diâmetro, essa interação é fraca, e assim a frequência girotrópica tende para aquela do nanodisco sem o anel; um resultado esperado.

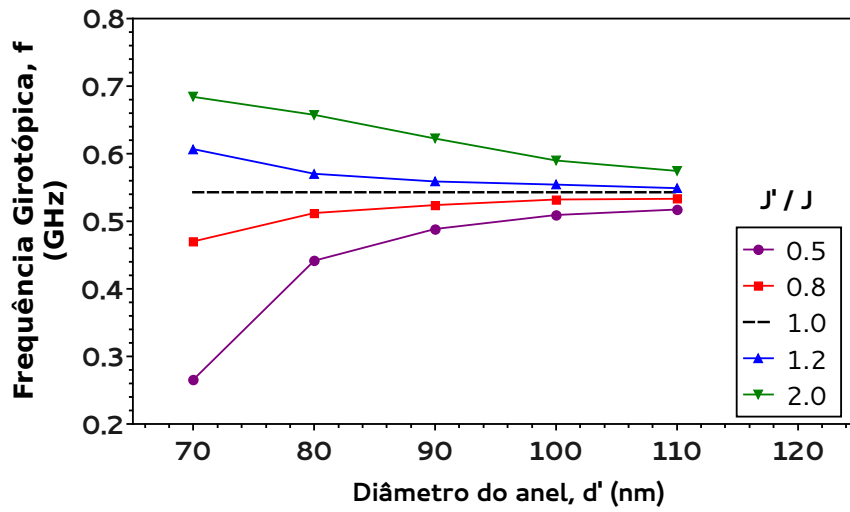


Figura 5.3 – Dependência da frequência girotrópica com os parâmetros do anel de impurezas magnéticas. Gráfico da frequência girotrópica f em função do diâmetro do anel de impurezas magnéticas d' para alguns valores da variação local da constante de troca J'/J . Figura adaptada da referência (128).

Esses resultados mostram que, o uso de um anel de impurezas permite modular a frequência girotrópica. O efeito de um anel atrativo, ($J'/J < 1$) é diminuir a frequência, enquanto que um anel repulsivo, ($J'/J > 1$) é aumentá-la. Sabe-se que a frequência girotrópica depende principalmente da razão de aspecto do disco, entretanto, um ajuste fino nessa frequência pode ser conseguido através da inserção de impurezas magnéticas, distribuídas simetricamente ao redor do centro do disco. Uma explicação qualitativa para a variação da frequência girotrópica devido a presença do anel de impurezas magnéticas pode ser dada em termos da equação de Thiele para nanodiscos, veja o apêndice C.

O anel de impurezas pode também ser usado para inibir o modo girotrópico, isso ocorre para o caso em que o anel é do tipo repulsivo e os efeitos de repulsão são muito intensos.

5.1.2 Controle da polaridade do núcleo do vórtice

Aumentando a amplitude de excitação, notou-se que a inversão da polaridade pode ser obtida a partir da interação entre o núcleo do vórtice e uma impureza magnética, caracterizada por uma redução local na constante de troca. Na figura (5.4) temos a resposta da polaridade do núcleo do vórtice desde o instante em que o pulso de campo é aplicado. Para uma amplitude de

excitação $B = 10$ [mT] e uma redução local na constante de troca $J'/J = 0,5$ ao longo do anel, o nanodisco com anel de diâmetro $d' = 90$ [nm] sofreu uma única inversão da polaridade. Por outro, o nanodisco com anel de diâmetro menor, $d' = 70$ [nm], apresentou duas reversões da polaridade.

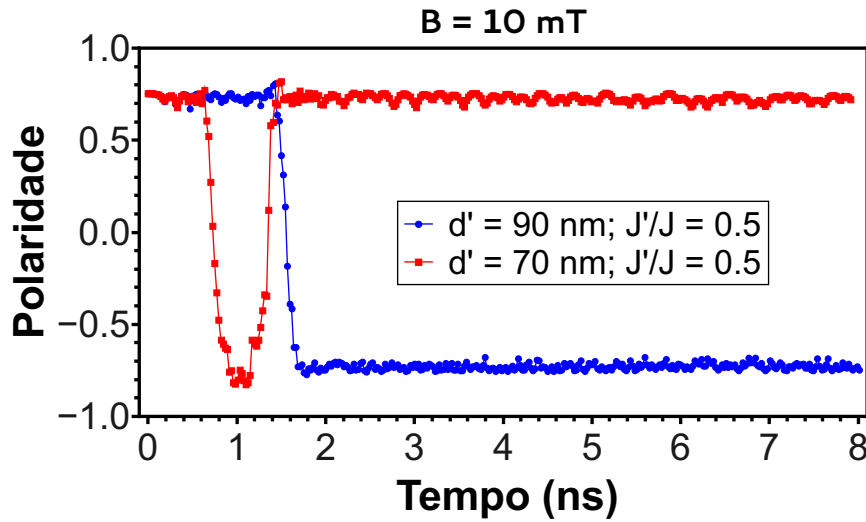


Figura 5.4 – Resposta da polaridade desde o instante em que o pulso de campo magnético foi aplicado. Gráfico da polaridade em função do tempo. A inversão da polaridade ocorre devido a interação entre o núcleo do vórtice e uma impureza magnética caracterizada por uma redução local na constante de troca, $J'/J < 1$.

Na figura (5.5) vemos diagramas de eventos para a resposta de um dado nanodisco após a aplicação do pulso de campo. Um conjunto de 30 nanodiscos foi submetido a diferentes amplitudes de excitação $B = 20, 15, 12$ e 10 [mT]. Cada ponto no plano, $d' - J'/J$ corresponde a um nanodisco contendo um anel de impurezas, caracterizado por esse par de parâmetros do anel. Triângulos em vermelho representam combinações de parâmetros em que a polaridade pôde ser controlada e círculos em preto incluíram os eventos em que não houve reversão da polaridade ou ela não pôde ser invertida de uma forma controlável.

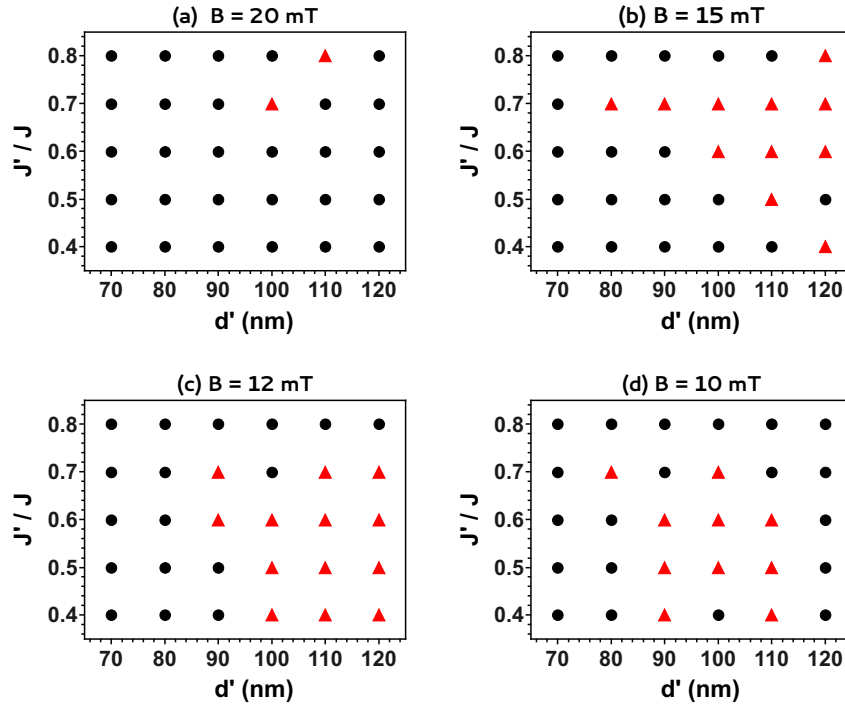


Figura 5.5 – Diagrama do controle da polaridade do núcleo do vórtice em nanodiscos contendo um anel de impurezas magnéticas. Triângulos em vermelho representam combinações de parâmetros em que a polaridade pôde ser controlada, ou seja, após a aplicação do pulso, ocorreu uma única inversão da polaridade. Círculos em preto incluem os seguintes eventos: inversões múltiplas, nenhuma inversão ou a captura do núcleo do vórtice. Figura adaptada da referência (128).

O controle do mecanismo de reversão da polaridade usando um anel atrativo depende dos parâmetros do anel e também da amplitude de excitação. Para uma grande amplitude de excitação, $B = 20$ [mT], o evento predominante é o de inversões múltiplas e, assim, a polaridade não pode ser invertida de uma forma controlável. Para amplitudes intermediárias, $B = 15, 10$ e 12 [mT], a região de inversões múltiplas está concentrada principalmente na região de pequenos diâmetros do anel. Nenhuma inversão é observada quando a interação atrativa é muito fraca, ou seja, quando a redução local na constante de troca se aproxima da unidade ($J'/J \rightarrow 1$). No outro extremo, para uma interação muito forte, ou seja, quando a redução local na constante de troca se aproxima de zero ($J'/J \rightarrow 0$), a polaridade não pode ser controlada porque o núcleo do vórtice fica preso em algum ponto do anel, depois de uma ou mais interações.

Basicamente, o mecanismo de controle da polaridade usando um anel de impurezas deve envolver uma única interação entre o núcleo do vórtice e o anel. O campo externo deve ser forte o suficiente para disponibilizar energia cinética para o núcleo do vórtice, tal que ele não seja capturado. Além de atrair o núcleo do vórtice, uma impureza magnética caracterizada por uma redução local na constante de troca apresenta uma tendência natural de diminuir a sua magnetização fora do plano. Como resultado da interação vórtice-impureza, o núcleo do vórtice pode ter a sua polaridade invertida, desde que ele não seja capturado pela impureza.

5.2 NANOFIOS MAGNÉTICOS CONTENDO DOIS AGLOMERADOS DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS

O estudo da dinâmica de uma parede de domínio requer que certos pontos críticos sejam estabelecidos ao longo do nanofio, nestas posições que são pré-definidos, a parede de domínio pode parar. A estabilidade da parede de domínio geralmente é obtida por entalhes feitos na borda do nanofio. Neste caso, é necessário uma modificação local da geometria do nanofio. Como uma alternativa, ao invés de modificar a forma geométrica, pode-se promover uma modificação local das propriedades magnéticas do nanofio. Num estudo anterior o grupo mostrou que a parede de domínio transversal podia ser atraída ou repelida por uma impureza magnética. Também foi observado que a atração e repulsão eram maximizados quando a impureza encontrava-se numa das bordas do nanofio. Em particular, as posições de equilíbrio da parede, dependem da posição da impureza em relação ao eixo da largura do nanofio, isso ocorre porque a parede de domínio é assimétrica em relação a este eixo, sendo mais estreita numa borda do que na outra.

5.2.1 Controle da posição da parede de domínio transversal

Neste estudo queríamos investigar a possibilidade de usar impurezas magnéticas para controlar a posição da parede de domínio transversal ao longo de um nanofio retangular. Para esse propósito foi considerado um par de impurezas magnéticas, idênticas e equidistantes do

eixo da largura do nanofio, veja por exemplo as figuras (5.6) e (5.7).

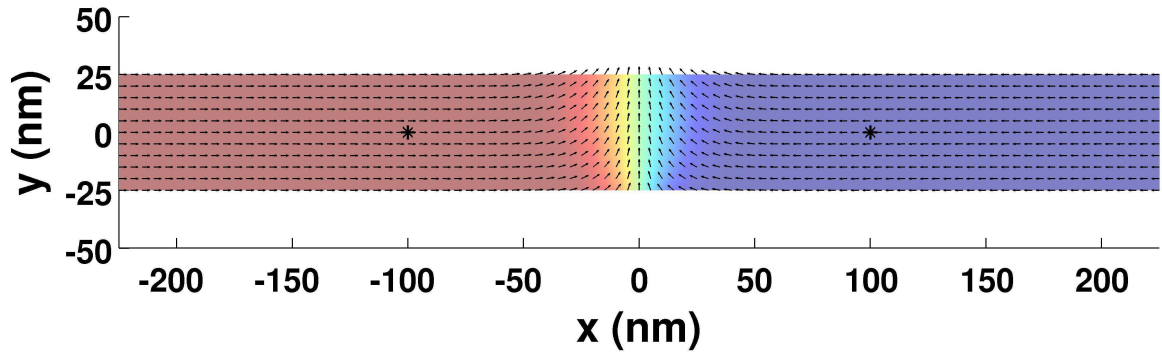


Figura 5.6 – Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, duas impurezas magnéticas, idênticas e equidistantes do eixo da largura do nanofio. Os pontos marcados com (*) representam impurezas magnéticas; elas podem atuar como sítios de aprisionamento ou sítios de bloqueio. Figura adaptada da referência (129).

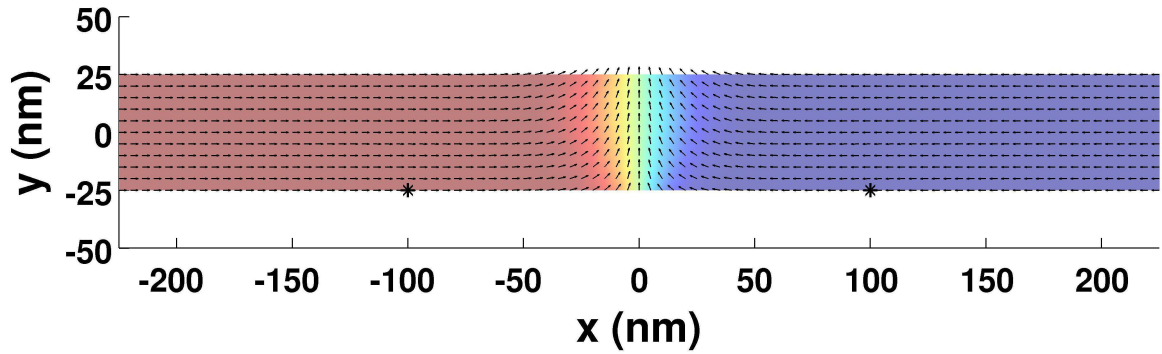


Figura 5.7 – Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, duas impurezas magnéticas, idênticas e equidistantes do eixo da largura do nanofio. Os pontos marcados com (*) representam impurezas magnéticas; elas podem atuar como sítios de aprisionamento ou sítios de bloqueio. Figura adaptada da referência (129).

O conjunto de amostras era constituído de nanofios retangulares idênticos, isto é, com o mesmo comprimento $L = 1 \text{ } [\mu\text{m}]$, largura $d = 50 \text{ } [\text{nm}]$ e espessura $t = 5 \text{ } [\text{nm}]$, mas diferindo em relação aos parâmetros da distribuição de impurezas, ou seja, a variação local da constante de troca J'/J e a sua posição $(\pm x_{imp}, y_{imp})$. A distância relativa entre as impurezas não foi variada, isso significa que $x_{imp} = 100 \text{ } [\text{nm}]$ foi mantido constante. Para a localização do par de impurezas distinguimos duas situações. Numa delas as impurezas estavam localizadas sobre o eixo do comprimento do fio, $y_{imp} = 0$, veja a figura (5.6). Já na outra, elas encontravam-se sobre uma das bordas do nanofio, $y_{imp} = -25 \text{ } [\text{nm}]$, em particular naquela em que os momentos

magnéticos da parede estão entrando no nanofio, ou seja, a borda que contém o polo sul da parede, veja a figura (5.7). Esta situação particular foi considerada porque nós sabíamos que os efeitos de atração e repulsão seriam maximizados para esta situação, que envolve a polaridade da parede e a posição da impureza em relação ao eixo da largura do nanofio. Isso ocorre porque a parede de domínio é assimétrica em relação ao eixo da largura, sendo mais estreita numa borda do que na outra.

A fim de obter o estado remanente dos nanofios, escolheu-se como condição inicial o sistema com uma única parede de domínio transversal localizada exatamente no meio das duas impurezas, como mostrado nas figuras (5.6) e (5.7). A integração da equação de movimento (equação de L.L.G) sem campo magnético externo conduz o sistema para uma configuração de mínima energia e nós assumimos que o estado remanente do nanofio foi alcançado. Devido ao arranjo de impurezas ser simétrico em relação ao eixo da largura do nanofio, a parede de domínio permanece na sua posição inicial; o centro geométrico do fio.

Para mover a parede de domínio, um pulso de campo magnético uniforme foi aplicado na direção do comprimento do nanofio,

$$\vec{B}_i^{ext} = B \hat{x} \quad (5.2)$$

Em todas as simulações que se seguem, a duração do pulso utilizado foi $\Delta t = 0,5$ ns, veja a figura (5.8).

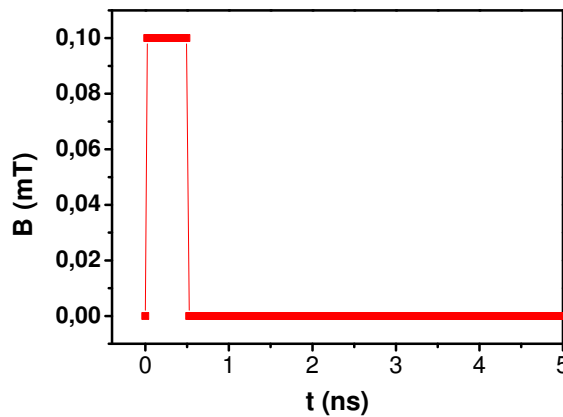
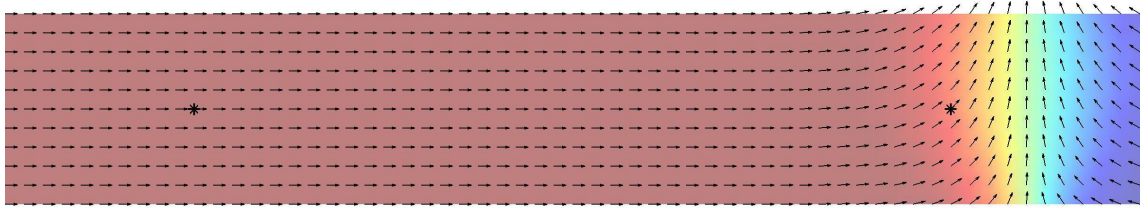
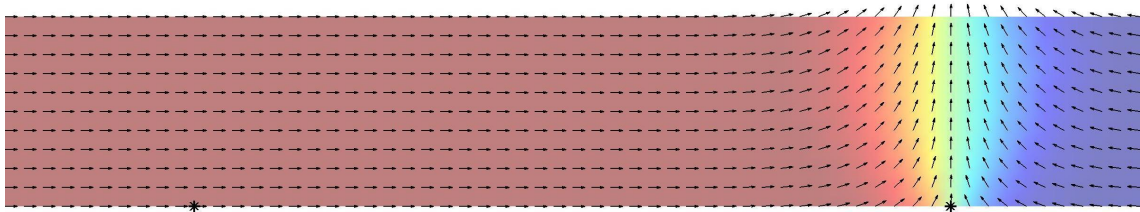


Figura 5.8 – Perfil do pulso de campo magnético usado para mover a parede de domínio transversal.

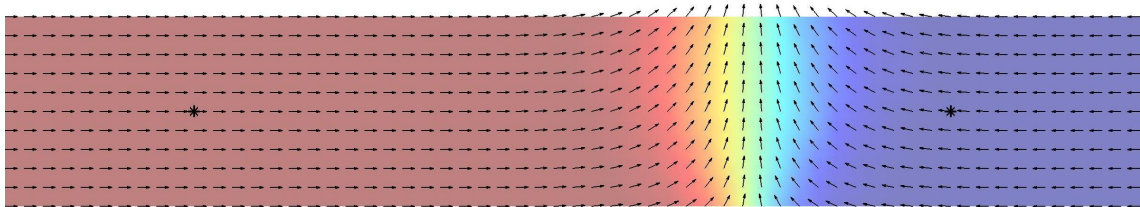
Para estudar os efeitos de aprisionamento e de bloqueio, um pulso de campo magnético muito fraco foi aplicado a fim de mover a parede rumo à impureza da direita; a parede encontrou uma nova posição de equilíbrio nas proximidades da impureza. As configurações de equilíbrio assim obtidas foram salvas e usadas como configurações iniciais em outras simulações, veja a figura (5.9).



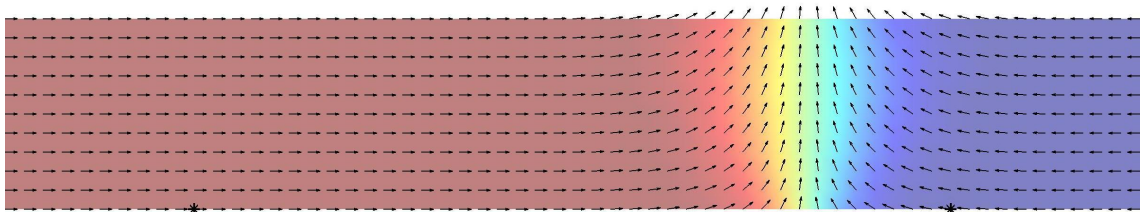
(a) $J'/J = 0,5$; $y_{imp} = 0$



(b) $J'/J = 0,5$; $y_{imp} = -25 \text{ nm}$



(c) $J'/J = 1,5$; $y_{imp} = 0$



(d) $J'/J = 1,5$; $y_{imp} = -25 \text{ nm}$

Figura 5.9 – Algumas posições de equilíbrio do sistema que foram usadas como configurações iniciais. Nas figuras (a) e (b) as impurezas são caracterizadas por $J'/J < 1$ assim a parede encontra-se aprisionada pela impureza da direita. Nas figuras (c) e (d) as impurezas são caracterizadas por $J'/J > 1$ assim a parede encontra-se bloqueada pela impureza da direita.

A fim de fazer com que a parede de domínio escapasse do poço de potencial criado pela impureza da direita, como mostrado nas figuras (5.9a) e (5.9b), um pulso de campo magnético foi aplicado em ambos os sentidos do eixo do comprimento do nanofio. A figura (5.10) contém diagramas de eventos para o estado final do sistema, ou seja, a resposta da parede depois da aplicação do campo. Nas figuras (a) e (c) o par de impurezas atrativas encontravam-se sobre o eixo do comprimento do nanofio. Já nas figuras (b) e (d) as mesmas impurezas estavam localizadas sobre a borda inferior do nanofio. Nas Figuras (a) e (b) o campo foi aplicado no sentido negativos do eixo-x, assim a parede tende a se mover para a esquerda. Nas figuras (c) e (d) o campo foi aplicado no sentido contrário, ou seja, a parede tende a se mover para a direita. Os pontos sobre qualquer reta horizontal representam o mesmo nanofio, que foi submetido a diferentes amplitudes de excitação. Esses pontos são representados por símbolos e correspondem aos eventos que foram observados; estes eventos são descritos na legenda da figura (5.10).

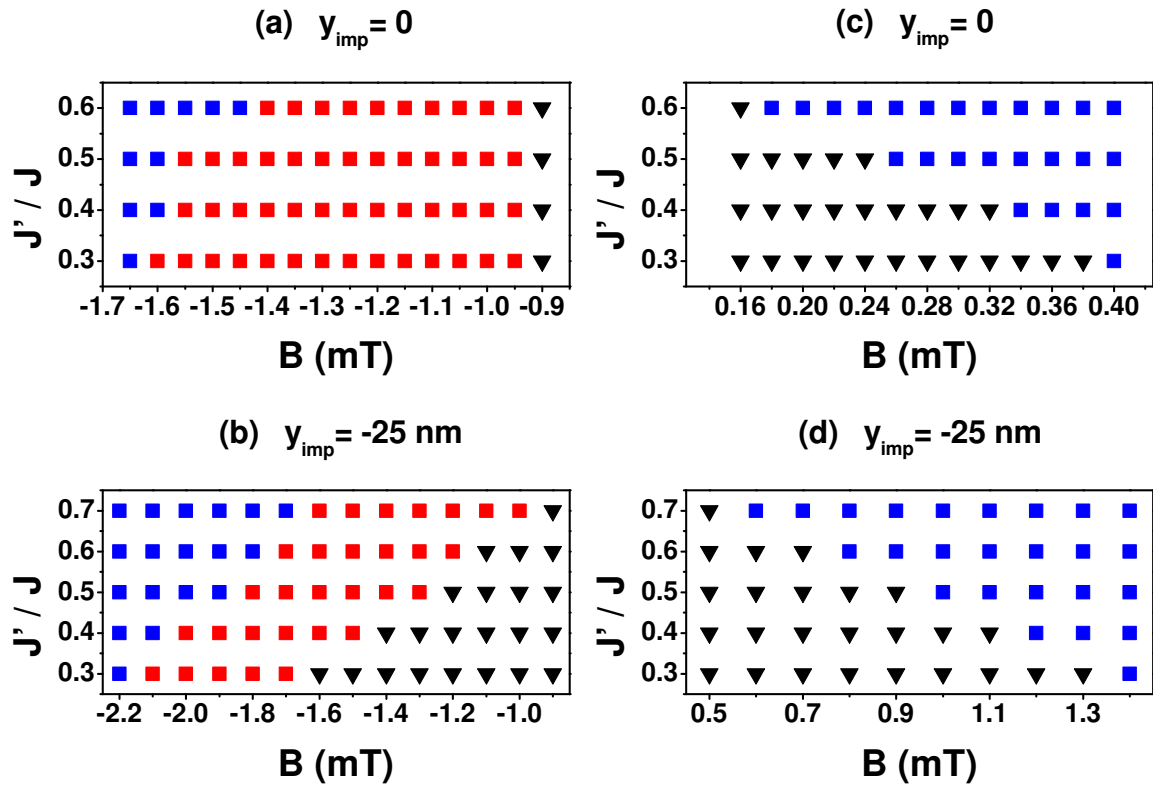


Figura 5.10 – Diagrama de eventos para o controle da posição da parede de domínio transversal usando um par de impurezas magnéticas atuando como poços de potencial. Triângulos em preto representam combinações de parâmetros em que a parede de domínio permaneceu presa à impureza da direita. Quadrados em vermelho correspondem às situações em que o movimento da parede pôde ser controlado, ou seja, após a aplicação do pulso, a parede foi desprendida da impureza da direita, a parede então se moveu rumo a impureza da esquerda e em seguida foi aprisionada. Quadrados em azul representam eventos em que a parede foi desprendida da impureza da direita, mas em seguida ela foi expelida por uma das extremidades do nanofio. Não há uma região de quadrados em vermelho nas figuras (c) e (d) porque não há uma terceira impureza mais à direita, que seria capaz de prender a parede. Figura adaptada da referência (129).

Analisando a figura (5.10) pode-se notar que existe um campo crítico, que é o valor mínimo do campo necessário para que a parede escape da armadilha de aprisionamento; uma impureza magnética caracterizada por $J'/J < 1$ representa um poço de potencial para a parede. Abaixo desse campo crítico a parede permanece presa à impureza. A intensidade deste campo depende não apenas da razão J'/J mas também da sua localização. Nota-se que os efeitos de aprisionamento são intensificados quando as impurezas se encontram na borda do nanofio, porque as amplitudes de excitação necessárias para desprender a parede da impureza são bem maiores do que aquelas em que o par de impurezas se encontra sobre o eixo do nanofio. Essa observação concorda com os resultados obtidos num outro trabalho do grupo (99).

Os diagramas da figura (5.11) são semelhantes aos da figura (5.10), exceto que aqui temos um par de armadilhas de bloqueio. A fim de fazer com que a parede de domínio superasse a barreira de potencial criado pela impureza da direita, figuras (5.9c) e (5.9d), um pulso de campo magnético foi aplicado para mover para a direita. Campo também foi aplicado no sentido contrário para que a parede pudesse ser bloqueada pela impureza da esquerda. Analisando as figuras (5.11c) e (5.11d) pode-se notar que existe um campo crítico, que é o valor mínimo do campo necessário para que a parede supere da armadilha de bloqueio; uma impureza magnética caracterizada por $J'/J > 1$ representa um barreira de potencial para a parede. Abaixo desse campo crítico a parede permanece bloqueada pela impureza. Nota-se que os efeitos de bloqueio são intensificados quando as impurezas se encontram na borda do nanofio, porque as amplitudes de excitação necessárias para desbloquear a parede da impureza são maiores do que aquelas em que o par de impurezas se encontra sobre o eixo do nanofio.

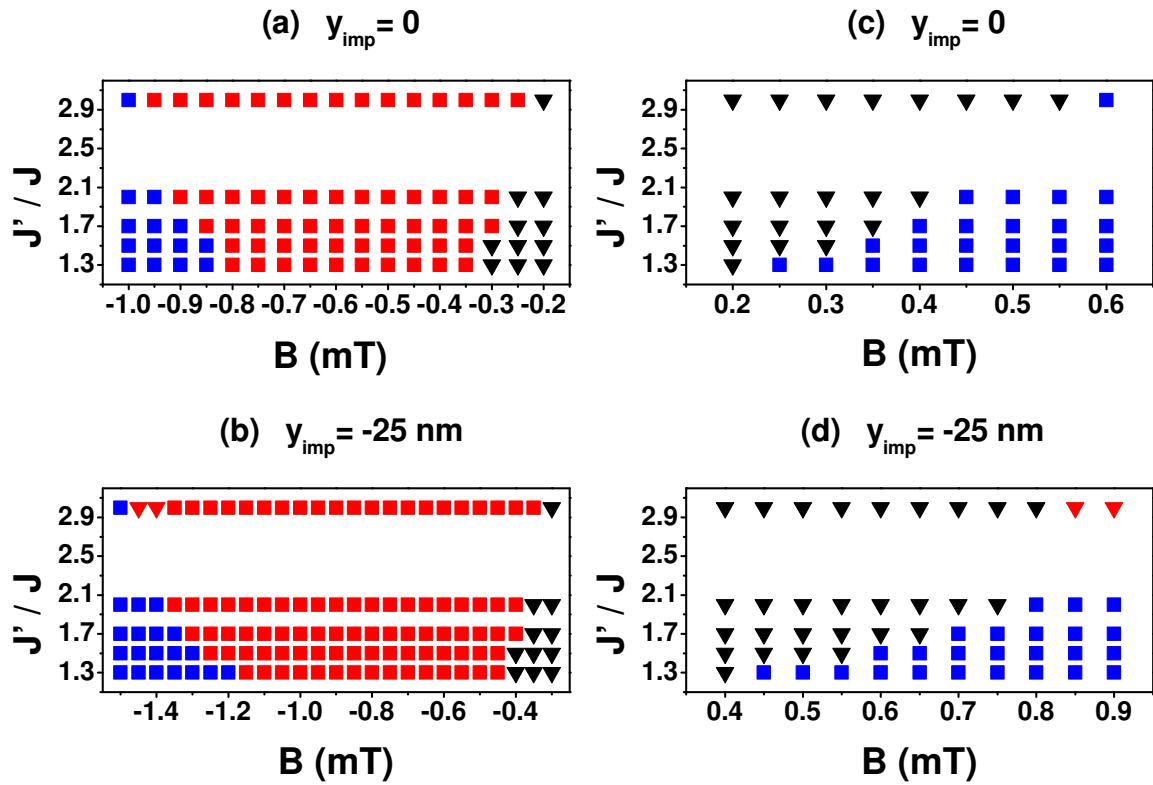


Figura 5.11 – Diagrama de eventos para o controle da posição da parede de domínio transversal usando um par de impurezas magnéticas atuando como barreiras de potencial. Triângulos em preto correspondem a combinações de parâmetros em que a parede permaneceu na sua posição de equilíbrio, nas proximidades da impureza da direita. Quadrados em vermelho correspondem às situações em que o movimento da parede pôde ser controlado, ou seja, após a aplicação do pulso, a parede se moveu rumo a impureza da esquerda e em seguida foi bloqueada. Quadrados em azul representam eventos em que a parede superou a barreira criada por uma impureza, mas em seguida ela foi expelida por uma das extremidades do nanofio. Não há uma região de quadrados em vermelho nas figuras (c) e (d) porque não há uma terceira impureza mais à direita, que seria capaz de bloquear a parede. Triângulos em vermelho nas figuras (b) e (d) representam o evento em que a parede foi rebatida pela armadilha de bloqueio; essa situação particular ocorre sempre que o pulso de campo e os efeitos de repulsão são muito intensos. Figura adaptada da referência (129).

Nos diagramas das figuras (5.10) e (5.11), a região mais interessante é aquela em vermelho, pois a posição da parede pode ser controlada. Assim, com uma amplitude de excitação apropriada é possível deslocar a parede de uma armadilha até a outra, pela simples inversão do sentido do campo aplicado. Na verdade, controlar a posição da parede é equivalente a controlar o tamanho relativo dos domínios magnéticos, ou seja, a componente da magnetização ao longo do eixo do comprimento do nanofio, em nosso caso, M_x .

5.2.2 Controle da polaridade da parede de domínio transversal

Neste outro estudo, queríamos investigar se a polaridade da parede de domínio transversal num nanofio retangular podia ser invertida de uma forma controlável. Depois que ocorre a reversão da polaridade, a parede com a polaridade invertida surge com uma certa velocidade, ou seja, ela apresenta uma certa energia cinética. A distância que a parede percorre até parar é muito grande se o material apresenta um fraco amortecimento (um valor pequeno para parâmetro de “*damping*”) como ocorre no caso do nanofio de Permalloy. Para um nanofio não muito comprido, a parede com a polaridade invertida acaba sendo expelida por uma das extremidade do fio antes que ela pare. Assim, torna-se necessária uma estabilização da posição da parede depois da ocorrência da inversão da polaridade.

Foi observado que uma única impureza não era capaz de parar a parede que surgia da criação e aniquilação de um antivórtice. Para fazer com que a parede com a polaridade invertida parasse, foi preciso aumentar o tamanho do aglomerado de impurezas magnéticas, isso intensifica os efeitos de aprisionamento e bloqueio das armadilhas.

Para o estudo da mudança reversível da polaridade da parede de domínio transversal, foi considerado um nanofio contendo dois aglomerados de impurezas magnéticas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio, como mostrado na figura (5.12).

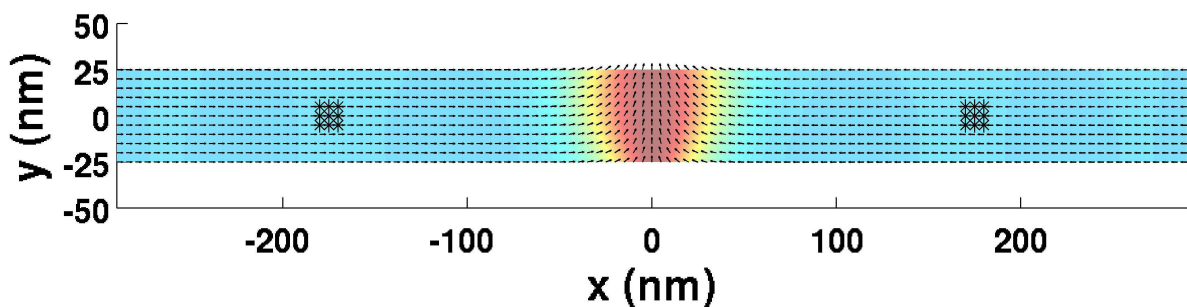
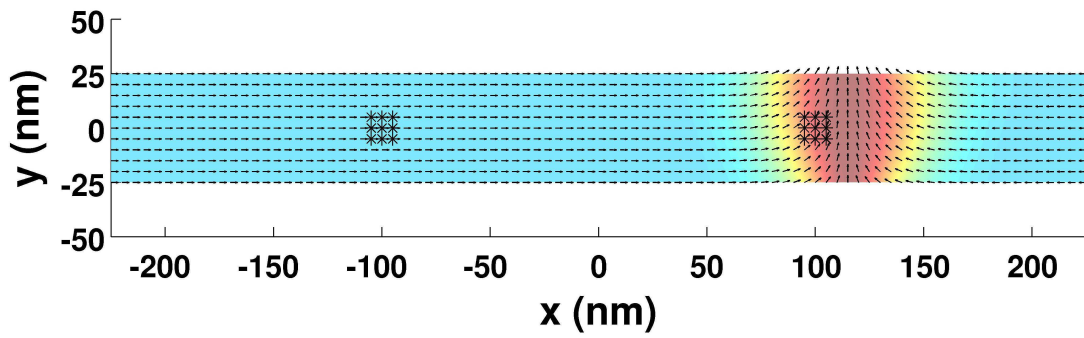
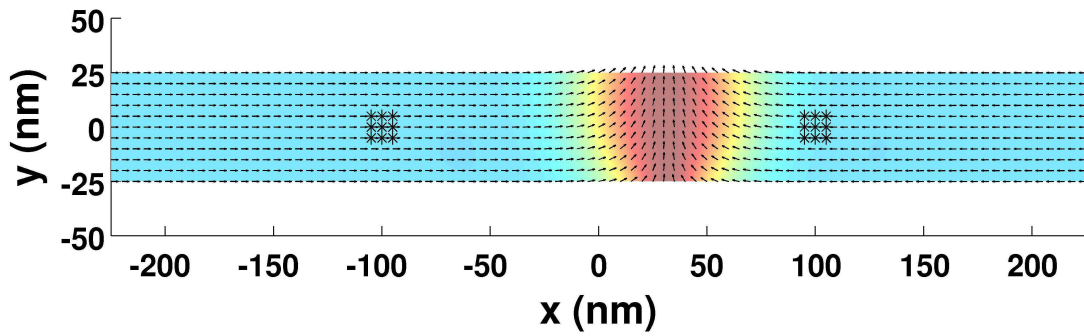


Figura 5.12 – Representação esquemática de um nanofio retangular contendo arranjo de impurezas linearmente espaçadas, ou seja, dois aglomerados de impurezas magnéticas, idênticos e equidistantes do eixo da largura do nanofio. O par de aglomerados de impurezas pode atuar como uma armadilha de aprisionamento ou como uma armadilha de bloqueio.

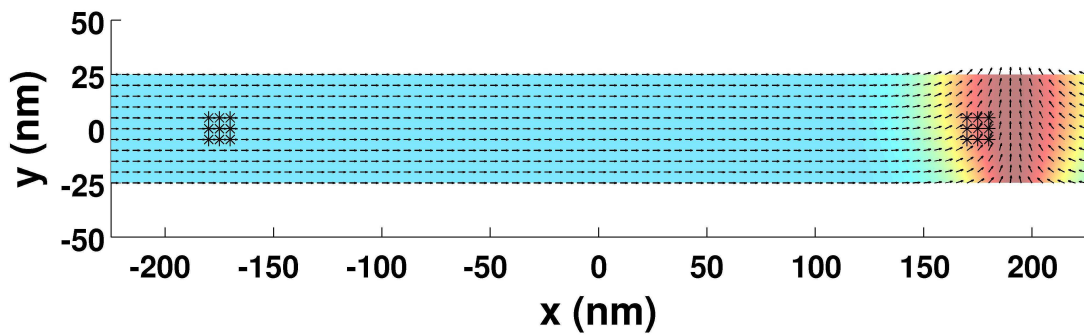
A metodologia usada no estudo do controle da polaridade da parede é muito parecida com aquela que foi empregada no estudo do controle da posição. As simulações foram realizadas assumindo o Permalloy-79 como o material hospedeiro nos nanofios retangulares. O sistema de coordenadas adotado é mostrado na figura (5.12). Um conjunto de amostras foi escolhido de forma que os nanofios retangulares fossem idênticos, isto é, com o mesmo comprimento $L = 1 [\mu\text{m}]$, largura $d = 50 [\text{nm}]$ e espessura $t = 5 [\text{nm}]$, porém diferindo em relação aos parâmetros da distribuição de impurezas, ou seja, a variação local da constante de troca J''/J e a distância relativa entre os aglomerados D_c . Para a distância relativa entre os aglomerados de impurezas magnéticas, D_c , foi considerado os seguintes valores 200, 250, 300 e 350 [nm]. Além disso, também foi considerado uma certa variedade de candidatos possíveis para atuar como material hóspede (aglomerado de impurezas), sendo atribuído 7 valores diferentes para a razão entre as constantes de troca. Para uma redução local na constante de troca foi assumido para J''/J os seguintes valores 0,25; 0,50 e 0,75. Enquanto que para um aumento local na constante de troca foi utilizado os seguintes valores 1,25; 1,50; 1,75 e 2,00. A condição inicial do sistema foi escolhida com a parede localizada na vizinhança do aglomerado da direita e a polaridade inicial da parede foi configurada para estar apontando para cima (em relação ao eixo da largura do nanofio), veja a figura (5.13). Para obter as configurações iniciais de equilíbrio, tais como aquelas mostradas na figura (5.13), basta aplicar um pulso de campo magnético muito fraco ao longo do eixo mais comprido do nanofio. Nestas condições, a parede é deslocada do centro geométrico do nanofio e ela encontra uma nova posição de equilíbrio ao redor do aglomerado de impurezas magnéticas. Lembra-se que a parede pode ser tanto aprisionada por um poço de potencial ($J'/J < 1$) quanto bloqueada por uma barreira de potencial ($J'/J > 1$).



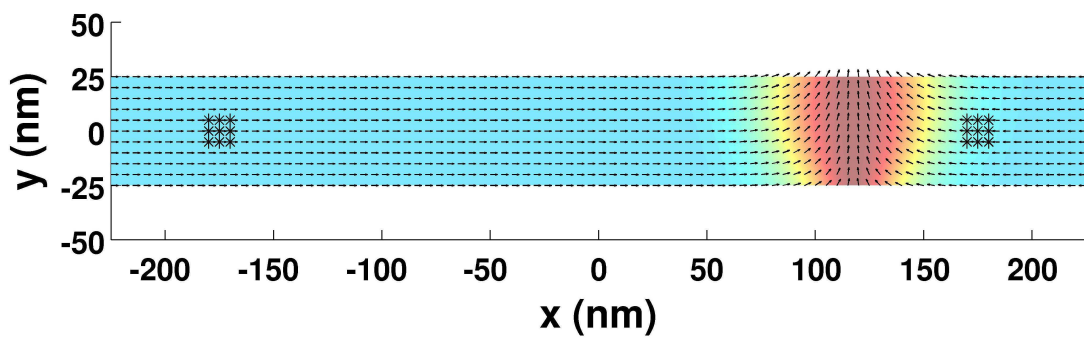
(a) $J''/J = 0,50$; $D_c = 200$ nm



(b) $J''/J = 1,50$; $D_c = 200$ nm



(c) $J''/J = 0,50$; $D_c = 350$ nm



(d) $J''/J = 1,50$; $D_c = 350$ nm

Figura 5.13 – Algumas posições de equilíbrio do sistema que foram usadas como configurações iniciais. Nas figuras (a) e (c) os aglomerados de impurezas são caracterizados por $J''/J < 1$, assim, a parede encontra-se aprisionada pelo aglomerado da direita. Nas figuras (b) e (d) os aglomerados de impurezas são caracterizados por $J''/J > 1$, dessa forma, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da direita.

A fim de excitar a parede de domínio e assim promover a inversão da sua polaridade, um pulso de campo magnético uniforme foi aplicado na direção do comprimento do nanofio,

$$\vec{B}_i^{ext} = B \hat{x} \quad (5.3)$$

Em todas as simulações que se seguem, a duração do pulso utilizado foi $\Delta t = 1,0$ ns, veja a figura (5.14). O sentido do campo magnético sempre foi configurado para apontar do aglomerado em que a parede se encontrava (aprisionada ou bloqueada) para o outro; dessa forma, devido à escolha da condição inicial, o pulso foi aplicado no sentido negativo do eixo x, se necessário reveja a figura (5.13).

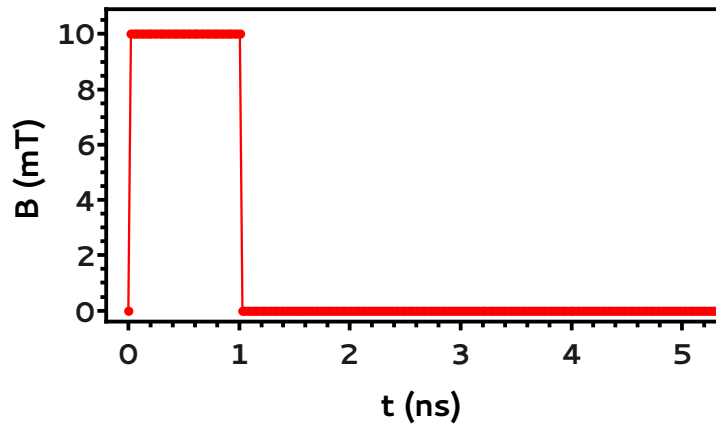


Figura 5.14 – Perfil do pulso de campo magnético usado para excitar a mudança da polaridade da parede de domínio transversal.

O mecanismo de reversão da polaridade é governado principalmente pelos parâmetros de um agente externo, no nosso caso, a amplitude e a duração do pulso de campo magnético. O intervalo de tempo necessário para a reversão da polaridade da parede de domínio transversal é da ordem de alguns nanossegundos, assim pulsos com essa duração são requeridos para a inversão da polaridade. Foi justamente por esse motivo que a duração do pulso utilizada em nossas simulações foi de 1 [ns]. Para pequenas amplitudes de excitação observou-se que a parede de domínio se movia sem mudar a sua polaridade. Para as dimensões do nanofio que foi considerado, observou-se que havia uma amplitude de excitação crítica, cerca de 7,5 [mT], sendo essa amplitude o valor mínimo do campo necessário para que ocorresse a nucleação de um antivórtice. Para amplitudes de excitação desde 7,5 até 17,0 [mT] o antivórtice era

nucleado perto de uma das extremidades do nanofio e a parede com a polaridade invertida era expelida pela extremidade oposta; assim, após a aniquilação do antivórtice, a parede recém-nascida se movia no sentido oposto àquele provido pelo pulso de campo durante a propagação da parede inicial. Devido a seu grande momento linear, a parede com a polaridade invertida passa livremente através das duas armadilhas (aglomerados de impurezas) e assim o sistema se torna um monodomínio. Entretanto, foi encontrado um intervalo crítico, ao redor de 18,0 [mT], em que a reversão da polaridade ocorria de forma abrupta, sendo o antivórtice nucleado dentro da região delimitada pelos dois aglomerados de impurezas (armadilhas). Nestas situações, a parede recém-nascida emergia com um momento linear muito pequeno e a parede podia ser estabilizada ao redor de uma das armadilhas, devido à interação entre a parede de domínio transversal e o aglomerado de impurezas magnéticas.

Na figura (5.15), vemos diagramas de eventos para o estado final de todo o conjunto de amostras, em outras palavras, a resposta dos sistemas mediante a aplicação do pulso de campo magnético. Nas figuras de (a) até (d), a distância relativa entre os aglomerados aumenta de 50 em 50 nm. No eixo-y está representada a variação local da constante de troca e no eixo-x a amplitude do pulso de campo. Os pontos sobre qualquer reta horizontal representam o mesmo nanofio, que foi submetido a diferentes amplitudes de excitação. Esses pontos são representados por símbolos e correspondem aos eventos que são descritos na legenda da figura (5.15). Em resposta ao pulso de campo magnético aplicado, a parede de domínio transversal se move no sentido negativo do eixo-x e sofre um colapso de Walker (71). Em geral, é muito difícil estabilizar a parede de domínio que surge da nucleação e da subsequente aniquilação de um antivórtice. Uma amplitude de excitação sendo fraca ou forte faz com que o sistema se torne um monodomínio, uma vez que a parede é expelida por uma das extremidades do fio; esse evento são representados por quadrados na figura (5.15). Embora a polaridade da parede tenha sido invertida, não foi possível controlar a sua posição, assim a polaridade não pode ser mudada de uma forma reversível. Entretanto, houve amplitudes de excitação apropriadas em a polaridade da parede foi invertida e o sistema conservou a sua configuração com dois domínios magnéticos, assim a posição da parede pôde ser controlada depois de uma única reversão da

polaridade; triângulos na figura (5.15). Uma vez que há duas possibilidades para o final da posição da parede, o intercâmbio da polaridade pode ser acompanhado ou não do intercâmbio da posição. Triângulos em vermelho representam eventos em que a parede retornou à sua posição inicial com a polaridade invertida. Neste caso, houve apenas o intercâmbio da polaridade. Por outro lado, triângulos em azul indicam eventos em que a parede com a polaridade invertida permaneceu na posição oposta à sua posição inicial. Em outras palavras, houve o intercâmbio tanto da posição quanto da polaridade.

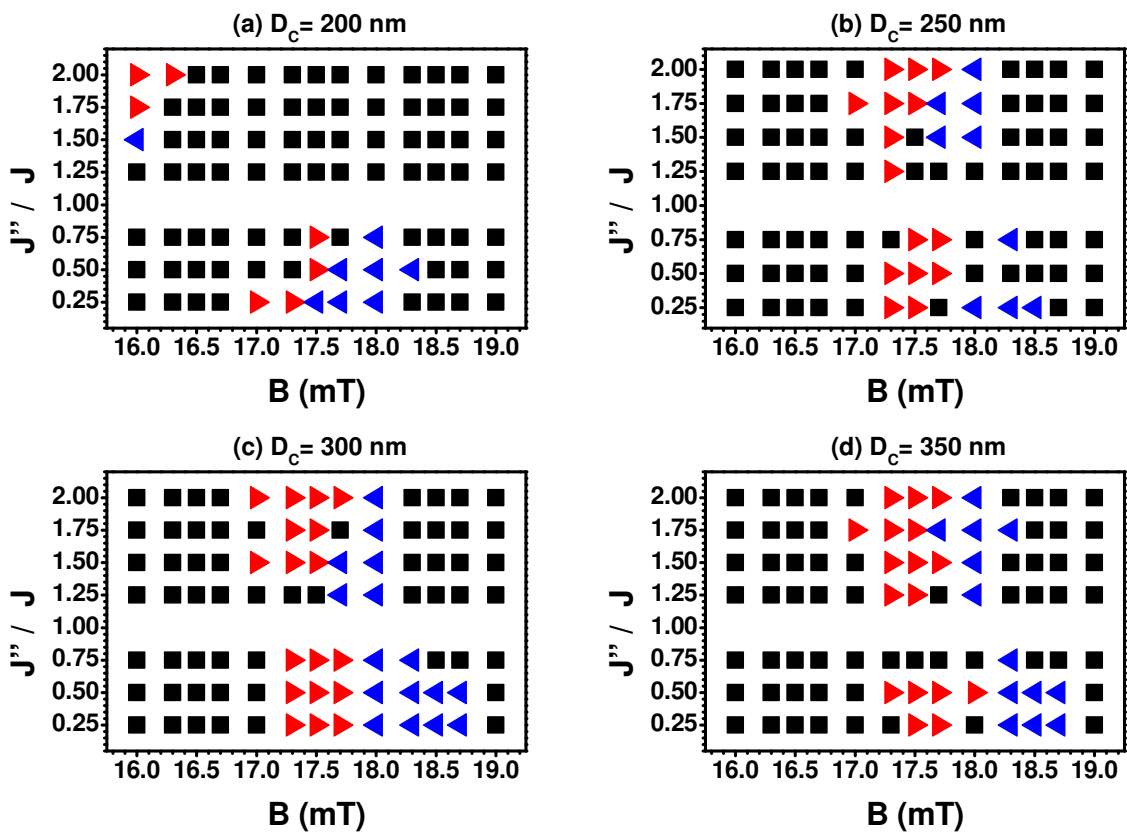


Figura 5.15 – Diagrama de eventos para o controle da posição depois da ocorrência de uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal usando um par de armadilhas. Quadrados em preto incluem eventos em que ocorreu a inversão da polaridade, mas a parede foi imediatamente expelida por uma das extremidades do fio. Triângulos correspondem a combinações de parâmetros para os quais a posição da parede pode ser controlada depois da ocorrência de uma única inversão da polaridade. Triângulos em vermelho representam eventos em que ocorreu apenas a inversão da polaridade (a parede retornou à sua posição inicial com a polaridade invertida); um exemplo desse evento pode ser visualizado na figura (5.16). Triângulos em azul indicam eventos em que tanto a polaridade quanto a posição da parede foram intercambiados (a parede com a polaridade invertida permaneceu na posição oposta à sua posição inicial); um exemplo desse outro evento pode ser visualizado na figura (5.17).

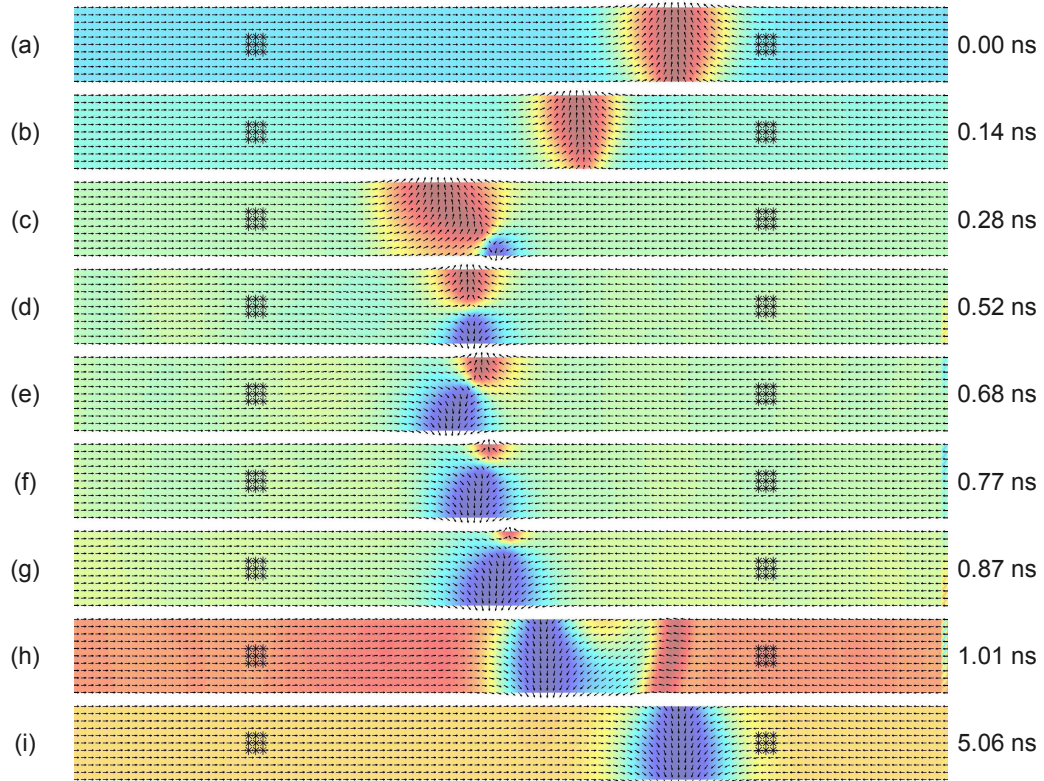


Figura 5.16 – Configurações instantâneas durante o controle da posição após uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal. Nesta simulação o par de aglomerados de impurezas magnéticas era caracterizado pelos seguintes parâmetros $D_c = 300$ [nm] e $J''/J = 2,0$. A parede de domínio foi excitada usando um pulso de campo magnético com duração de 1 [ns] e intensidade de 17,5 [mT]. A figura (a) mostra a configuração inicial de equilíbrio da parede em $t = 0$, antes do pulso ter sido aplicado. As figuras de (b) até (i) mostram configurações instantâneas depois de 0,14; 0,28; 0,52; 0,68; 0,77; 0,87; 1,01; 5,06 [ns], respectivamente. A simulação para tempos posteriores mostra que a posição da parede em $t = 5,06$ [ns] é uma configuração de equilíbrio (Novamente, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da direita.). Com essa sequência de configurações instantâneas para a dinâmica da magnetização podemos ver que a parede de domínio retornou à sua posição inicial com a polaridade invertida. Esse evento corresponde aos triângulos em vermelho da figura (5.15).

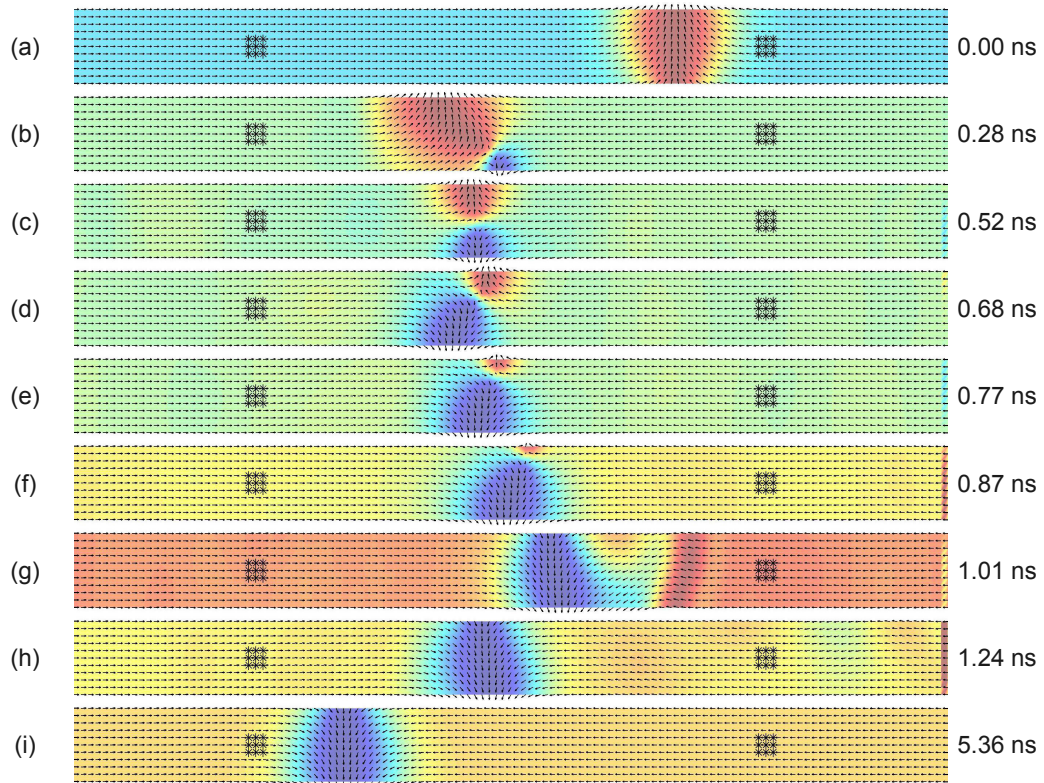


Figura 5.17 – Configurações instantâneas durante o controle da posição após uma única inversão da polaridade da parede de domínio transversal. Nesta simulação o par de aglomerados de impurezas magnéticas era caracterizado pelos seguintes parâmetros $D_c = 300$ [nm] e $J''/J = 2,0$. A parede de domínio foi excitada usando um pulso de campo magnético com duração de 1 [ns] e intensidade de 18,0 [mT]. A figura (a) mostra a configuração inicial de equilíbrio da parede em $t = 0$, antes do pulso ter sido aplicado. As figuras de (b) até (i) mostram configurações instantâneas depois de 0,28; 0,52; 0,68; 0,77; 0,87; 1,01; 1,24; 5,36 [ns], respectivamente. A simulação para tempos posteriores mostra que a posição da parede em $t = 5,36$ [ns] é uma configuração de equilíbrio (Agora, a parede encontra-se bloqueada pelo aglomerado de impurezas da esquerda.). Com essa sequência de configurações instantâneas para a dinâmica da magnetização podemos ver que a parede com a polaridade invertida permaneceu na posição oposta à sua posição inicial. Esse evento corresponde aos triângulos em azul da figura (5.15).

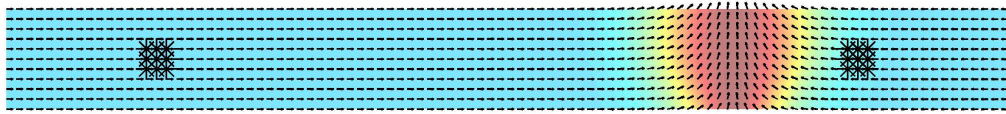
Em suma, estudamos a reversão da polaridade da parede de domínio transversal num nanofio planar de Permalloy sob a condição de que a parede com a polaridade invertida fosse estabilizada em posições pré-definidas. Para essa proposta, propomos o uso de uma distribuição de impurezas magnéticas, consistindo de dois aglomerados de impurezas, em que ambos funcionam como armadilhas para aprisionar ou bloquear a parede. O controle da posição da parede foi previamente estudado e requer amplitudes de excitação muito menores do que aquelas requeridas para o controle da polaridade, cerca de uma ordem de grandeza. No estudo da inversão da polaridade, surgiu a necessidade de aumentar o tamanho do aglomerado de impurezas magnéticas,

uma vez que os efeitos de aprisionamento e de bloqueio se tornam bem maiores, sem que seja necessário considerar grandes variações na constante de troca¹. Com isso, nosso grupo foi capaz de estabilizar a parede recém-nascida que surge da nucleação e subsequente aniquilação de um antivórtice. Como consequência, nós conseguimos inverter a polaridade da parede de uma forma rápida e reversível. Para um pulso de campo magnético com duração de 1 [ns], a amplitude requerida para inverter a polaridade da parede e controlar a sua posição é cerca de 17,5 [mT]. Assim, encontramos que o intervalo de tempo aproximado desde a aplicação do pulso até a estabilização da parede com a polaridade invertida é cerca de 5 [ns]. Nosso tempo de inversão da polaridade é da mesma ordem de grandeza daquele que foi obtido no trabalho experimental realizado por Vanhaverbeke *et al.* (73). Em contraste com os estudos prévios sobre o controle da polaridade da parede de domínio transversal, mostramos que a mudança reversível da polaridade pode ser realizada num nanofio de Permalloy com um par de armadilhas. O nanofio que foi proposto envolve uma modificação local das propriedades magnéticas do nanofio, por isso ele não requer uma modificação local da sua geometria (76) ou então uma camada ferromagnética adicional (73). Basicamente, a inversão da polaridade, de uma forma rápida e reversível, deve envolver um agente externo forte o suficiente para fornecer a energia requerida para a nucleação e aniquilação de um antivórtice dentro da região delimitada pela duas armadilhas; isso pode ser obtido ajustando os parâmetros do agente externo e também a distância relativa entre as armadilhas. Ressaltamos que a reversão da polaridade não é consequência da interação entre a parede de domínio transversal e o aglomerado de impurezas magnéticas. As armadilhas são apenas necessárias para prover estabilidade para a parede, isso é, para o controle da posição da parede ao longo do nanofio. Seguindo a ideia previamente proposta por D. Atkinson *et al.* (70) de usar um nanofio como uma célula de memória magnética, nosso nanofio modificado magneticamente é capaz de armazenar informação tanto na posição (M_x) quanto na polaridade (M_y) da parede de domínio transversal. Uma vez que a parede pode ser encontrada num dos quatro estados que são mostrados na figura (5.18), esta célula de memória é capaz de armazenar 2 bits de dados. A diferença básica desta célula de memória não-volátil em relação àquela proposta por D. At-

¹ Grandes variações na constante de troca podem não corresponder a uma situação real.

kinson *et al.* (70) é que ao invés de injetar uma parede de domínio transversal com um perfil específico (M_x, M_y), nós manipulamos as propriedades da parede pré-existente. Como a posição e a polaridade da parede podem ser independentemente controladas, o nanofio magnético modificado é interessante de um ponto de vista tecnológico, porque ele fornece uma alternativa para a realização de futuras memória magnéticas não-voláteis.

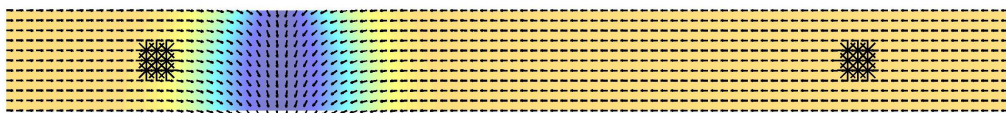
(a) Estado 1: $M_x > 0, M_y > 0$



(b) Estado 2: $M_x < 0, M_y > 0$



(c) Estado 3: $M_x < 0, M_y < 0$



(d) Estado 4: $M_x > 0, M_y < 0$

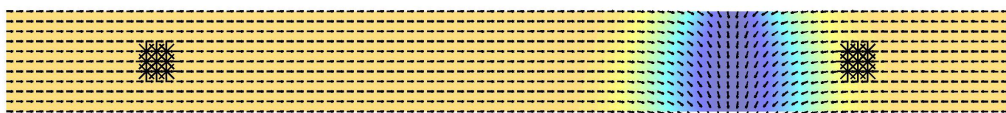


Figura 5.18 – Os quatro estados possíveis para a configuração de uma única parede de domínio transversal confinada entre dois aglomerados de impurezas magnéticas. A posição da parede é mapeada por M_x , a componente da magnetização ao longo do eixo do comprimento do nanofio. Enquanto que a polaridade é mapeada por M_y , a componente da magnetização ao longo do eixo da largura.

6 CONCLUSÕES, PERSPECTIVAS E TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

Distribuições de impurezas magnéticas foram propostas para controlar a dinâmica da quasipartícula num nanomagnetito.

- O uso de um anel de impurezas mostrou-se útil para modular a frequência girotrópica e, simultaneamente, forneceu um mecanismo alternativo para a reversão da polaridade do vórtice num nanodisco;
- A incorporação de impurezas magnéticas num nanofio retangular pode ser uma alternativa aos defeitos não-magnéticos, que são requeridos para estabilizar a parede de domínio transversal em posições pré-definidas;
- Mostramos que a posição e a polaridade da parede de domínio transversal podem ser manipuladas num nanofio contendo um par de impurezas magnéticas, que pode ser adequado para armazenar ou processar informações.

6.2 PERSPECTIVAS

Embora os resultados apresentados aqui sejam para simples distribuições de impurezas magnéticas acreditamos que as suas consequências possam ser planejadas e estendidas para o desenvolvimento e realização de futuros dispositivos.

6.3 TRABALHOS FUTUROS

Nesta tese foi estudado a parede de domínio transversal na configuração cabeça-com-cabeça, mas a parede de domínio transversal também pode ocorrer na configuração cauda-com-cauda. Do ponto de vista energético, elas são equivalentes. Essa nomenclatura ou distinção surge da orientação relativa das magnetizações dos domínios antiparalelos, veja a figura (6.1).

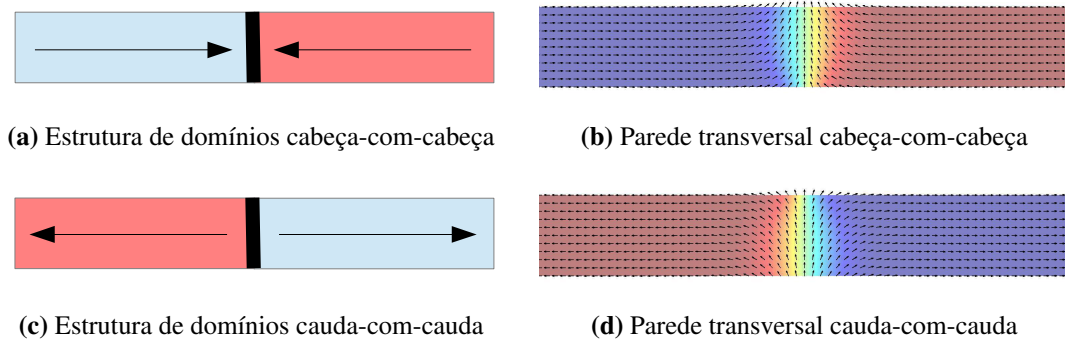


Figura 6.1 – A parede de domínio transversal pode ocorrer em duas configurações: cabeça-com-cabeça ou cauda-com-cauda. Essa nomenclatura surge da orientação relativa das magnetizações dos domínios antiparalelos (a) e (c). Em (b) nota-se que a parede na configuração cabeça-com-cabeça é mais estreita no pólo sul da parede, ou seja, a região da parede em que os momentos magnéticos estão entrando pela lateral do nanofio. Por outro lado, em (c) nota-se que a parede na configuração cauda-com-cauda é mais estreita no pólo norte da parede, ou seja, a região da parede em que os momentos magnéticos estão saindo pela lateral do nanofio.

Quando múltiplas paredes de domínios estão presentes no mesmo nanofio, as paredes adjacentes se alternam entre as configurações cabeça-com-cabeça e cauda-com-cauda, veja a figura (6.2).

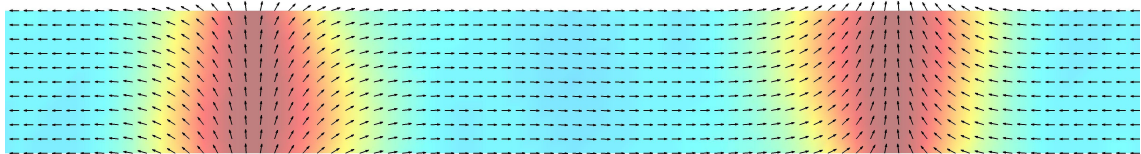


Figura 6.2 – Representação esquemática de um nanofio contendo várias paredes de domínio, paredes adjacentes se alternam entre as configurações cabeça-com-cabeça e cauda-com-cauda.

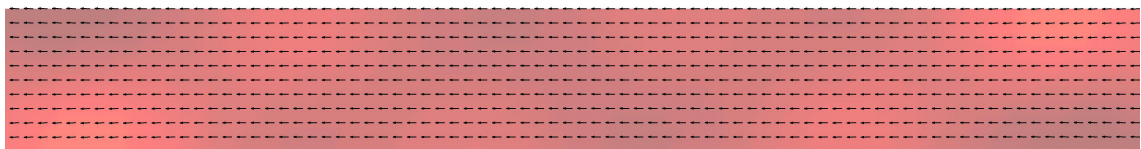
As paredes de domínio interagem entre si, por exemplo, a interação entre duas paredes de domínio transversal depende das polaridades das paredes (69). Por simplicidade, nas figuras (6.3) e (6.4) essa interação é ilustrada num nanofio planar contendo três domínios magnéticos, eles estão separados por duas paredes, a esquerda há uma parede cauda-com-cauda e na direita uma parede cauda com cabeça-com-cabeça. Quando as polaridades das paredes são paralelas observa-se uma atração e em seguida ocorre a aniquilação, o sistema se torna um monodomínio. Por outro lado, se a polaridades são antiparalelas, essa configuração com três domínios é estável porque as paredes se repelem.



(a) Representação esquemática do estado inicial de um nanofio com 3 domínios magnéticos

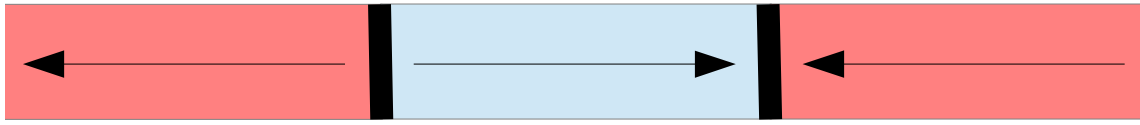


(b) Estado inicial: 2 paredes com mesma polaridade, ou seja, as polaridades são paralelas

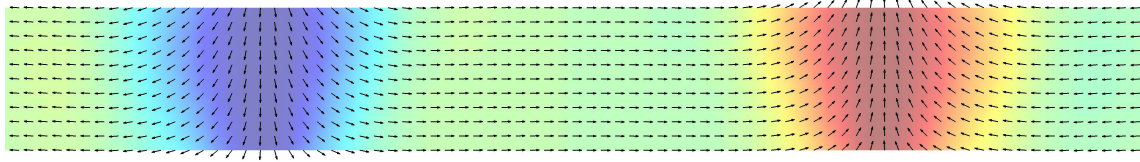


(c) Estado final: nenhuma parede, as paredes se aniquilaram e o sistema tornou-se um monodomínio

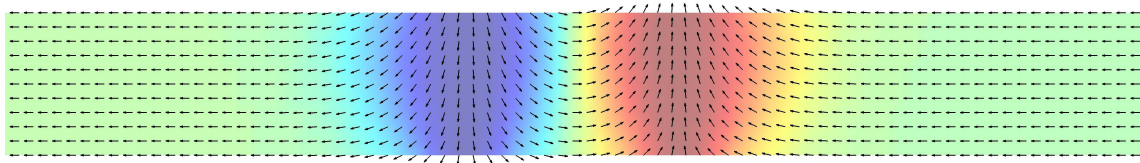
Figura 6.3 – Representação esquemática da atração e subsequente aniquilação de duas paredes de domínio transversal apresentando polaridades paralelas.



(a) Representação esquemática do estado inicial de um nanofio com 3 domínios magnéticos



(b) Estado inicial: 2 paredes com polaridades opostas, ou seja, as polaridades são antiparalelas



(c) Estado final: duas paredes com polaridades antiparalelas se repelindo

Figura 6.4 – Representação esquemática da repulsão entre de duas paredes de domínio transversal apresentando polaridades antiparalelas.

Um trabalho rápido e que pode gerar uma publicação imediata, seria investigar a possibilidade de usar impurezas magnéticas para promover um espaçamento linear entre paredes ¹, impedindo que elas se aniquilem no caso em que as paredes apresentam polaridades paralelas, ou então, impondo que elas permaneçam não muito próximas como ocorre no caso em que as paredes apresentam polaridades antiparalelas. Isso pode ser conseguido usando uma distribuição de impurezas magnéticas que seja linearmente espaçada.

Em outros trabalhos, poderia ser estudado a dinâmica de outras quasipartículas, tais como:

- O skyrmion;
- A parede de domínio do tipo vórtice num nanofio retangular;
- A parede de domínio presente num nanofio cilíndrico.

¹ Esse é um dos requerimentos fundamentais para o funcionamento da memória pista de corrida para bits (58).

REFERÊNCIAS

- 1 ROSS, C. A.; HARATANI, S.; SHIMA, M. Magnetic behavior of lithographically patterned particle arrays. **Journal of Applied Physics**, v. 91, n. 10, p. 6848, 2002.
- 2 MARTÍN, J. I. et al. Ordered magnetic nanostructures: fabrication and properties. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 256, p. 449–501, 2003.
- 3 SBIAA, R.; PIRAMANAYAGAM, S. N. Patterned Media Towards Nano-bit Magnetic Recording: Fabrication and Challenges. **Recent Patents on Nanotechnology**, v. 100, p. 29–40, 2007.
- 4 PIRAMANAYAGAM, S. N.; SRINIVASAN, K. Recording media research for future hard disk drives. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 321, p. 485, 2009.
- 5 SCHNEIDER, M.; HOFFMANN, H.; ZWECK, J. Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks. **Applied Physics Letters**, v. 77, n. 18, p. 2909, 2000.
- 6 COWBURN, R. P. et al. Single-domain circular nanomagnets. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 5, p. 1042, 1999.
- 7 SHINJO, T. et al. Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy. **Science**, v. 289, p. 930, 2000.
- 8 WACHOWIAK, A. et al. Direct Observation of Internal Spin Structure of Magnetic Vortex Cores. **Science**, v. 298, p. 577, 2002.
- 9 MILTAT, J.; THIAVILLE, A. Vortex Cores—Smaller Than Small. **Science**, v. 298, p. 555, 2002.
- 10 USOV, N.; PESCHANY, S. Magnetization curling in a fine cylindrical particle. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 118, p. 290, 1993.
- 11 PULWEY, R. et al. Switching Behavior of Vortex Structures in Nanodisks. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 37, n. 4, p. 2076, 2001.
- 12 HEINRICH, B.; BLAND, J. **Ultrathin Magnetic Structures IV - Applications of Nanomagnetism**. Springer, 2005.
- 13 RAABE, J. et al. Magnetization pattern of ferromagnetic nanodisks. **Journal of Applied Physics**, v. 88, n. 7, 2000.
- 14 CHOE, S.-B. et al. Vortex core-driven magnetization dynamics. **Science**, v. 304, p. 420, 2004.

- 15 DIAS, R. A. et al. Molecular dynamics simulation of Lorentz force microscopy in magnetic nano-disks. **Applied Physics Letters**, v. 102, n. 172405, 2013.
- 16 NOVOSAD, V. et al. Magnetic vortex resonance in patterned ferromagnetic dots. **Physical Review B**, v. 72, n. 024455, 2005.
- 17 GUSLIENKO, K. et al. Eigenfrequencies of vortex state excitations in magnetic submicron-size disks. **Journal of Applied Physics**, v. 91, p. 8037, 2002.
- 18 PARK, J. et al. Imaging of spin dynamics in closure domain and vortex structures. **Physical Review B**, v. 67, n. 020403, 2003.
- 19 WAEYENBERGE, B. et al. Magnetic vortex core reversal by excitation with short burst of an alternating field. **Nature**, v. 444, n. 05240, p. 461–464, 2006.
- 20 RAABE, J. et al. Quantitative Analysis of Magnetic Excitations in Landau Flux-Closure Structures Using Synchrotron-Radiation Microscopy. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 217204, 2005.
- 21 STOLL, H. et al. High-resolution imaging of fast magnetization dynamics in magnetic nanostructures. **Applied Physics Letters**, v. 84, n. 17, 2004.
- 22 GAIDIDEI, Y.; KRAVCHUK, V.; SHEKA, D. Magnetic vortex dynamics induced by an electrical current. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 110, p. 83–97, 2010.
- 23 TOSCANO, D. et al. Magnetic vortex formation and gyrotropic mode in nanodisks. **Journal of Applied Physics**, v. 109, n. 014301, 2011.
- 24 KIKUCHI, N. et al. Vertical bistable switching of spin vortex in a circular magnetic dot. **Journal of Applied Physics**, v. 90, n. 12, 2001.
- 25 HOLLINGER, R.; KILLINGER, A.; KREY, U. Statics and fast dynamics of nanomagnets with vortex structure. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 261, p. 178–189, 2003.
- 26 GAIDIDEI, Y.; SHEKA, D.; MERTENS, F. Controllable switching of vortex chirality in magnetic nanodisks by a field pulse. **Journal of Applied Physics Letters**, v. 92, n. 012503, 2008.
- 27 CAPUTO, J.-G. et al. Vortex polarity switching by a spin-polarized current. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 056604, 2007.
- 28 YAMADA, K. et al. Electrical switching of the vortex core in a magnetic disk. **Nature**, v. 6, p. 269, 2007.
- 29 XIAO, Q. et al. Dynamics of magnetic vortex core switching in Fe ferromagnetic nanodisks by applying in-plane magnetic field pulse. **Journal of Applied Physics**, v. 102, n. 103904, 2007.
- 30 HERTEL, R. et al. Ultrafast nanomagnetic toggle switching of vortex cores. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 117201, 2007.
- 31 LEE, K.-S. et al. Ultrafast vortex-core reversal dynamics in ferromagnetic nanodots. **Physical Review B**, v. 76, n. 174410, 2007.

- 32 KIM, S.-K. et al. Electric-current-driven vortex-core reversal in soft magnetic nanodots. **Journal of Applied Physics Letters**, v. 91, n. 082506, 2007.
- 33 KRAVCHUK, V. et al. Controlled vortex core switching in a magnetic nanodisk by a rotating field. **Journal of Applied Physics**, v. 102, n. 043908, 2007.
- 34 SHEKA, D.; GAIDIDEI, Y.; MERTENS, F. Current induced switching of vortex polarity in magnetic nanodisks. **Journal of Applied Physics Letters**, v. 91, n. 082509, 2007.
- 35 GUSLIENKO, K.; LEE, K.-S.; KIM, S.-K. Dynamics origin of vortex core switching in soft magnetic nanodots. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 027203, 2008.
- 36 PEREIRA, A. R. et al. Vortex behavior near a spin vacancy in two-dimensional XY magnets. **Physical Review B**, v. 68, n. 132409, 2003.
- 37 RAHM, M. et al. Vortex pinning at individual defects in magnetic nanodisks. **Journal of Applied Physics**, v. 93, n. 10, p. 7429–7431, 2003.
- 38 RAHM, M. et al. Influence of point defects on magnet vortex structures. **Journal of Applied Physics**, v. 95, n. 11, p. 6708–6710, 2004.
- 39 PEREIRA, A. R. Hysteresis trace in cylindrical magnetic nanoparticles with individual defects. **Journal of Applied Physics**, v. 97, n. 094303, 2005.
- 40 UHLIG, T. et al. Shifting and pinning of a magnetic vortex core in permalloy dot by a magnet field. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 237205, 2005.
- 41 COMPTON, R. L.; CROWELL, P. A. Dynamics of a pinned magnetic vortex. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 137202, 2006.
- 42 COMPTON, R. L.; CHEN, T. Y.; CROWELL, P. A. Magnetic vortex dynamics in the presence of pinning. **Physical Review B**, v. 81, n. 144412, 2010.
- 43 KUEPPER, K. et al. Vortex dynamics in permalloy disks with artificial defects: suppression of the gyrotropic mode. **Applied Physics Letters**, v. 90, n. 062506, 2007.
- 44 MOURA-MELO, W. A. et al. How hole defects modify vortex dynamics in ferromagnetic nanodisks. **Journal of Applied Physics**, v. 103, n. 124306, 2008.
- 45 SILVA, R. L. et al. Predicted defect-induced vortex core switching in thin magnetic nanodisks. **Physical Review B**, v. 78, n. 054423, 2008.
- 46 APOLONIO, F. et al. A model for structural defects in nanomagnets. **Journal of Applied Physics**, v. 106, n. 084320, 2009.
- 47 TOSCANO, D. et al. Vortex core scattering and pinning by impurities in nanomagnets. **Journal of Applied Physics**, v. 109, n. 076104, 2011.
- 48 YAMAGUCHI, A. et al. Real-space observation of current-driven domain wall motion in submicron magnetic wires. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 077205, 2004.
- 49 COWBURN, R. P. et al. Domain wall injection and propagation in planar Permalloy nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 91, p. 6949–6951, 2002.

- 50 HIMENO, A. et al. Dynamics of a magnetic domain wall in magnetic wires with an artificial neck. **Journal of Applied Physics**, v. 93, p. 8430–8432, 2003.
- 51 HAYASHI, M. et al. Influence of current on field-driven domain wall motion in Permalloy nanowires from time resolved measurements of anisotropic magnetoresistance. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 197207, 2006.
- 52 SHINJO, T. **Nanomagnetism and Spintronics**. Elsevier, 2009.
- 53 MCMICHAEL, R. D.; DONAHUE, M. J. Head-to-head domain wall structures in thin magnetic strips. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 33, p. 4167–4169, 1997.
- 54 NAKATANI, Y.; THIAVILLE, A.; MILTAT, J. Head-to-head domain walls in soft nano-strips: a refined phase diagram. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 290, p. 750–753, 2005.
- 55 KLÄUI, M. Head-to-head domain walls in magnetic nanostructures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 20, n. 313001, 2008.
- 56 ALLWOOD, D. A. et al. Magnetic Domain-Wall Logic. **Science**, v. 309, p. 1688, 2005.
- 57 NAGAI, K. et al. Binary data coding with domain wall for spin wave based logic devices. **Journal of Applied Physics**, v. 111, n. 07D123, 2012.
- 58 PARKIN, S. S. P.; HAYASHI, M.; THOMAS, L. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. **Science**, v. 320, p. 190, 2008.
- 59 HAYASHI, M. et al. Current-Controlled Magnetic Domain-Wall Nanowire Shift Register. **Science**, v. 320, p. 209, 2008.
- 60 ONO, T. et al. Propagation of a magnetic domain wall in a submicrometer magnetic wire. **Science**, v. 264, p. 468–470, 1999.
- 61 ATKINSON, D. et al. Magnetic domain-wall dynamics in a submicrometre ferromagnetic structure. **Nature Materials**, v. 20, p. 85–87, 2003.
- 62 NAKATANI, Y.; THIAVILLE, A.; MILTAT, J. Faster magnetic walls in rough wires. **Nature Materials**, v. 20, p. 521–523, 2003.
- 63 BEACH, G. S. D. et al. Dynamics of field-driven domain-wall propagation in ferromagnetic nanowires. **Nature Materials**, v. 40, p. 741–744, 2005.
- 64 YOU, C.-Y. Equation of motion for a domain wall movement under a nonuniform transverse magnetic field. **Applied Physics Letters**, v. 92, n. 192514, 2008.
- 65 VÁZQUEZ, M. et al. Trapping and injecting single domain walls in magnetic wire by local fields. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 037201, 2012.
- 66 BERGER, L. Low-field magnetoresistance and domain drag in ferromagnets. **Journal of Applied Physics**, v. 49, p. 2156–2161, 1978.
- 67 HAYASHI, M. et al. Current driven domain wall velocities exceeding the spin angular momentum transfer rate in permalloy nanowires. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 037204, 2007.

- 68 BEACH, G. S. D.; TSOI, M.; ERSKINE, J. L. Current-induced domain wall motion. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 320, p. 1272–1281, 2008.
- 69 KUNZ, A.; RENTSCH, E. W. Simulations of Field Driven Domain Wall Interactions in Ferromagnetic Nanowires. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 46, n. 6, p. 1556, 2010.
- 70 ATKINSON, D. et al. Controlling domain wall pinning in planar nanowires by selecting domain wall type and its application in a memory concept. **Applied Physics Letters**, v. 92, n. 022510, 2008.
- 71 SCHRYER, N. L.; WALKER, L. R. The motion of 180 domain walls in uniform dc magnetic fields. **Journal of Applied Physics**, v. 45, p. 5406, 1974.
- 72 KLÄUI, M. Flipping a domain wall switch. **Physics**, v. 1, n. 17, 2008.
- 73 VANHAVERBEKE, A.; BISCHOF, A.; ALLENSPACH, R. Control of domain wall polarity by current pulses. **Physical Review Letters**, v. 101, n. 107202, 2008.
- 74 PETIT, D. et al. Domain wall pinning and potential landscapes created by constrictions and protrusions in ferromagnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 103, n. 114307, 2008.
- 75 BRYAN, M. T. et al. Magnetic domain wall propagation in nanowires under transverse magnetic fields. **Journal of Applied Physics**, v. 103, n. 073906, 2008.
- 76 TRETIKOV, O. A.; LIU, X.; ABANOV, A. Domain-wall dynamics in translationally noninvariant nanowires: theory and applications. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 247201, 2012.
- 77 YUAN, H. Y.; WANG, X. R. Birth, growth and death of an antivortex during the propagation of a transverse domain wall in magnetic nanostrips. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 368, p. 70–74, 2014.
- 78 MCMICHAEL, R. D. et al. Domain wall traps for low-field switching of submicron elements. **Journal of Applied Physics**, v. 87, p. 7058, 2000.
- 79 LIM, C. K. et al. Domain wall displacement induced by subnanosecond pulsed current. **Applied Physics Letters**, v. 84, p. 2820, 2004.
- 80 THOMAS, L. et al. Observation of injection and pinning of domain walls in magnetic nanowires using photoemission electron microscopy. v. 87, n. 262501, 2005.
- 81 THOMAS, L. et al. Oscillatory dependence of current-driven magnetic domain wall motion on current pulse length. **Nature**, v. 443, p. 197, 2006.
- 82 HAYASHI, M. et al. Dependence of current and field driven depinning of domain walls on their structure and chirality in Permalloy nanowires. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 207205, 2006.
- 83 BORGAT, L. K. et al. Dependence of domain wall pinning potential landscapes on domain wall chirality and pinning site geometry in planar nanowires. **Physical Review B**, v. 79, n. 054414, 2009.

- 84 IM, M.-Y. et al. Direct observation of stochastic domain-wall depinning in magnetic nanowires. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 147204, 2009.
- 85 LEWIS, E. R. et al. Magnetic domain wall pinning by a curved conduit. **Applied Physics Letters**, v. 95, n. 152505, 2009.
- 86 DJUHANA, D. et al. Asymmetric ground state spin configuration of transverse domain wall on symmetrically notched ferromagnetic nanowires. **Applied Physics Letters**, v. 97, n. 022511, 2010.
- 87 SEKHAR, M. C. et al. Crossover in domain wall potential polarity as a function of anti-notch geometry. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 44, n. 235002, 2011.
- 88 CHAPPERT, C. et al. Planar patterned magnetic media obtained by ion irradiation. **Science**, v. 280, p. 1919, 1998.
- 89 OZKAYA, D. et al. Effect of Ga implantation on the magnetic properties of permalloy thin films. **Journal of Applied Physics**, v. 91, p. 9937, 2002.
- 90 FOLKS, L. et al. Localized magnetic modification of permalloy using Cr⁺ ion implantation. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 36, p. 2601, 2003.
- 91 FASSBENDER, J. et al. Structural and magnetic modifications of Cr-implanted Permalloy. **Physical Review B**, v. 73, n. 184410, 2006.
- 92 FASSBENDER, J.; MCCORD, J. Magnetic patterning by means of ion irradiation and implantation. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 320, p. 579, 2008.
- 93 FASSBENDER, J. et al. Introducing artificial length scales to tailor magnetic properties. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 125002, 2009.
- 94 MOORE, T. A. et al. Magnetic-field-induced domain-wall motion in permalloy nanowires with modified Gilbert damping. **Physical Review B**, v. 82, n. 094445, 2010.
- 95 VOGEL, A. et al. Field- and current-induced domain-wall motion in permalloy nanowires with magnetic soft spots. **Applied Physics Letters**, v. 98, n. 202501, 2011.
- 96 GERHARDT, T.; DREWS, A.; MEIER, G. Controlled pinning and depinning of domain walls in nanowires with perpendicular magnetic anisotropy. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 24, n. 024208, 2012.
- 97 JANG, Y. et al. Current-driven domain wall motion in heterostructured ferromagnetic nanowires. **Applied Physics Letters**, v. 100, n. 112401, 2012.
- 98 BASITH, M. A. et al. Reproducible domain wall pinning by linear non-topographic features in a ferromagnetic nanowire. **Applied Physics Letters**, v. 100, n. 232402, 2012.
- 99 FERREIRA, V. A. et al. Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 114, n. 013907, 2013.
- 100 SILVA, J. H. et al. The influence of magnetic impurities in the vortex core dynamics in magnetic nano-disks. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 324, p. 3083–3086, 2012.

- 101 JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. John Wiley & Sons, 1962.
- 102 BOHN, F. **Propriedades estatísticas do ruído Barkhausen em materiais magnéticos artificialmente estruturados**. Tese (Doutorado) — UFSM, 2009.
- 103 BERTOTTI, G. **Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists and Engineers**. Academic Press, 1998.
- 104 GETZLAFF, M. **Fundamentals of Magnetism**. Springer, 2008.
- 105 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. **Solid State Physics**. College edition. Saunders College Publishers, 1976.
- 106 SALINAS, S. **Introdução à Física Estatística**. EDUSP, 1999.
- 107 MOL, L. **Estudo de materiais magnéticos de baixa dimensionalidade dopados com impurezas não magnéticas**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2004.
- 108 APOLONIO, F. **Um modelo estrutural para defeitos em nanomagnetos**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2010.
- 109 GUIMARAES, A. P. **Principles of Nanomagnetism**. Springer, 2009.
- 110 LANDAU, L.; LIFSHITS, E. ON THE THEORY OF THE DISPERSION OF MAGNETIC PERMEABILITY IN FERROMAGNETIC BODIES. **Phys. Zeitsch**, v. 8, p. 153–169, 1935.
- 111 GILBERT, T. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.
- 112 STOHR, J.; SIEGMANN, H. **Magnetism from fundamentals to nanoscale dynamics**. Springer, 2006.
- 113 THIELE, A. Steady-state motion of magnetic domains. **Physical Review Letters**, v. 30, n. 6, 1973.
- 114 THIELE, A. Applications of the gyrocoupling vector and dissipation dyadic in the dynamics of magnetic domains. **Journal of Applied Physics**, v. 45, n. 1, 1974.
- 115 HUBER, D. Dynamics of spin vortices in two-dimensional planar magnets. **Physical Review B**, v. 26, n. 7, 1982.
- 116 LEE, K.-S.; KIM, S.-K. Gyrotropic linear and nonlinear motions of a magnetic vortex in soft magnetic nanodots. **Applied Physics Letters**, v. 91, n. 132511, 2007.
- 117 GUSLIENKO, K. Low-frequency vortex dynamic susceptibility and relaxation in mesoscopic ferromagnetic dots. **Applied Physics Letters**, v. 89, n. 022510, 2006.
- 118 USOV, N.; PESCHANY, S. Magnetization curling in a fine cylindrical particle. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 118, n. 3, 1993.
- 119 WYSIN, G. M. Magnetic vortex mass in two-dimensional easy-plane magnets. **Physical Review B**, v. 54, n. 15156, 1996.

- 120 TOSCANO, D. **Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos**. Dissertação (Mestrado) — UFJF, fev. 2011.
- 121 VOLKEL, A. et al. Collective-variable approach to the dynamics of nonlinear magnetic excitations with application to vortices. **Physical Review B**, v. 50, n. 17, 1994.
- 122 MERTENS, F.; SCHNITZER, H.; BISHOP, A. Hierarchy of equations of motion for nonlinear coherent excitations applied to magnetic vortices. **Physical Review B**, v. 56, n. 5, 1997.
- 123 THIAVILLE, A.; NAKATANI, Y.; SUZUKI, Y. Micromagnetic understanding of current-driven domain wall motion in patterned nanowires. **Europhysics Letters**, v. 69, n. 6, 2005.
- 124 KRUGER, B.; DREWS, A. Harmonic oscillator model for current- and field-driven magnetic vortices. **Physical Review B**, v. 76, n. 224426, 2007.
- 125 KRUGER, B.; DREWS, A. Vortices and antivortices as harmonic oscillators. **Journal of Applied Physics**, v. 103, n. 07A501, 2008.
- 126 BOYCE, W.; DIPRIMA, R. **Elementary differential equations and boundary value problems**. 6. ed. John Willey & Sons, 1997.
- 127 WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 22, n. 376002, 2010.
- 128 TOSCANO, D. et al. Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities. **Applied Physics Letters**, v. 101, n. 252402, 2012.
- 129 TOSCANO, D. et al. Position of the transverse domain wall controlled by magnetic impurities in rectangular magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 115, n. 163906, 2014.

APÊNDICE A – Interação de troca entre dois spins

A interação de troca é a interação responsável pelo ordenamento magnético. Essa interação surge de um efeito quântico sem análogo clássico, devido à indistinguibilidade dos elétrons e da repulsão coulombiana entre eles.

A fim de verificar tal afirmação vamos considerar um modelo muito simples com apenas dois elétrons pertencendo a átomos vizinhos numa rede cristalina. A equação de Schrödinger independente do tempo para duas partículas é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 \right) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{A.1})$$

A energia potencial eletrostática para dois elétrons, é dada por

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -k \frac{e^2}{r_1} - k \frac{e^2}{r_2} + k \frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{A.2})$$

em que $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ é a distância relativa entre eles e definimos $k = (4\pi\epsilon_0)^{-1}$. Como a energia potencial envolve as coordenadas de ambos os elétrons, a equação (A.1) não admite uma solução exata, por exemplo, fazendo-se uma separação de variáveis. Em seguida, usaremos a teoria de perturbação independente do tempo para obter uma solução aproximada para o problema.

O hamiltoniano na equação (A.1) pode ser dividido em duas partes, uma representada por

$$H^{(0)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - k \frac{e^2}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - k \frac{e^2}{r_2} \right) \quad (\text{A.3})$$

E outra considerando um hamiltoniano de perturbação, expresso por

$$H^{(1)} = k \frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{A.4})$$

A equação de autovalor correspondente ao hamiltoniano $H^{(0)}$ é

$$H^{(0)}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E^{(0)}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{A.5})$$

Ignorando momentaneamente a interação elétron-elétron, agora é possível fazer uma separação de variáveis e as autofunções de $H^{(0)}$ podem ser escritas em termos de produtos de autofunções que envolvem apenas um dos elétrons,

$$\psi_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{\alpha}(\vec{r}_1)\psi_{\beta}(\vec{r}_2) \quad (\text{A.6})$$

em que $\psi_{\alpha}(\vec{r}_1)$ e $\psi_{\beta}(\vec{r}_2)$ descrevem o comportamento dos elétrons 1 e 2 (por exemplo, as autofunções para átomos de um elétron), os índices α e β englobam três números quânticos, um para cada coordenada espacial. Os autovalores de $H^{(0)} = H_1^{(0)} + H_2^{(0)}$ são $E_{\alpha\beta}^{(0)} = E_{\alpha} + E_{\beta}$.

Embora tenhamos rotulado as partículas através dos índices 1 e 2, não podemos distingui-las. No caso de partículas idênticas, devemos encontrar uma função de onda tal que a densidade de probabilidade continue a mesma se intercambiarmos os índices

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 \quad (\text{A.7})$$

Para que a equação (A.7) seja satisfeita, é preciso que a função $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ seja simétrica ou anti-simétrica em relação à troca das partículas, respectivamente,

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{A.8})$$

Observe que a autofunção genérica da equação (A.6) não é simétrica nem anti-simétrica; ao intercambiarmos as coordenadas dos elétrons $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, obtemos uma autofunção completamente diferente, o que equivalente a dizer que é possível distinguir os dois elétrons. Assim, essas autofunções não são compatíveis com o princípio de indistinguibilidade das partículas. Entretanto, existem duas combinações lineares de produtos como os da equação (A.6) que formam um autofunção simétrica e uma autofunção anti-simétrica, e portanto, além de satisfazerem a equação de autovalor para duas partículas, equação (A.5), também respeitam o princípio de

indistinguiabilidade:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) + \psi_\beta(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2)] \quad (\text{A.9})$$

e

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) - \psi_\beta(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2)] \quad (\text{A.10})$$

A teoria de Schrödinger não descreve o spin das partículas, a função de onda de spin deve ser introduzida a parte. Para um sistema de dois elétrons, existem quatro estados possíveis, que representaremos por

$$|\uparrow\uparrow\rangle ; |\uparrow\downarrow\rangle ; |\downarrow\uparrow\rangle ; |\downarrow\downarrow\rangle \quad (\text{A.11})$$

As setas representam os estados de spin para cima ou para baixo $m_{s_i} \pm 1/2$. Com esses estados, podemos construir um estado anti-simétrico

$$|\chi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (s = 0, m_s = 0) \quad (\text{A.12})$$

e três estados simétricos

$$|\chi_S\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (s = 1, m_s = +1) \quad (\text{A.13a})$$

$$|\chi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (s = 1, m_s = 0) \quad (\text{A.13b})$$

$$|\chi_S\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (s = 1, m_s = -1) \quad (\text{A.13c})$$

A equação (A.12) corresponde ao estado em que os spins estão antiparalelos, chamado de estado singleto com spin total nulo, $|s_1 - s_2| = 1/2 - 1/2 = 0$. Já o estado representado pelas equações (A.13) corresponde àquele em que os spins estão paralelos, chamado de estado tripleto com spin total igual a 1, $s_1 + s_2 = 1$.

Como elétrons são férmions (partículas com spin fracionário), eles estão sujeitos ao princípio de exclusão de Pauli, que impõe que a função de onda total seja anti-simétrica. Sabe-se que a função de onda total é formada pelo produto das partes espacial e de spin. Há dois estados globalmente anti-simétricos, portanto, fisicamente aceitáveis, associados a um sistema

de dois elétrons,

$$|\psi_{\text{singlete}}\rangle = |\psi_S\rangle \otimes |\chi_A\rangle \quad (\text{A.14})$$

com a parte espacial simétrica e a parte de spin anti-simétrica, ou

$$|\psi_{\text{triplete}}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\chi_S\rangle \quad (\text{A.15})$$

com a parte espacial anti-simétrica e a parte de spin simétrica.

Note que fazendo as partículas se aproximarem uma da outra, isto é, $\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2$, então pela equação (A.10) vemos que $\psi_A \rightarrow 0$, mostrando que é muito pouco provável que os dois elétrons sejam encontrados próximos no estado triplete.

Para justificar a interação de troca introduzida por Heisenberg, podemos considerar o termo $H^{(1)}$, equação (A.4), no hamiltoniano total como uma perturbação causada pela interação elétron-elétron. Os níveis de energia serão perturbados e uma correção de primeira ordem para os estados singlete e triplete é dada por:

$$E_{\text{singlete}} = \langle \psi_S | H^{(1)} | \psi_S \rangle \quad (\text{A.16})$$

e

$$E_{\text{triplete}} = \langle \psi_A | H^{(1)} | \psi_A \rangle \quad (\text{A.17})$$

Em seguida, calculamos os valores esperados nos estados singlete e triplete

$$\langle \psi_{S,A} | H^{(1)} | \psi_{S,A} \rangle = \int \int dv_1 dv_2 \psi_{S,A}^* \left(k \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_{S,A} \quad (\text{A.18})$$

$$= \frac{1}{2} \int \int dv_1 dv_2 [\psi_\alpha^*(\vec{r}_1) \psi_\beta^*(\vec{r}_2) \pm \psi_\beta^*(\vec{r}_1) \psi_\alpha^*(\vec{r}_2)] \left(k \frac{e^2}{r_{12}} \right) [\psi_\alpha(\vec{r}_1) \psi_\beta(\vec{r}_2) \pm \psi_\beta(\vec{r}_1) \psi_\alpha(\vec{r}_2)]$$

em que substituímos as partes simétrica e anti-simétrica da função de onda espacial dadas pelas equações (A.9) e (A.10). Continuando o desenvolvimento encontramos quatro integrais,

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{S,A} | H^{(1)} | \psi_{S,A} \rangle &= \frac{ke^2}{2} \int \int \frac{dv_1 dv_2}{r_{12}} [\psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \psi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \psi_{\alpha}(\vec{r}_1) \psi_{\beta}(\vec{r}_2)] + \\
&\pm \frac{ke^2}{2} \int \int \frac{dv_1 dv_2}{r_{12}} [\psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \psi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \psi_{\beta}(\vec{r}_1) \psi_{\alpha}(\vec{r}_2)] + \\
&\pm \frac{ke^2}{2} \int \int \frac{dv_1 dv_2}{r_{12}} [\psi_{\beta}^*(\vec{r}_1) \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_2) \psi_{\beta}(\vec{r}_1) \psi_{\alpha}(\vec{r}_2)] + \\
&+ \frac{ke^2}{2} \int \int \frac{dv_1 dv_2}{r_{12}} [\psi_{\beta}^*(\vec{r}_1) \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_2) \psi_{\alpha}(\vec{r}_1) \psi_{\beta}(\vec{r}_2)] \quad (A.19)
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\langle \psi_{S,A} | H^{(1)} | \psi_{S,A} \rangle = I_1 \pm I_2 \pm I_3 + I_4 \quad (A.20)$$

As variáveis de integração são mudas, assim, notando que $I_1 = I_4$ e que $I_2 = I_3$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{S,A} | H^{(1)} | \psi_{S,A} \rangle &= \int \int dv_1 dv_2 \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \psi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \left(\frac{ke^2}{r_{12}} \right) \psi_{\alpha}(\vec{r}_1) \psi_{\beta}(\vec{r}_2) + \\
&\pm \int \int dv_1 dv_2 \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \psi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \left(\frac{ke^2}{r_{12}} \right) \psi_{\beta}(\vec{r}_1) \psi_{\alpha}(\vec{r}_2) \quad (A.21)
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\langle \psi_{S,A} | H^{(1)} | \psi_{S,A} \rangle = I \pm J \quad (A.22)$$

O primeiro termo na equação (A.21) é conhecido como *termo direto*, ele representa a energia coulombiana média do sistema, I , esse termo seria o único na equação (A.21) se não tivéssemos levado em conta o princípio de exclusão. Dessa forma, a imposição de que o princípio de exclusão deveria ser obedecido nos forneceu um termo extra, conhecido como *termo de troca*, ou *integral de troca*, J .

Com a equação (A.22), os resultados das equações (A.16) e (A.17), tornam-se

$$E_{\text{singleto}} = \langle \psi_S | H^{(1)} | \psi_S \rangle = I + J \quad (\text{A.23})$$

e

$$E_{\text{triplete}} = \langle \psi_A | H^{(1)} | \psi_A \rangle = I - J \quad (\text{A.24})$$

Portanto, subtraindo (A.24) de (A.23),

$$E_{\text{singleto}} - E_{\text{triplete}} = 2J \quad (\text{A.25})$$

vemos que a diferença de energia entre os estados singleto e tripleto depende da constante de troca, que é de origem coulombiana e envolve a superposição de funções de onda, com origem nas exigências quânticas de anti-simetria. Se a integral de troca é positiva, $J > 0$, então $E_{\text{singleto}} > E_{\text{triplete}}$, isto é, o estado tripleto com $s = 1$ é energeticamente favorecido. Por outro lado, se $J < 0$, então $E_{\text{singleto}} < E_{\text{triplete}}$, assim o estado singleto com $s = 0$ é energeticamente favorecido.

Apesar da interação coulombiana entre elétrons não depender do estado de spin, vimos que a energia média depende, portanto isso sugere que a energia do sistema possa ser escrita em termos das variáveis de spin. Vamos agora mostrar que um *hamiltoniano efetivo de spin* da forma

$$H = C \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{A.26})$$

em que C é uma constante a ser determinada, é capaz de simular a separação dos elétrons em dois níveis distintos de energia.

Notando que

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_1 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_2$$

$$|\vec{S}_1 + \vec{S}_2|^2 = |\vec{S}_1|^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + |\vec{S}_2|^2$$

(pois $\vec{S}_1$ e $\vec{S}_2$ comutam), então, o produto escalar pode ser escrito como

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} |\vec{S}_1 + \vec{S}_2|^2 - \frac{1}{2} |\vec{S}_1|^2 - \frac{1}{2} |\vec{S}_2|^2 = \frac{1}{2} \left(S^2 - S_1^2 - S_2^2 \right) \quad (\text{A.27})$$

Calculando os valores esperados nos estados singleto e tripleto

$$\begin{aligned} E_{\text{singleto}} &= \langle \chi_A | H | \chi_A \rangle \\ &= \frac{C}{2} \left(\langle \chi_A | S^2 | \chi_A \rangle - \langle \chi_A | S_1^2 | \chi_A \rangle - \langle \chi_A | S_2^2 | \chi_A \rangle \right) \\ &= \frac{C}{2} \left(0 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4} \right) \\ &= -\frac{3}{4} C \hbar^2 \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

e

$$\begin{aligned} E_{\text{tripleto}} &= \langle \chi_S | H | \chi_S \rangle \\ &= \frac{C}{2} \left(\langle \chi_S | S^2 | \chi_S \rangle - \langle \chi_S | S_1^2 | \chi_S \rangle - \langle \chi_S | S_2^2 | \chi_S \rangle \right) \\ &= \frac{C}{2} \left(2\hbar^2 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4} \right) \\ &= \frac{1}{4} C \hbar^2 \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

em que usamos

$$S^2|\chi_{S,A}\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\chi_{S,A}\rangle = \begin{cases} 2\hbar^2, & \text{para } s=1 & (\text{triplete}) \\ 0, & \text{para } s=0 & (\text{singleto}) \end{cases} \quad (\text{A.30})$$

sendo que também usamos

$$S_i^2|\chi_{S,A}\rangle = \hbar^2 s_i(s_i+1)|\chi_{S,A}\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}, \text{ pois } s_i = \frac{1}{2} \quad \text{para } i=1,2 \quad (\text{A.31})$$

Agora subtraindo (A.29) de (A.28), obtemos

$$E_{\text{singleto}} - E_{\text{triplete}} = -C\hbar^2 \quad (\text{A.32})$$

e comparando (A.32) com (A.25), identificamos a constante C do hamiltoniano (A.26) como

$$C = -\frac{2J}{\hbar^2} \quad (\text{A.33})$$

Portanto, a interação de troca entre dois spins adjacentes, $\vec{S}_1$ e $\vec{S}_2$, pode ser descrita pela hamiltoniana

$$H = -\frac{2J_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{A.34})$$

em que J_{12} apresenta dimensão de energia e acopla os elétrons 1 e 2.

APÊNDICE B – Métodos numéricos para a integração da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Equações diferenciais não-lineares ordinárias são resolvidas numericamente. Há uma infinidade de métodos numéricos que podem ser empregados para a resolução de equações diferenciais. Como sugestão, na referência (126) pode-se encontrar os métodos numéricos mais utilizados assim como discussões sobre os possíveis erros em tais procedimentos.

Um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, como o sistema de equações (4.17) apresenta a seguinte estrutura

$$\frac{d\vec{m}^x}{d\tau} = \vec{f}^x(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{d\vec{m}^y}{d\tau} = \vec{f}^y(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{d\vec{m}^z}{d\tau} = \vec{f}^z(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (\text{B.3})$$

onde os vetores $\vec{m}^a$ são de comprimento N, as componentes dos vetores $\vec{f}^a$ são funções das componentes dos campos efetivos locais. Como existem N sítios, para integrar esse sistema temos que especificar 3N condições iniciais,

$$\vec{m}^x(\tau_0) = \vec{m}^{x0} \quad (\text{B.4})$$

$$\vec{m}^y(\tau_0) = \vec{m}^{y0} \quad (\text{B.5})$$

$$\vec{m}^z(\tau_0) = \vec{m}^{z0} \quad (\text{B.6})$$

Queremos determinar os valores aproximados dos vetores $\vec{m}^a$ nos instantes $\tau_n = \tau_0 + n\Delta$, em que $n = 1, 2, \dots$, Δ é o incremento de tempo, em métodos de diferenças finitas, $d\tau \rightarrow \Delta$.

Para resolver este problema de valor inicial há vários métodos numéricos, um método amplamente utilizado é o método de Kunge-Kutta, por ser suficientemente preciso e relativamente fácil de implementá-lo computacionalmente. Para passar de τ_n para τ_{n+1} temos o seguinte algoritmo

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{6}(\vec{C}_{n1}^a + 2\vec{C}_{n2}^a + 2\vec{C}_{n3}^a + \vec{C}_{n4}^a) \quad (\text{B.7})$$

onde

$$\vec{C}_{n1}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a, \tau_n) \quad (\text{B.8})$$

$$\vec{C}_{n2}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + 0.5\Delta\vec{C}_{n1}^a, \tau_n + 0.5\Delta) \quad (\text{B.9})$$

$$\vec{C}_{n3}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + 0.5\Delta\vec{C}_{n2}^a, \tau_n + 0.5\Delta) \quad (\text{B.10})$$

$$\vec{C}_{n4}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + \Delta\vec{C}_{n3}^a, \tau_n + \Delta) \quad (\text{B.11})$$

Supondo que uma configuração inicial seja especificada, calcula-se o campo efetivo dessa configuração e os coeficientes $\vec{C}_{n1}^a$ são determinados. Antes que um passo de tempo seja dado, é necessário computar o campo efetivo em instantes intermediários, ou seja, determinar os coeficientes $\vec{C}_{n2}^a$, $\vec{C}_{n3}^a$ e $\vec{C}_{n4}^a$.

Nos **métodos de passo simples** ou **métodos de partida**, como o método de Runge-Kutta, o valor aproximado da solução em qualquer instante depende somente dos dados no instante precedente. Os métodos que usam informação em mais de um instante, além do último, são denominados **métodos de passo múltiplos**, como exemplo, cita-se o método de previsão e correção de Adams-Bashforth-Moulton. Um vez que as configurações $\vec{m}_{n-3}^a$, $\vec{m}_{n-2}^a$, $\vec{m}_{n-1}^a$ e $\vec{m}_n^a$ são conhecidas, calcula-se $\vec{f}_{n-3}^a$, $\vec{f}_{n-2}^a$, $\vec{f}_{n-1}^a$ e $\vec{f}_n^a$. Em seguida, usa-se o algoritmo de Adams-Bashforth (previsão)

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{24}(55\vec{f}_n^a - 59\vec{f}_{n-1}^a + 37\vec{f}_{n-2}^a - 9\vec{f}_{n-3}^a) \quad (\text{B.12})$$

para obter um valor aproximado de $\vec{m}_{n+1}^a$. Em seguida, calcula-se $\vec{f}_{n+1}^a$ e usa-se o algoritmo de

Adams-Moulton (correção)

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{24}(9\vec{f}_{n+1}^a + 19\vec{f}_n^a - 5\vec{f}_{n-1}^a + \vec{f}_{n-2}^a) \quad (\text{B.13})$$

que a essa altura não é implícito, para obter um valor mais preciso de $\vec{m}_{n+1}^a$.

Quando não se conhece outras configurações além da configuração inicial, uma forma de proceder é usar um método de passos simples, ou seja, um método de partida de precisão comparável ao método de passos múltiplos, para determinar as configurações iniciais necessárias. Assim, no caso do método de previsão e correção, pode-se usar o método de Runge-Kutta de quarta ordem para calcular as configurações iniciais. Este procedimento foi utilizado neste trabalho. O método de previsão e correção mostrou-se bem mais rápido do que o método de Runge-Kutta. O método de Runge-kutta de quarta ordem exige quatro cálculos do campo efetivo em cada passo, enquanto que o método de previsão e correção exige apenas dois. O cálculo do campo efetivo é demorado devido ao caráter de longo alcance do campo dipolar.

APÊNDICE C – Modulação frequência girotrópica através do anel de impurezas magnéticas: uma explicação qualitativa dada pela equação de Thiele

Uma explicação qualitativa para a variação da frequência girotrópica devido a presença do anel de impurezas magnéticas pode ser dada em termos da equação de Thiele, equação (3.16),

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = \vec{0} \quad (\text{C.1})$$

Essa equação descreve o núcleo do vórtice como uma partícula, cuja dinâmica é governada pela equação de Thiele, que representa um equilíbrio de forças, já que a força resultante é o vetor nulo. A força $\vec{F}$ é uma força que deriva da função energia potencial do núcleo do vórtice,

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U \quad (\text{C.2})$$

A força $\vec{F}_G$ é a força girotrópica, que como o próprio nome sugere, essa é a força responsável pelo modo girotrópico, sem esse termo de força, o núcleo do vórtice não gira. A força girotrópica é escrita como o produto externo entre o girovetor e o vetor velocidade do núcleo do vórtice, ou seja,

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times \vec{V} \quad (\text{C.3})$$

O girovetor é um vetor fixo, que sempre aponta na direção perpendicular ao plano do disco, sendo dado por

$$\vec{G} = -G \hat{z} \quad , \quad G \propto p = \pm 1 \quad (\text{C.4})$$

em que G é uma constante é proporcional à polaridade do núcleo do vórtice. Devido ao sinal negativo, o girovetor sempre aponta no sentido oposto ao da polaridade. Ressalta-se que o girovetor é um vetor constante, uma vez especificada a polaridade do vórtice, ela não muda. Em outras palavras, a equação de Thiele não descreve a reversão da polaridade, porque na sua formulação foi suposto que o estado do vórtice não muda, o vórtice é caracterizado por dois parâmetros, (p, q) , ou seja, a polaridade e a quiralidade. A última força na equação de Thiele, é conhecida como força de “*damping*”, ou seja, uma força de amortecimento,

$$\vec{F}_D = -D \vec{V} \quad , \quad D \propto \alpha_{LLG} \quad (C.5)$$

A força $\vec{F}_D$ corresponde a uma força de atrito, uma vez que ela sempre se opõe ao sentido da velocidade. A constante D é proporcional ao parâmetro de damping da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert. Na verdade, a equação de Thiele foi deduzida a partir dessa equação.

A energia potencial do vórtice magnético pode incluir vários termos de energia, os termos comuns são

$$U(\vec{X}) = \left[U(\vec{0}) + \frac{k}{2} |\vec{X}|^2 \right]_{\text{oscilador harmônico}} + \left[-\mu [\hat{z} \times \vec{B}] \cdot \vec{X} \right]_{\text{energia Zeeman}} + \dots \quad (C.6)$$

O primeiro termo de energia corresponde a energia potencial de um oscilador harmônico, ou seja, ele está relacionado com o deslocamento do núcleo do vórtice da sua posição de equilíbrio, a energia é mínima quando ele se encontra nesta posição. Devido a simetria do disco, temos um potencial do tipo central. A constante k é depende do raio e da espessura do disco, ela análogo uma constante elástica da lei de Hooke. O segundo termo de energia descreve a interação do vórtice com um campo magnético externo, portanto corresponde a um termo de energia Zeeman. A constante é proporcional à quiralidade do vórtice, $\mu \propto q = \pm 1$. O núcleo do vórtice só é deslocado da sua posição de equilíbrio se o campo for aplicado no plano do disco. O modo girotrópico pode ser excitado com um campo magnético constante, e ele for mantido ligado, o núcleo do vórtice gira ou espirala em torno de um ponto crítico que depende da quiralidade do vórtice e também do campo, as coordenadas desse ponto crítico são $\vec{X}_c = \frac{\mu}{k}(-B_y; B_x)$, veja a equação (3.48). Na ausência de uma campo externo, esse ponto crítico corresponde à origem,

$\vec{X}_c = (0; 0)$, ou seja, centro geométrico do disco corresponde à posição de equilíbrio.

Para analisar a dinâmica do núcleo do vórtice, não é necessário que um campo externo seja mantido ligado, é mais comum excitar o modo girotrópico com um pulso de campo, ou seja, uma vez que o núcleo do vórtice é deslocado da sua posição de equilíbrio e descreve uma trajetória girotrópica em torno do centro do disco. O sentido do giro do núcleo do vórtice depende unicamente da sua polaridade, se $p = +1$ a trajetória girotrópica é descrita no sentido anti-horário, e o no sentido horário se $p = -1$.

Uma vez que um campo magnético independente do tempo não modifica a frequência natural de oscilação de um sistema, vamos ignorar o termo de energia Zeeman. Neste caso, a energia potencial do núcleo do vórtice, equação (C.6) é dada simplesmente por ¹

$$U(\vec{X}) = U(\vec{0}) + \frac{k}{2} |\vec{X}|^2 \quad (\text{C.7})$$

Devido a simetria do sistema, é conveniente introduzir coordenadas cilíndricas,

$$r^2 = X_1^2 + X_2^2 \quad (\text{C.8})$$

e

$$\tan \theta = \frac{X_2}{X_1} \quad (\text{C.9})$$

Assim a equação (C.7), torna-se

$$U(r) = U(0) + \frac{k}{2} r^2 \quad (\text{C.10})$$

Calculando o negativo do gradiente, obtém-se

$$\vec{F}_k = -\vec{\nabla}U = -\hat{r} \frac{\partial U}{\partial r} = -\hat{r} k r \quad (\text{C.11})$$

Observa-se que a essa força sempre aponta para o centro do disco, ou seja, ela é radial para dentro. Trata-se de uma força restauradora do tipo central, que apresenta um carácter desmagnetizante, ou seja, ela tende a trazer o núcleo do vórtice de volta para a sua posição de equilíbrio.

¹ Uma energia potencial de interação vórtice-impureza poderia ser introduzida na expressão (C.6).

Se o nanodisco apresenta uma distribuição de impurezas magnéticas, e sendo essa distribuição radialmente simétrica (um anel de impurezas), o núcleo do vórtice experimenta uma força adicional, que também apresenta um caráter do tipo central, porém esse campo de força só existe na vizinhança do anel. Assim, a força $\vec{F}_a$ se acopla à força desmagnetizante $\vec{F}_k$, gerando uma força resultante

$$\vec{F} = \vec{F}_k + \vec{F}_a \quad (\text{C.12})$$

uma vez a interação núcleo do vórtice-impureza é uma interação de curto-alcance, o termo de força dominante é a força $\vec{F}_k$, ou seja, $|\vec{F}| \approx |\vec{F}_k|$, pois $|\vec{F}_a| \ll |\vec{F}_k|$.

A força devido ao anel pode ser radial para dentro ou radial para fora,

$$\vec{F}_a = \pm \hat{r} \Delta k r \quad (\text{C.13})$$

uma vez que $|\vec{F}_a| \ll |\vec{F}_k|$, o módulo da força resultante pode aumentar $|\vec{F}| \gtrsim |\vec{F}_k|$ ou diminuir $|\vec{F}| \lesssim |\vec{F}_k|$, porém o sentido da força $\vec{F}$ não muda, ou seja, a força desmagnetizante efetiva continua apontando para o centro do disco. Em outras palavras, o campo de força desmagnetizante é modificado localmente, para pontos distantes do anel de impurezas magnéticas, o módulo dos vetores força não é modificado.

Assim, substituindo os componentes $\vec{F}_k$ e $\vec{F}_a$ na equação (C.12) temos que

$$\vec{F} = (-\hat{r} k r) + (\pm \hat{r} \Delta k r)$$

$$\vec{F} = -\hat{r} (k \mp \Delta k) r$$

Tal situação pode ser vista como um acréscimo ou decréscimo da constante elástica k . Então, podemos definir uma constante elástica efetiva,

$$k' = k \pm \Delta k \quad (\text{C.14})$$

Ressalta-se que a variação do parâmetro k só ocorre nas proximidades do anel, ou seja, a presença do anel modifica localmente as propriedades magnéticas do disco. A variação local das propriedades magnéticas do meio pode ser realizada distribuindo-se impurezas magnéticas

ao redor do centro do disco. Essas impurezas magnéticas a qual nos referimos são caracterizadas por uma variação local da constante de troca J'/J . Um anel do tipo atrativa é definido por uma distribuição circular de impurezas que apresentam uma redução local na constante de troca ($J' < J$), por outro lado, se a distribuição circular de impurezas forem caracterizadas por um aumento local na constante de troca ($J' > J$) o anel apresenta um caráter repulsivo.

Na figura (C.1) tem-se uma representação esquemática para o campo de forças devido a um anel de impurezas magnéticas. Quando o núcleo do vórtice gira **dentro do anel**, vemos que se o anel for constituído por impurezas do tipo atrativa, então a força devido ao anel é anti-paralela à força desmagnetizante, $\vec{F}_a = +\hat{r} \Delta k r$, ou seja, ela é radial para fora. Por outro lado, se o anel for do tipo repulsivo, então a força devido ao anel é paralela à força desmagnetizante, $\vec{F}_a = -\hat{r} \Delta k r$, ou seja, ela é radial para fora. Note que para o caso em que o núcleo do vórtice gira **fora do anel** a situação descrita acima se inverte completamente. E, por esse motivo vamos discutir apenas o caso em que o núcleo do vórtice descreve a trajetória girotrópica dentro do anel, neste caso, o efeito de um anel atrativo, ($J' < J$) é diminuir a constante elástica k , ou seja, ($k' < k$) assim (“mola” fica mais “mole”). Por outro lado, um anel repulsivo, ($J' > J$), faz com que a constante elástica seja aumentada, ($k' > k$), ou seja, (“mola” fica mais “dura”). Com os termos “mais mole” ou “mais duro” deve se entender que é “mais fácil” ou “mais difícil” alongar ou comprimir a mola. Assim, em relação a um nanodisco sem o anel de impurezas, é mais fácil deslocar o núcleo do vórtice da sua posição de equilíbrio num nanodisco com um anel atrativo, e mais difícil, no caso do anel ser repulsivo. É interessante observar que um anel atrativo tende a aumentar o raio da circunferência girotrópica, enquanto que um anel repulsivo tende a diminuí-la. Supondo que a velocidade é a mesma para os dois tipos de anel, usando a relação de frequência angular, que é inversamente proporcional ao raio, ou seja, $\omega = \frac{v}{r}$, vemos que um anel atrativo tende a aumentar o raio girotrópico, assim a frequência diminui. Já no caso, do anel repulsivo, o raio diminui e a frequência aumenta.

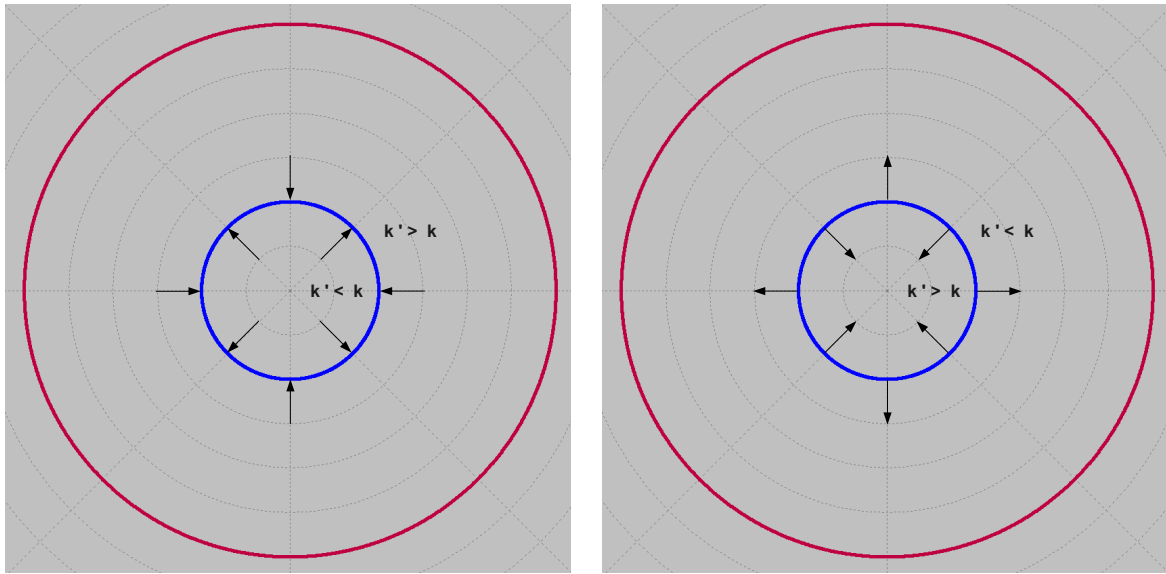
(a) Anel atrativo : $J' < J$ (b) Anel repulsivo: $J' > J$

Figura C.1 – Representação esquemática do campo de forças devido a um anel de impurezas, $\vec{F}_a = \pm \hat{r} \Delta k r$, que atua sobre o núcleo do vórtice, quando este se encontra dentro e fora do anel, a circunferência em azul. A circunferência em vermelho representa a fronteira do nanodisco. A força desmagnetizante sempre aponta para o centro do disco, $\vec{F}_k = -\hat{r} k r$, essa força não está representada nesta figura. A força desmagnetizante efetiva é $\vec{F} = -\hat{r} k' r = \vec{F}_k + \vec{F}_a$, em que $\vec{F}_k$ é o componente dominante, uma vez que $|\vec{F}_a| \ll |\vec{F}_k|$. Dessa forma, dependendo do tipo do anel (que pode ser constituído por impurezas magnéticas do tipo atrativa ou do tipo repulsiva) e também da região onde o núcleo do vórtice descreve a trajetória girotrópica (dentro ou fora do anel) a constante elástica efetiva k' pode ser aumentada ($k' > k$) ou diminuída ($k' < k$). Para um nanodisco sem o anel, a equação de Thiele prevê que a frequência girotrópica é proporcional à constante elástica ($\omega \propto k$). Assim, num nanodisco com o anel de impurezas magnéticas, a frequência girotrópica pode ser aumentada ou diminuída uma vez que ($\omega' \propto k'$). Portanto, num nanodisco contendo o anel de impurezas magnéticas é possível modular a frequência girotrópica.

A equação de Thiele para o núcleo do vórtice num nanodisco prevê que a **frequência girotrópica é diretamente proporcional a constante elástica**, veja por exemplo, a equação (3.94). Um anel de impurezas magnéticas pode ser usado para proporcionar a variação local do parâmetro k , vimos que dependendo do tipo do anel e também da região onde o núcleo do vórtice descreve a trajetória girotrópica o parâmetro k' efetiva pode ser aumentado ou diminuído. Portanto, num nanodisco contendo o anel de impurezas magnética é possível promover a modulação da frequência girotrópica, ou seja, o anel permite fazer um ajuste fino na frequência girotrópica.

ANEXO A – TRABALHOS PUBLICADOS

Abaixo anexamos os artigos publicados pelo grupo e que estão relacionados a essa tese de doutorado.

Vortex core scattering and pinning by impurities in nanomagnets

D. Toscano,^{1,a)} S. A. Leonel,^{1,b)} R. A. Dias,^{1,c)} P. Z. Coura,^{1,d)} and B. V. Costa^{2,e)}¹*Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330 Juiz de Fora, MG, Brazil*²*Departamento de Física, Laboratório de Simulação, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, 30123-970 Belo Horizonte, MG, Brazil*

(Received 17 December 2010; accepted 5 March 2011; published online 8 April 2011)

The dynamical behavior of a magnetic nanoparticle contaminated by pointlike impurities is studied by using a spin dynamics numerical simulation. It was observed that the impurities can behave both as pinning (attractive) and as scattering (repulsive) sites. A Gaussian profile was observed for the interaction potential energy ranging up to two lattice parameters. Using the known values of the parameters for Permalloy-79 we have calculated the interaction energy of the vortex core with a single defect. We estimated the interaction range as approximately 10nm. Both results agree quite well with experimental measurements. © 2011 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3573518]

Recently it was discovered that some magnetic nanostructures can present interesting properties that may lead to building efficient new storage devices.^{1–4} In a magnetic nanodevice like a nanodisk, the competition between the magnetostatic energy and the exchange interaction is responsible for the formation of a magnetic vortex in the ground state.⁵ The static vortex has a planar configuration parallel to the plane of the disk, except at the center of the vortex where the magnetic moments point out in a direction perpendicular to the disk plane, the z direction, which can be up or down ($\pm z$ respectively).^{6,7} The system is twofold degenerated, since configurations up and down have the same energy.⁸ The manipulation of the vortex and a way to control the core magnetization are subjects of paramount importance, since the Z_2 symmetry of the vortex core can be used as a bit in storage devices. It was observed in numerical simulations that switching can be induced by vortex–hole interaction⁹ or by the application of a time-dependent external magnetic field which induces a vortex gyrotropic motion.^{10,11}

The interaction of the vortex core with lithographically inserted defects has been the subject of intense investigation in the last few years.^{12,13} For example, in Ref. 14 the authors showed that vortices are attracted and pinned by nonmagnetic impurities. It is known that even in pure samples, such as nanodisks made of Permalloy, structural defects are distributed randomly through the material. In Ref. 15, the authors found a density of defects of up to $\approx 2 \times 10^{11}/\text{cm}^2$ for the pinning sites in Permalloy nanodisks, which affect the vortex dynamics. In Ref. 16 the authors used Lorentz transmission electron microscopy to investigate the pinning behavior of magnetic vortices. In a recent work, Compton *et al.*¹⁷ used time-resolved Kerr microscopy to study the vortex-core dynamics in individual magnetic disks. They observed

fluctuations in the frequency of the gyrotropic mode in nanodisks of Permalloy. They argued that the fluctuations were due to a distribution of nanoscale defects pinning the vortex core. The authors estimated the average interaction energy of the vortex core with a single nanoscale defect to be approximately 2eV. In Ref. 18 the authors discussed two possible types of pointlike defects acting as pinning or scattering sites. The question pointed out was: It is known that nonmagnetic impurities act as pinning sites, but what could act as a scattering site? In this work we use spin dynamics simulations to study a model for both magnetic pinning and scattering sites. In the model we developed the interaction between the magnetic sites in the nanodisk and the defects depends only on the exchange energy. Following Ref. 19, we consider the magnetic nanodisks modeled by magnetic moments with dipole–dipole and exchange interactions. We can write a model Hamiltonian for the nanodisk with magnetic impurities using a pseudospin language as

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq i', j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i' j \rangle} \vec{S}_{i'} \cdot \vec{S}_j + \frac{D}{2J} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_{i \cdot ij} \times \vec{S}_{j \cdot ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\}. \quad (1)$$

Here the sites i and j are sites of the pure sample, i' are for sites that contain impurities; $\vec{S}_i$, $\vec{S}_j$, and $\vec{S}_{i'}$ are dimensionless vectors with fixed length representing classical spins located in the sites i , j , and i' and satisfying the condition $|\vec{S}| = 1$; J (in units of energy) is the exchange coupling constant between $\vec{S}_i$ and $\vec{S}_j$; J' is the exchange coupling constant between $\vec{S}_{i'}$ and $\vec{S}_j$; $r_{i,j}$ is the distance between sites i and j measured in units of length; $\hat{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$; and D is the dipole strength. The parameter a is the lattice parameter defined as the distance between the first neighbors sites in the lattice. The sums in the first and second terms are over nearest neighbors. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = JH$, where H is the dimensionless term in curly brackets. We

^{a)}Electronic address: danilotoscano@yahoo.com.br.^{b)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic address: sidiney@fisica.ufjf.br.^{c)}Electronic address: radias@fisica.ufjf.br.^{d)}Electronic address: pablo@fisica.ufjf.br.^{e)}Electronic address: bvc@fisica.ufmg.br.

follow Ref. 20 to build the simulated nanodisk. The dynamics of the system is followed by solving numerically the discrete version of the Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) equation^{21,22} given by

$$\frac{d\vec{S}_i}{d\tau} = -\left[\vec{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i}\right] + \alpha \left[\vec{S}_i \times \vec{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i}\right], \quad (2)$$

where τ is the dimensionless simulation time. The Hamiltonian time, t , measured in seconds is obtained by $t = \tau/\omega_0$ (Ref. 24). For Permalloy-79, $\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$.²⁰ The equations of motion were integrated forward by using a fourth-order predictor-corrector scheme with a damping parameter $\alpha = 0.01$ and time step $d\tau = 0.01$ ($dt = 4.7 \times 10^{-14} \text{ s}$ for Permalloy-79). The spin dynamics simulations were done in a nanodisk with diameter $d = 25a$ and thickness $l = a$. Initially the vortex was set at the center of the nanodisk in the presence of a magnetic impurity two sites away. The simulations were performed with no cutoff in the dipolar energy term. The estimated value for the ratio (D/J) for Permalloy-79, $(D/J) = 0.0708$, was used.²⁰ We observed that if $J' < J$ the vortex core moves toward the magnetic impurity site, indicating an effective attractive potential of interaction between the vortex and the magnetic impurity, as shown in Fig. 1 (see supplementary material²³). If $J' > J$ the vortex core moves away of the magnetic impurity site, indicating an effective repulsive potential of interaction between the vortex and the magnetic impurity, as shown in Fig. 2 (see supplementary material²³). We have also calculated numerically the interaction energy per site (E_{int}) between the vortex core and the magnetic impurity as a function of the relative distance (r/a) between them. The vortex core was put at the center of a nano-disk with diameter $d = 30a$ as shown in Fig. 3. A Gaussian profile for the interaction energy, $E_{\text{int}}(r) = E_0 \exp[-0.5(r/\sigma)^2]$, was observed for all values of the ratio J'/J . Here $E_0 = E_{\text{int}}(r = 0)$ is the interaction energy when the center of the vortex coincides with the impurity site. From Fig. 3 we see that if $J' < J$ the potential is attractive, if $J' > J$ the potential is repulsive. We also observed that the interaction energy exhibits a maximum (if repulsive) or a minimum (if attractive) at $r = 0$, decaying rapidly to zero for $|r| > 2a$. The model for describing structural pointlike defects in nanoscaled ferromagnetic materials presented in Ref. 18 agrees very well with the obtained

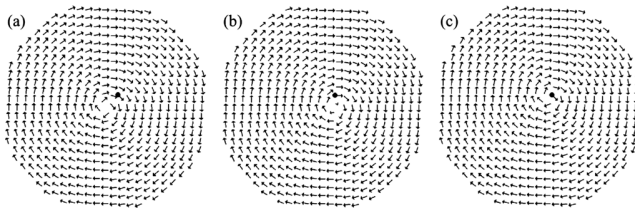


FIG. 1. Snapshots of the dynamical behavior of a vortex core near an attractive magnetic impurity ($J' < J$). (a) A typical initial configuration with the vortex core at the center of the nanodisk. The black circle symbol represents a magnetic impurity located two sites away from the center. (b) Configuration after 120 simulating time steps. (c) Configuration after 350 time steps showing the vortex core at the impurity site. The simulation for later times shows that this is an equilibrium position. See the supplementary material²³ for a video of the vortex core motion in the presence of a magnetic attractive impurity (enhanced online).

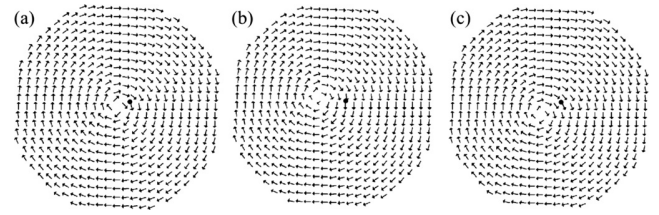


FIG. 2. Snapshots for the dynamical behavior of a vortex core near a repulsive magnetic impurity ($J' > J$). Symbol is the same as in Fig. 1. (a) A typical initial configuration with the vortex core located at the center of the nanodisk in the presence of a magnetic impurity. (b) Configuration after 300 simulation time steps. (c) Configuration after 600 simulation time steps showing the equilibrium position of the vortex core four sites away from the impurity. See the supplementary material²³ for a video of the vortex core motion in the presence of a magnetic repulsive impurity (enhanced online).

gaussian profile. In a micromagnetic approach the nanodisks can be partitioned into cubical working cells of dimensions $a \times a \times a$. Each site represents the center of a working cell. As in Ref. 20 we consider $a = 5 \text{ nm}$ and the known exchange stiffness $A = 8.125 \times 10^7 \text{ eV/m}$ for Permalloy-79-made samples. In the micromagnetic simulations J is considered as the effective exchange coupling between neighboring cells given by $J = 2Aa = 8.125 \times 10^{-1} \text{ eV}$. An estimate of the range of the interaction gives $|r| \approx 2a \approx 10 \text{ nm}$, which is in close agreement with the experimental results in Refs. 15 and 16. An estimate of the interaction energy (E_0) of the vortex core with a single pinning impurity or defect can be done as follows. Our model of nanodisks had approximately $N = 717$ sites (cells). For $J' = 0.1J$, $E_0 = -4.18 \times 10^{-3} \times 717 \times 8.125 \times 10^{-1} \text{ eV} = -2.43 \text{ eV}$ and for $J' = 0.5J$, $E_0 = -1.35 \text{ eV}$. These energy values are of the same order of magnitude as those estimated in Ref. 17 (approximately 2 eV). Our results indicate that the possible origins of the pinning and scattering defects in thin films could be the local reduction or increase in the exchange constant respectively, caused by a local nanoscaled structural

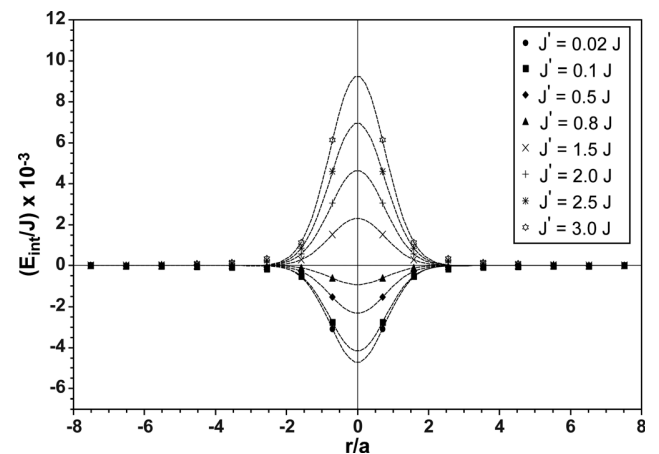


FIG. 3. Interaction energy per site (E_{int}/J) as a function of the relative distance, (r/a), between the vortex core and the magnetic impurity considering the vortex core located at the center of the nanodisk ($r = 0$). The dotted lines are adjustments of the Gaussian $E_{\text{int}}/J = (E_0/J) \exp[-0.5(r/\sigma)^2]$ for several values of J'/J as shown in the inset. The corresponding values for $E_0/J (\times 10^3)$ are: $-4.70, -4.18, -2.32, -0.93, 2.32, 4.63, 6.96, 9.29$, and $\sigma = 0.77a$ for all J'/J .

deformation. We believe that not all structural defects produced in the samples are pinning defects, structural scattering defects can also be produced and certainly will affect the gyrotropic frequency as pointed out in Ref. 17. It should be very interesting to have more investigation on this subject so that one could validate (or not) our findings.

In summary, we have used spin dynamics simulations to study a model for magnetic pinning and scattering sites. We found that if the coupling between the defect with the magnetic atoms (J') in the crystal is smaller than the coupling between the magnetic atoms, the interaction potential between the vortex and the impurity is attractive. On the other hand if ($J' > J$) a repulsion is observed. Using the known values of the parameters for Permalloy-79 we have found that our results are in very good agreement with experimental estimate. We observe that a potential technological application can be the use of magnetic impurities lithographically inserted in magnetic nanodisks to control the gyrotropic mode and the core magnetization.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq and FAPESP (Brazilian agencies). Numerical work was done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

- ¹K. Y. Guslienko, R. H. Heredero, and O. Chubykalo-Fesenko, *Phys. Rev. B* **82**, 014402 (2010).
- ²Y. Gaididei, V. P. Kravchuk, D. D. Sheka, and F. G. Mertens, *Phys. Rev. B* **81**, 094431 (2010).
- ³R. P. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, and D. M. Tricker, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1042 (1999).

- ⁴T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, and T. Ono, *Science* **289**, 930-932 (2000).
- ⁵N. A. Usov and S. E. Peschany, *J. Magn. Magn. Mater.* **118**, L290 (1993).
- ⁶A. Hubert, and R. Schafer, *Magnetic Domains* (Springer, Berlin, 1998).
- ⁷J. E. R. Costa and B. V. Costa, *Phys. Rev. B* **54**, 994 (1996); J. E. R. Costa, B. V. Costa, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **57**, 11510 (1998).
- ⁸B. V. Costa, *Braz. J. Phys.* **41**, 1 (2011).
- ⁹R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, N. M. Oliveira-Neto, S. A. Leonel, and P. Z. Coura, *Phys. Rev. B* **78**, 054423 (2008).
- ¹⁰K. Y. Guslienko, B. A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, and K. Fukamichi, *J. Appl. Phys.* **91**, 8037 (2002).
- ¹¹J. P. Park, P. Eames, D. M. Engebretson, J. Berezovsky, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **67**, 020402 (2003).
- ¹²M. Rahm, J. Stahl, and D. Weiss, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 182107 (2005).
- ¹³A. R. Pereira, A. R. Moura, W. A. Moura-Melo, D. F. Carneiro, S. A. Leonel, and P. Z. Coura, *J. Appl. Phys.* **101**, 034310 (2007).
- ¹⁴A. R. Pereira, L. A. S. Mól, S. A. Leonel, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *Phys. Rev. B* **68**, 132409 (2003).
- ¹⁵R. L. Compton and P. A. Crowell, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 137202 (2006).
- ¹⁶T. Uhlig, M. Rahm, C. Dietrich, R. Hollinger, M. Heumann, D. Weiss, and J. Zweck, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237205 (2005).
- ¹⁷R. L. Compton, T. Y. Chen, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **81**, 144412 (2010).
- ¹⁸F. A. Apolonio, W. A. Moura-Melo, F. P. Crisafuli, A. R. Pereira, and R. L. Silva, *J. Appl. Phys.* **106**, 084320 (2009).
- ¹⁹J. C. S. Rocha, P. Z. Coura, S. A. Leonel, R. A. Dias, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **107**, 053903 (2010).
- ²⁰D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, J.C.S. Rocha, and B.V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 014301 (2011).
- ²¹Y. Gaididei, V. P. Kravchuk, and D. D. Sheka, *Int. J. Quantum Chem.* **110**, 83 (2010).
- ²²L. D. Landau and E.M. Lifshitz, "On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies", *Phys. Z. Sowjetunion*, **8**, pp. 153 (1935); also in *L. D. Landau, Collected Papers*, edited by D. ter Haar (Gordon and Breach, New York, 1967), p. 101.
- ²³See supplementary material at E-JAPIAU-109-067107 for videos of the vortex core motion in the presence of a magnetic attractive/repulsive impurity.
- ²⁴L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, and J. M. D. Coey, *Phys. Rev. B* **77**, 104431 (2008).



The influence of magnetic impurities in the vortex core dynamics in magnetic nano-disks

J.H. Silva^a, D. Toscano^a, F. Sato^a, P.Z. Coura^a, B.V. Costa^b, S.A. Leonel^{a,*}

^a Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, ICE, UFJF, 36036-330 Juiz de Fora, MG, Brazil

^b Departamento de Física, Laboratório de Simulação, ICEX, UFMG, 30123-970 Belo Horizonte, MG, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 15 February 2012

Received in revised form

7 May 2012

Available online 23 May 2012

Keywords:

Magnetic nano-disk

Spin dynamic

Heisenberg

Dipolar interaction

Gyrotropic frequency

ABSTRACT

In this work we have used spin dynamics simulations to study the gyrotropic frequency behavior in nano-disks of Permalloy with magnetic impurities. We consider the effect of attractive impurity and repulsive impurity placed near the vortex core gyrotropic trajectory. We observed that the gyrotropic frequency is affected by the presence of impurity. The gyrotropic frequency shift depends on the relative position between the impurity and the vortex core gyrotropic trajectory and if impurity is attractive or repulsive. Our results agree with the analytical model and with experimental behavior for the gyrotropic frequency shown in the literature.

© 2012 Elsevier B.V. All rights reserved.

The magnetic devices can be used in many technological applications, for example in magnetic random access memories (MRAMs), digital reading heads, position sensors, devices for measurements of currents to applications in medicine in cancer treatment for example [1–6]. It was discovered recently that some magnetic nano-structures can present interesting properties that may lead to build efficient new storage devices [7–10]. Magnetic nano-device like a nano-disk shows a magnetic vortex configuration in ground state. The competition between magnetostatic energy and the exchange interaction is responsible for the formation of this magnetic vortex configuration in nano-disks [11]. The study of the dynamics of the vortex and a way to control the core magnetization is of paramount importance since the Z_2 symmetry of the vortex core [12,13] can be used as a bit in store devices. In numerical simulations it was observed that switching can be induced by vortex–hole interaction [14] or by the application of a time dependent external magnetic field which induces a vortex gyrotropic motion [15,16].

In the last few years the interaction of the vortex core with defects and impurities in magnetic materials has been the subject of intense investigation [17–19]. Even in pure samples, such as nano-disks made of Permalloy, structural defects are distributed randomly through the material. As example, the density of defects

can be up to $\approx 2 \times 10^{11}/\text{cm}^2$ for the pinning sites in Permalloy nanodisks that affect the vortex dynamics [20]. The pinning behavior of magnetic vortices was investigated by using Lorentz transmission electron microscopy [21]. Recently, the vortex core dynamics in individual magnetic disks was investigated using time-resolved Kerr microscopy [22]; it was observed fluctuations in the frequency of the gyrotropic mode in nano-disks of Permalloy. The authors argued that the fluctuations were due to a distribution of nanoscale defects pinning the vortex core. In a recent work [23] we showed the dynamical behavior of a magnetic nano-disk contaminated by pointlike impurities, using micromagnetic approach [24]. In this approach the nano-disk is partitioned into cubical working cells containing many atoms. Each working cell has dimensions $a \times a \times a$ and volume $v_{\text{cell}} = a^3$, where a is greater than unit cell parameter a_0 . The spins in a working cell can be considered mostly aligned, hence the dipole moment in a cell has a fixed length μ_{cell} equal to the saturation magnetization times the cell volume, $\mu_{\text{cell}} = M_s v_{\text{cell}}$ [25]. In our model of nano-disk each site i will now represent the center of a working cell and an impurity is a set of spins located in a particular working cell. We define a unit vector $\hat{m}_i = \vec{\mu}_i / \mu_{\text{cell}}$ located in each site i , where $\vec{\mu}_i$ is the dipole moment of the working cell. The interaction between the magnetic cells in the nano-disk and the defects was considered depending only on the exchange energy. We observed that the magnetic impurities can behave both as apinning (attractive) and scattering (repulsive) cells. Using the known values of the parameters for Permalloy-79 we have calculated the interaction energy of the vortex core with a single defect and estimated the interaction range as approximately 10 nm. Both results agree quite well

* Corresponding author. Tel.: +55 32 3218 6020; fax: +55 32 3227 33121.

E-mail addresses: jhsilva37@yahoo.com.br (J.H. Silva), danielotosciano@yahoo.com.br (D. Toscano), sjfsato@fisica.ufjf.br (F. Sato), pablo@fisica.ufjf.br (P.Z. Coura), bvc@fisica.ufmg.br (B.V. Costa), sidiney@fisica.ufjf.br (S.A. Leonel).

with experimental measurements of Ref. [22]. Our results [23] indicate that the possible origins of the pinning and scattering defects in thin films can be the local reduction or increase in the exchange constant respectively, caused by a local nanoscaled structural deformation during the nanofabrication process. We believe that not all structural defects produced in the samples are pinning defects, structural scattering defects can also be produced and certainly will affect the gyrotropic frequency as pointed out in Ref. [22]. From the experimental point of view, the magnetic impurities may also be lithographically inserted in magnetic nano-disks [21].

In this work we use the model proposed in Ref. [23] and spin dynamics simulations to study the influence of magnetic impurities in the frequency of the gyrotropic mode in nano-disks of Permalloy.

We consider the magnetic nano-disks modeled by magnetic moments with dipole–dipole and exchange interactions [26] and we follow Ref. [27] to build the simulated nano-disks. As in Ref. [23], using a pseudospin language, we can write a model Hamiltonian for the nano-disk with magnetic impurities and under the action of an external magnetic field as

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i' j' \rangle} \vec{S}_{i'} \cdot \vec{S}_{j'} \right. \\ \left. + \frac{D}{2J} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{b}_i \right\}. \quad (1)$$

The sites i and j are sites without impurities in the sample. The impurities are located in the sites i' of the sample. Here r_{ij} , measured in units of length, is the distance between sites i and j , $\hat{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ and the parameter a is the lattice parameter defined as the distance between the first neighbors sites in lattice. The vectors $\vec{S}_i$, $\vec{S}_j$ and $\vec{S}_{i'}$ located in the sites i , j and i' satisfying the condition $|\vec{S}| = 1$. These vectors are dimensionless, analogous to vectors $\hat{m}_i$, $\hat{m}_j$ and $\hat{m}_{i'}$ respectively, and represent classical spins. The exchange coupling constant between $\vec{S}_i$ and $\vec{S}_j$ is given by J (in units of energy) and the exchange coupling constant between $\vec{S}_{i'}$ (impurities) and $\vec{S}_j$ is given by J' . The dipole strength is given by D (in units of energy). The sums in the first and second terms are over first neighbors and in the third term the sum runs over the entire lattice. The sum in the last term is the contribution of the Zeeman energy. The $\vec{b}_i$ is the dimensionless simulation magnetic field and the external applied field, measured in Tesla

(T), is given by $\vec{B}_i^{\text{ext}} = \mu_0 M_s \vec{b}_i$ [25] where M_s is the saturation magnetization of the material. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where $\mathcal{H}$ is the dimensionless term in curly brackets. The dynamics of the system is followed by solving numerically the discrete version of the Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) equation [28,29] given by

$$\frac{d\vec{S}_i}{d\tau} = - \left[\vec{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i} \right] + \alpha \left[\vec{S}_i \times \vec{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i} \right], \quad (2)$$

where τ is the dimensionless simulation time. The Hamiltonian time t , measured in seconds, is obtained by [30] $t = \tau/\omega_0$ ($\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ for Permalloy-79 [27]). We used the fourth-order predictor–corrector method and time step $d\tau = 0.01$ to integrate the equations of motion (this leads to a $dt = 4.7 \times 10^{-14} \text{ s}$ for Permalloy-79). As the damping affects only the amplitude of the gyrotropic mode and does not affect the frequency gyrotropic, we use $\alpha = 0.0$. In our simulations we consider no cut-off in the dipolar interaction and used $(D/J) = 0.0708$ for Permalloy-79 [27].

In our simulations to study the influence of magnetic impurities in the frequency of the gyrotropic mode in nano-disks, we consider a magnetic impurity near the vortex core gyrotropic trajectory (of radius r_{mode} shown schematically in Fig. 1). We studied the effect of attractive impurity ($J' < J$) and repulsive impurity ($J' > J$) [23] placed at a distance r_{imp} from the center of the nano-disk. We consider the possibilities where $r_{\text{imp}} < r_{\text{mode}}$ and $r_{\text{imp}} > r_{\text{mode}}$ (see Fig. 1). To excite the gyrotropic mode around the center of the nano-disk we consider the application of a pulse of in-plane magnetic field B_i^{ext} of magnitude 5 mT [15,16]. This value ensures that the gyrotropic mode is excited without destroying the vortex state. We use micromagnetic approach with the values of the parameters of Permalloy-79, as described in Refs. [23,27]. All simulations were done considering nano-disks with thickness $l = 10 \text{ nm}$ and diameter $d = 125 \text{ nm}$, 145 nm , 175 nm , 195 nm , 225 nm and 275 nm . For $d < 125 \text{ nm}$ the nano-disks does not show the magnetic vortex configuration in the ground state [27].

We studied four situations: (1) $r_{\text{imp}} < r_{\text{mode}}$ and $J' < J$, (2) $r_{\text{imp}} < r_{\text{mode}}$ and $J' > J$, (3) $r_{\text{imp}} > r_{\text{mode}}$ and $J' < J$ and (4) $r_{\text{imp}} > r_{\text{mode}}$ and $J' > J$. We follow the procedure used in Ref. [14] for analysis of the gyrotropic frequency. In all situations we observed that the gyrotropic frequency is affected by the presence of impurity. The gyrotropic frequency shift is defined as $\Delta f = f_{\text{imp}} - f_{\text{pure}}$, where

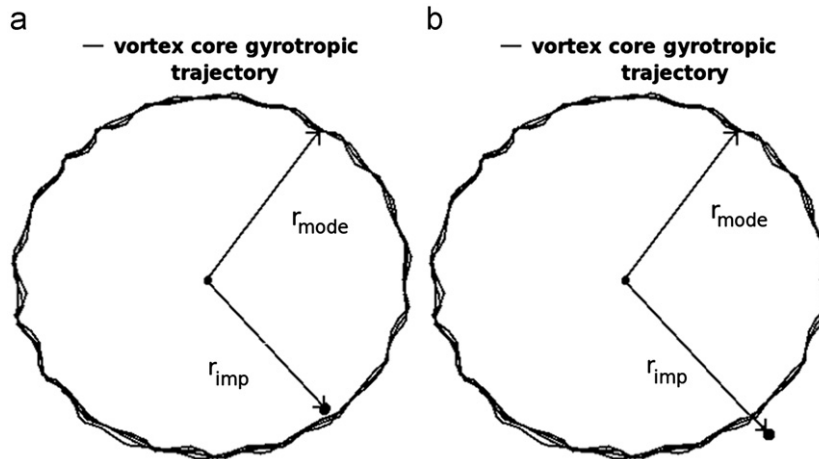


Fig. 1. Vortex core gyrotropic trajectory in a nano-disk with diameter $d = 225 \text{ nm}$ and thickness $l = 10 \text{ nm}$. The radius of the trajectory is $r_{\text{mode}} = 35 \text{ nm}$. (a) Schematic view of the relative position of the impurity in the nano-disk in the situation where $r_{\text{imp}} < r_{\text{mode}}$. (b) Schematic view of the relative position of the impurity in the nano-disk in the situation where $r_{\text{imp}} > r_{\text{mode}}$. The black circle represents a magnetic impurity located near the gyrotropic trajectory, satisfying the condition $|r_{\text{imp}} - r_{\text{mode}}| \approx 10 \text{ nm}$ [23].

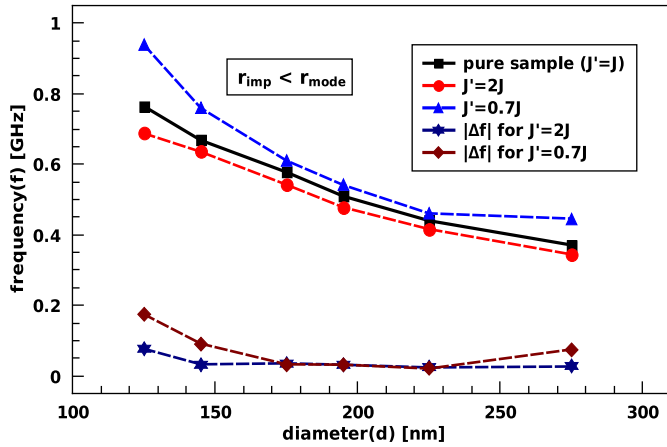


Fig. 2. Behavior of gyrotropic frequency as a function of the diameter of the nano-disks to the possibility $r_{imp} < r_{mode}$. Behavior is shown to nano-disks without impurity (square, $J' = J$, pure sample), to nano-disks with an attractive impurity (triangle, $J' = 0.7J$) and to nano-disks with a repulsive impurity (circle, $J' = 2J$). The modulus of the gyrotropic frequency shift $|\Delta f|$ is also shown (diamond for $J' = 0.7J$ and star for $J' = 2J$).

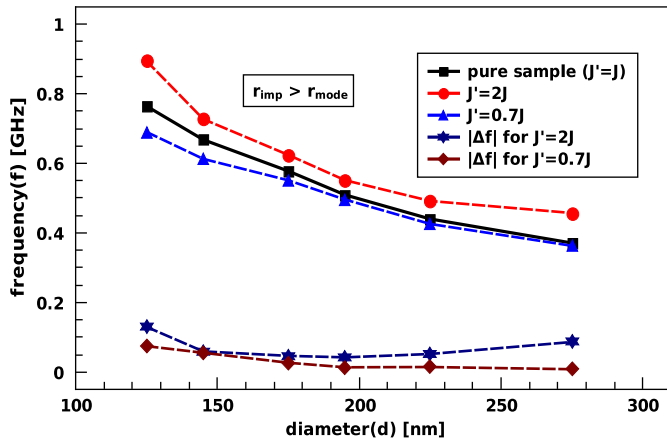


Fig. 3. Behavior of gyrotropic frequency as a function of the diameter of the nano-disks to the possibility $r_{imp} > r_{mode}$. Behavior is shown to nano-disks without impurity (square, $J' = J$, pure sample), to nano-disks with an attractive impurity (triangle, $J' = 0.7J$) and to nano-disks with a repulsive impurity (circle, $J' = 2J$). The modulus of the gyrotropic frequency shift $|\Delta f|$ is also shown (diamond for $J' = 0.7J$ and star for $J' = 2J$).

f_{imp} is the gyrotropic frequency in nano-disks in the presence of impurity and f_{pure} is the gyrotropic frequency in nano-disks without impurities (pure sample). Fig. 2 shows the behavior of the gyrotropic frequency as a function of the diameter of the nano-disks for situations (1) and (2), compared to the behavior of the gyrotropic frequency in nano-disks without impurities (pure sample). We observed that for $r_{imp} < r_{mode}$, if $J' < J$ the gyrotropic frequency increases and if $J' > J$ the gyrotropic frequency decreases. Our results for the situation (1) are in qualitative agreement with the experimental behavior of the gyrotropic frequency shown in Ref. [22]. Fig. 3 shows the behavior of the gyrotropic frequency as a function of the diameter of the nano-disks for situations (3) and (4). We observed that for $r_{imp} > r_{mode}$, if $J' < J$ the gyrotropic frequency decreases and if $J' > J$ the gyrotropic frequency increases. From Figs. 2 and 3 we see that the gyrotropic frequency shift $|\Delta f|$ in all situations can be considered independent of the diameter of the nano-disks, which also is in agreement with the experimental observation from Ref. [22]. In our model for magnetic impurities the $|\Delta f|$ depends on the ratio J'/J .

The vortex core dynamics are governed by the Thiele force equation [15,31,32]:

$$\vec{F}_k + \vec{F}_G + \vec{F}_D = \vec{F}(t) \quad (3)$$

where $\vec{F}_k$ is the restoring force that arises when the vortex core is displaced from the center of the nano-disks, $\vec{F}_G$ is the gyrotopropic force that arises due to the speed of the vortex core, $\vec{F}_D$ is the damping force and $\vec{F}(t)$ is the time-dependent driving force. As explained in Ref. [22] the restoring force can be given by $\vec{F}_k = -k\vec{R}$, where $\vec{R}$ is the vortex core displacement from the center of the nano-disks and the effective spring constant $k = k_M + \Delta k_{imp}$. The k_M is the contribution due to the magneto-static properties of the entire vortex and the Δk_{imp} refers to a contribution due to vortex core interaction with the impurity. Also, it was shown in Ref. [22] that $\Delta f \propto \Delta k_{imp}$. Based on this model, our results indicate that the presence of impurity in situations (1) and (4) makes $\Delta k_{imp} > 0$ increasing the gyrotropic frequency ($\Delta f > 0$) and the presence of impurity in situations (2) and (3) makes $\Delta k_{imp} < 0$ decreasing the gyrotropic frequency ($\Delta f < 0$).

In summary, we have used spin dynamics simulations to study the influence of magnetic impurities in the gyrotropic frequency in nano-disks of Permalloy. We studied the effect of attractive and repulsive impurity placed near the vortex core gyrotropic trajectory. We observed that in the four situations considered the frequency is affected by the presence of impurity. The gyrotropic frequency shift Δf depends on the relative position between the impurity and the vortex core gyrotropic trajectory and if impurity is attractive or repulsive. Our results agree with the analytical model and with experimental behavior for the gyrotropic frequency shown in Ref. [22]. A potential technological application can be the use of rings of magnetic impurities lithographically inserted in magnetic nano-disks to control the gyrotropic frequency and the core magnetization.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian Agencies). Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

References

- [1] E.E. Huber Jr., D.O. Smith, J.B. Goodenough, Journal of Applied Physics 29 (1958) 294.
- [2] S.-i. Iwasaki, Y. Nakamura, IEEE Transactions on Magnetics 13 (1977) 1272.
- [3] B. Heinrich, J.A.C. Bland, Ultrathin Magnetic Structures III – Fundamentals of Nanomagnetism, Springer, Berlin Heidelberg, New York, 2005.
- [4] B. Heinrich, J.A.C. Bland, Ultrathin Magnetic Structures IV – Applications of Nanomagnetism, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2005.
- [5] K.E. Scarberry, E.B. Dickerson, J.F. McDonald, Z.J. Zhang, Journal of the American Chemical Society 130 (2008) 10258.
- [6] D.H. Kim, E.A. Rozhkova, I.V. Ulasov, S.D. Bader, T. Rajh, M.S. Lesniak, V. Novosad, Nature Materials 9 (2010) 165.
- [7] K.Y. Guslienko, R.H. Heredero, O. Chubykalo-Fesenko, Physical Review B 82 (2010) 014402.
- [8] Y. Gaididei, V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, F.G. Mertens, Physical Review B 81 (2010) 094431.
- [9] R.P. Cowburn, D.K. Koltsov, A.O. Adeyeye, M.E. Welland, D.M. Tricker, Physical Review Letters 83 (1999) 1042.
- [10] T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, T. Ono, Science 289 (2000) 930–932.
- [11] N.A. Usov, S.E. Peschany, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 118 (1993) 290.
- [12] A. Hubert, R. Schafer, Magnetic Domains, Springer, Berlin, 1998.
- [13] J.E.R. Costa, B.V. Costa, Physical Review B 54 (1996) 994; J.E.R. Costa, B.V. Costa, D.P. Landau, Physical Review B 57 (1998) 11510.

- [14] R.L. Silva, R.C. Silva, A.R. Pereira, W.A. Moura-Melo, N.M. Oliveira-Neto, S.A. Leonel, P.Z. Coura, *Physical Review B* 78 (2008) 054423.
- [15] K.Y. Guslienko, B.A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, K. Fukamichi, *Journal of Applied Physics* 91 (2002) 8037.
- [16] J.P. Park, P. Eames, D.M. Engebretson, J. Berezovsky, P.A. Crowell, *Physical Review B* 67 (2003) 020402.
- [17] M. Rahm, J. Stahl, D. Weiss, *Applied Physics Letters* 87 (2005) 182107.
- [18] A.R. Pereira, A.R. Moura, W.A. Moura-Melo, D.F. Carneiro, S.A. Leonel, P.Z. Coura, *Journal of Applied Physics* 101 (2007) 034310.
- [19] A.R. Pereira, L.A.S. Mól, S.A. Leonel, P.Z. Coura, B.V. Costa, *Physical Review B* 68 (2003) 132409.
- [20] R.L. Compton, P.A. Crowell, *Physical Review Letters* 97 (2006) 137202.
- [21] T. Uhlig, M. Rahm, C. Dietrich, R. Hollinger, M. Heumann, D. Weiss, J. Zweck, *Physical Review Letters* 95 (2005) 237205.
- [22] R.L. Compton, T.Y. Chen, P.A. Crowell, *Physical Review B* 81 (2010) 144412.
- [23] D. Toscano, S.A. Leonel, R.A. Dias, P.Z. Coura, B.V. Costa, *Journal of Applied Physics* 109 (2011) 076104.
- [24] D. Suessa, J. Fidler, T. Schrefl, *Handbook of Magnetic Materials*, vol. 16, Elsevier, Amsterdam, 2006, p. 41.
- [25] G.M. Wysin, *Journal of Physics: Condensed Matter* 22 (2010) 376002.
- [26] J.C.S. Rocha, P.Z. Coura, S.A. Leonel, R.A. Dias, B.V. Costa, *Journal of Applied Physics* 107 (2010) 053903.
- [27] D. Toscano, S.A. Leonel, R.A. Dias, P.Z. Coura, J.C.S. Rocha, B.V. Costa, *Journal of Applied Physics* 109 (2011) 014301.
- [28] Y. Gaididei, V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, *International Journal of Quantum Chemistry* 110 (2010) 83.
- [29] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies, *Physik. Z. Sowjetunion*, 8 (1935) 153; L.D. Landau, in: D. ter Haar (Ed.), *Collected Papers*, Gordon and Breach, New York, 1967, p. 101.
- [30] L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, J.M.D. Coey, *Physical Review B* 77 (2008) 104431.
- [31] A.A. Thiele, *Physical Review Letters* 30 (1973) 230.
- [32] D.L. Huber, *Physical Review B* 26 (1982) 3758.

Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities

D. Toscano,¹ S. A. Leonel,^{1,a)} P. Z. Coura,¹ F. Sato,¹ R. A. Dias,¹ and B. V. Costa²

¹Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

²Departamento de Física, Laboratório de Simulação, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais 30123-970, Brazil

(Received 25 September 2012; accepted 29 November 2012; published online 17 December 2012)

In this work, we used numerical simulations to study the effect of a ring of magnetic impurities on the vortex core dynamics in nanodisks of Permalloy. The presence of the ring not only allowed us to modulate the gyrotropic frequency but also provided us a way to confine the vortex core. We observed that the gyrotropic frequency depends on the ring parameters. Moreover, we have noticed that the switching of the vortex core polarity can be obtained from the vortex core-impurity interaction under peculiar conditions, in particular, when the ring works for pinning the vortex core. © 2012 American Institute of Physics. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4772071>]

Nowadays, nanomagnets can be fabricated to present different magnetization states, depending on its geometric characteristics and the material of which it is made of. In particular, a soft nanomagnet in the shape of a disk can exhibit a magnetic vortex in the remanent state.^{1–5} The competition between the exchange and dipolar energies is responsible for the curl configuration of the magnetic moments that arises as an intermediate state between mono and multidomain.⁶ At the core of the magnetic vortex a magnetization perpendicular to the plane of disk can be developed; the vortex polarity determines the sense of this out-of-plane magnetization (up or down). From the technological point of view, these discrete states can be useful to store information, so that, a nanodisk containing a vortex configuration could store up to 2 bits of data.⁷

It is well known that the simplest effect induced by an in-plane external magnetic field is the vortex core displacement. Since the vortex core is polarized, it describes an elliptical trajectory around some fixed point. This motion is known as the gyrotropic mode. The sense of rotation depends only on the vortex core polarity. The frequency of the gyrotropic mode is of order of 10² MHz being determined by the disk aspect ratio.^{8,9}

In the last few years, much effort has been dedicated to control the polarity switching. It has been experimentally observed that applying a small-amplitude field pulse¹⁰ or a spin polarized current¹¹ can switch the polarity.

Some works reported that defects can influence the vortex core dynamics. One can distinguish two classes of defects, magnetic and nonmagnetic. The vortex core pinning by nonmagnetic defects (vacancy or cavity) was predicted theoretically¹² and observed experimentally.¹³ Such defects can attract and capture the vortex core. Corresponding analytical and micromagnetic calculations, modelling the vacancy defects, are in good agreement with reported experiments.^{14–16} Furthermore, it was observed that the gyrotropic frequency at low excitation amplitudes was significantly influenced by intrinsic defects.^{17,18} If the vortex core is captured by artificial defects in

the form of cavities, its out-of-plane component is substantially reduced or even vanishes. In this case, the commonly observed gyrotropic mode is suppressed.^{19,20} The basic physics behind the mechanism of the vortex core pinning by nonmagnetic defects is widely discussed in Ref. 21. Nevertheless, for some special conditions, it has been observed in simulations that the vortex core switching can occur due to the interaction between the vortex core and the nonmagnetic defects.²² A model for structural defects in nanomagnets was proposed in Ref. 23; the authors discussed two possible types of pointlike defects acting as pinning or scattering sites for the vortex core. There, the following question is pointed out: It is known that nonmagnetic impurities act as pinning sites, but what could act as scattering sites? In a recent work,²⁴ the answer to this question was addressed. Numerical results indicate that a possible origin of the pinning or scattering defects in nanomagnets could be the local reduction or increase in the exchange constant, respectively. In another recent work,²⁵ it was shown that the gyrotropic frequency is affected by the magnetic impurities. From the experimental point of view, magnetic impurities can be lithographically inserted in nanomagnets.

The main goal in this paper is to investigate how the dynamics of the vortex core is influenced by an arrangement of magnetic impurities in nanodisks. In particular, we study a circular distribution of the impurities as shown in Fig. 1.

In an early work, we have presented a Hamiltonian model describing two types of pointlike magnetic impurities that can behave as pinning and scattering sites for the vortex core.²⁴ We have considered a classical ferromagnet model described by the following Hamiltonian:

$$\begin{aligned}
 H = J \bigg\{ & -\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq i', j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i', j \rangle} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_j \\
 & + \frac{D}{2J} \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \\
 & - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{\text{ext}} \bigg\}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

^{a)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidiney@fisica.ufjf.br.

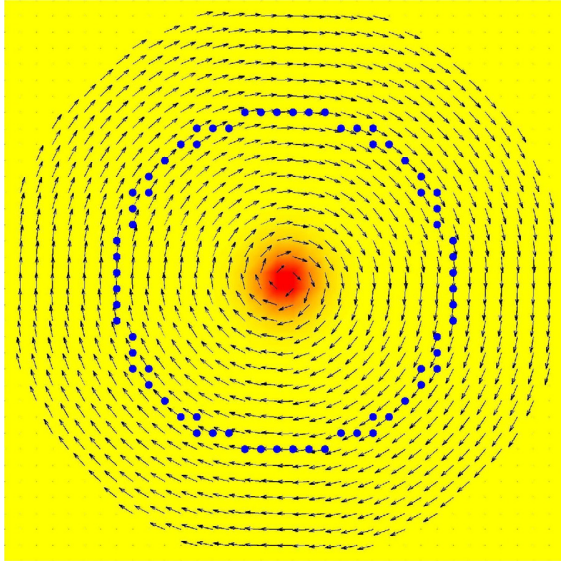


FIG. 1. Schematic of the modified nanodisks. The blue circles represent small clusters containing impurities; they define the ring of magnetic impurities.

where $\hat{m}_k \equiv (m_k^x, m_k^y, m_k^z)$ is a dimensionless vector with $|\hat{m}_k| = 1$ representing the magnetic moment located at the site k of the lattice. The first term in Eq. (1) represents the ferromagnetic coupling only for sites without impurities, whereas the second take into account the exchange interaction between sites with and without impurities. The exchange interactions between magnetic sites and that one containing the impurity were modelled by ferromagnetic coupling with the exchange constant strength J' differing of its value for sites without defects J . In this way, we describe two possible types of magnetic impurities, acting as pinning ($J' < J$) or scattering ($J' > J$) sites for the vortex core. The following terms are dimensionless versions of dipolar and Zeeman interactions, respectively. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where $\mathcal{H}$ is the dimensionless term in curly brackets. The system energy is measured in unities of J .

The dynamics of the system is followed by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} [\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)], \quad (2)$$

where $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i , containing individual contributions from the exchange, dipolar, and Zeeman fields.

In the micromagnetics approach, the interaction constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs. 24 and 25, we have chosen to use cubic cells of edge length a . In this case, the interaction constants between the cells are given by $J = 2A/a$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. If there is an external applied magnetic field, the coefficient of Zeeman interaction is $\frac{H}{J} = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_S = 8.6 \times 10^5$ A/m, the exchange stiffness constant $A^{\text{Py}} = 1.3 \times 10^{-11}$ J/m, and the damping constant $\alpha = 0.01$. Using these parameters, we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5.3$ nm and the unit cell

size was chosen as $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$. The time t is obtained by $t = \tau/\omega_0$, where τ is the dimensionless simulation time and $\omega_0 = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \mu_0 \gamma M_S$. For Permalloy-79, $\omega_0 \approx 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$. The equation of motion (2) was integrated forward by using a fourth-order predictor-corrector scheme with time step $\Delta\tau = 0.01$. In our simulations, we have used the nanodisks with diameter $d = 170$ nm and thickness $L = 10$ nm, differing one to another only in the ring parameters: local variation of the exchange constant J'/J along the ring and ring diameter d' . The corresponding disk without ring was taken as a reference.

We have chosen as initial condition the disk with a vortex configuration with upward polarity and counter-clockwise chirality. The integration of the equations of motion (2) at external magnetic field $\vec{b}_i^{\text{ext}} = \vec{0}$ leads the system to a local energy minimum configuration and we assumed that the nanodisk remanent state was reached. The states obtained in this way were saved to be used as initial configurations in the studies of the gyrotropic mode and switching of vortex polarity.

Over a wide range of the ring diameter d' and exchange constant ratio J'/J , we numerically calculated the dynamic response of the remanent state to a homogeneous in-plane magnetic field pulse

$$\vec{B}_i^{\text{ext}} = \hat{y} B \sin(2\pi \nu t). \quad (3)$$

All simulations were done using $\nu = 0.5$ GHz. The relation between the applied magnetic field and its dimensionless corresponding is $\vec{B}_i^{\text{ext}} = \mu_0 M_S \vec{b}_i^{\text{ext}}$.

To excite the gyrotropic mode, we used a low excitation amplitude $B = 3$ mT. We observed that the vortex core describes a circular trajectory within the ring. The gyrotropic frequency dependence with the ring parameters is shown in Fig. 2. As a reference, we plot the gyrotropic frequency of the nanodisk without the ring ($J'/J = 1$), being shown as the dashed line. A local reduction of the exchange constant ($J'/J < 1$) always lowers the gyrotropic frequency of the nanodisk. On the other hand, if ($J'/J > 1$) the gyrotropic frequency increases. The variation in gyrotropic frequency is more pronounced for smaller ring diameters. That might be expected, since the interaction between the vortex core and the magnetic impurity is short-ranged. As expected, for

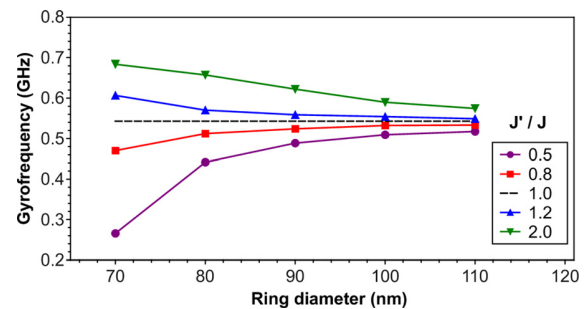


FIG. 2. Gyrotropic frequency depending on the local variation of the exchange constant J'/J and ring diameter d' . The dashed line, in black, corresponds to the gyrotropic frequency of the nanodisk without the ring of magnetic impurities, in this case 0.543 GHz. The effect of an attractive ring ($J'/J < 1$) is to lower the gyrofrequency, whereas the effect of a repulsive ring ($J'/J > 1$) is to increase gyrofrequency.

larger values of the ring diameter, the gyrotropic frequency tends to the frequency of the reference disk ($J'/J = 1$).

The reason why the magnetic impurities insertion modifies the gyrotropic frequency can be understood using a Thiele approach²⁶ and is discussed in Ref. 25.

The dynamics of the vortex core is substantially affected if the ring diameter approaches the gyrotropic trajectory diameter (30 nm for the disk without the ring). When ($J'/J > 1$), we observed the confinement of the vortex core, namely, the gyrotropic trajectory diameter is reduced. In extreme cases ($J'/J \gg 1$), due to the radial symmetric distribution of repulsive impurities, the vortex core can get stuck in its equilibrium position and the gyrotropic mode is not excited. Above a critical amplitude B , the vortex core escapes from inside the ring.

Augmenting the excitation amplitude, we have noticed a phenomenon not yet observed: the switching of polarity can be obtained from the interaction between the vortex core and magnetic impurity under peculiar conditions. The mechanism of switching involves necessarily a pinning site ($J'/J < 1$), the relative position of the attractive magnetic impurity in relation to the disk center and an external agent.

A set of 30 nanodisks with different ring of magnetic impurities was submitted to an in-plane magnetic field for varied excitation amplitudes B , see Fig. 3. The chosen values of B are not strong enough to reverse the vortex polarity in the nanodisk without the ring. For $B = 20$ mT, the vortex core expulsion was observed in our reference nanodisk but

not if the ring is present. Thus, using the ring, we can expect an increase in the saturation field. For a strong excitation amplitude B , the dominant event is a random multiple switch, such that the polarity cannot be reversed in a controllably way. For moderate amplitudes, $B = 10, 12$, and 15 mT, the multiple switches region is mainly concentrated in the region of smaller ring diameters. Whenever the pinning effects are weak, ($J'/J \rightarrow 1$), no reversal is observed. In the case of strong pinning effects, ($J'/J \rightarrow 0$), the polarity cannot be controlled because the vortex core is pinned in some point of the ring. As shown in Fig. 3, the control of the polarity occurs in a very well defined range of parameters. In short, the polarity switching mechanism must involve a single interaction between the vortex core and the ring. The external field must be strong enough to provide the kinetic energy necessary, so that, the vortex core does not get stuck. Besides attracting the vortex core, a magnetic impurity of the pinning site reduces its out-of-plane component; as a result of the interaction, the vortex core magnetization can be reversed.

In summary, we have shown how the dynamics of the vortex core in a nanodisk can be managed introducing a distribution of impurities in the system; with this we can control the gyrotropic mode and the vortex core magnetization. A fine tuning of the gyrotropic frequency can be obtained through the control of the exchange constant strength and the impurity distribution. When the gyrotropic trajectory is described inside the ring, the effect of an attractive ring ($J'/J < 1$) is to reduce the gyrotropic frequency, whereas the

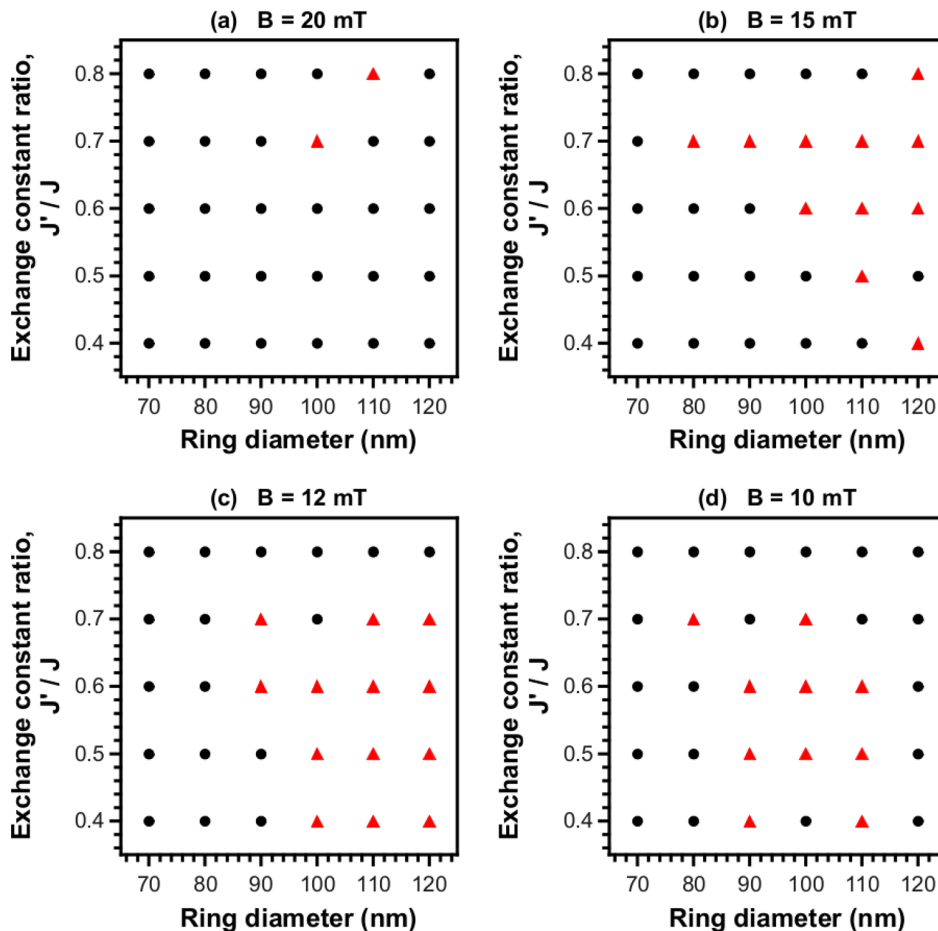


FIG. 3. Polarity controllability diagram for the magnetic impurities ring parameters in Py nanodisks with diameter $d = 170$ nm and thickness $L = 10$ nm. Red triangles correspond to a combination of parameters when a single switching occurs and black circles include the following events: dynamics of vortex core without switching, multiple switches, pinning, or expulsion of the vortex core.

effect of a repulsive ring ($J'/J > 1$) is to increase the gyro-tropic frequency. Moreover, we showed an alternative mechanism to switch the vortex polarity, mediated by the interaction between the vortex core and attractive magnetic impurities. The control of the polarity occurs in a very well defined range of parameters. In our simulations, the polarity switching can be obtained for an amplitude of ~ 10 mT with the switching time about 1.5 ns. The great differential of this polarity switching process is that it does not require a high excitation amplitude. A nonmagnetic defect, such as a cavity, has already been intentionally incorporated in Permalloy disks by using an image reversal electron beam lithography process.^{13,14} We believe that a magnetic impurity can be lithographically inserted in nanodisks by depositing a ferromagnetic material into a cavity previously created. In order to verify our predictions, a ring of cluster of Ni or Fe ($A^{\text{Ni}} = 0.86 \times 10^{-11}$ J/m, $A^{\text{Fe}} = 1.98 \times 10^{-11}$ J/m),²⁷ for example, could be inserted in Permalloy nanodisks to act as attractive or repulsive ring for the vortex core, respectively. As $A^{\text{Ni}} < A^{\text{Py}}$, we expect that $J^{\text{Ni}} < J' < J^{\text{Py}}$ for attracting, and as $A^{\text{Fe}} > A^{\text{Py}}$, we expect that $J^{\text{Py}} < J' < J^{\text{Fe}}$ for scattering the vortex core. We consider here only one possible realization of the vortex core dynamics controllability with a very single ring. We believe that the usage of others magnetic impurity distributions lithographically inserted will be promising for different applications of nanomagnets.

This work was partially supported by CNPq and FAPESP (Brazilian Agencies). Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

¹R. P. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, and D. M. Tricker, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1042–1045 (1999).

²T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, and T. Ono, *Science* **289**, 930–932 (2000).

³A. Wachowiak, J. Wiebe, M. Bode, O. Pietzsch, M. Morgenstern, and R. Wiesendanger, *Science* **298**, 577–580 (2002).

⁴J. Miltat and A. Thiaville, *Science* **298**, 555–555 (2002).

⁵S. A. Leonel, I. A. Marques, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **102**, 104311 (2007).

⁶N. A. Usov and S. E. Peschany, *J. Magn. Magn. Mater.* **118**, 290 (1993).

⁷B. Heinrich and J. A. C. Bland, *Ultrathin Magnetic Structures IV—Applications of Nanomagnetism* (Springer, Berlin, 2005).

⁸K. Y. Guslienko, B. A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, and K. Fukamichi, *J. Appl. Phys.* **91**, 8037–8039 (2002).

⁹J. P. Park, P. Eames, D. M. Engebretson, J. Berezovsky, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **67**, 020403 (2003).

¹⁰V. B. Waeyenberge, A. Puzic, H. Stoll, K. W. Chou, T. Tylliszczak, R. Hertel, M. Fähnle, H. Bruckl, K. Rott, G. Reiss *et al.*, *Nature* **444**, 461–464 (2006).

¹¹K. Yamada, S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, A. Thiaville, and T. Ono, *Nature Mater.* **6**, 269–273 (2007).

¹²A. R. Pereira, L. A. S. Mol, S. A. Leonel, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *Phys. Rev. B* **68**, 132409 (2003).

¹³M. Rahm, J. Biberger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **93**, 7429–7431 (2003).

¹⁴M. Rahm, R. Höllinger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **95**, 6708–6710 (2004).

¹⁵A. R. Pereira, *J. Appl. Phys.* **97**, 094303 (2005).

¹⁶T. Uhlig, M. Rahm, C. Dietrich, R. Hollinger, M. Heumann, D. Weiss, and J. Zweck, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237205 (2005).

¹⁷R. L. Compton and P. A. Crowell, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 137202 (2006).

¹⁸R. L. Compton, T. Y. Chen, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **81**, 144412 (2010).

¹⁹K. Kuepper, L. Bischoff, Ch. Akhmedaliev, J. Fassbender, H. Stoll, K. W. Chou, A. Puzic, K. Fauth, D. Dolgos, G. Schütz *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 062506 (2007).

²⁰W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, R. L. Silva, and N. M. Oliveira-Neto, *J. Appl. Phys.* **103**, 124306 (2008).

²¹A. R. Pereira, A. R. Moura, W. A. Moura-Melo, D. F. Carneiro, S. A. Leonel, and P. Z. Coura, *J. Appl. Phys.* **101**, 034310 (2007).

²²R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, N. M. Oliveira-Neto, S. A. Leonel, and P. Z. Coura, *Phys. Rev. B* **78**, 054423 (2008).

²³F. A. Apolonio, W. A. Moura-Melo, F. P. Crisafulli, A. R. Pereira, and R. L. Silva, *J. Appl. Phys.* **106**, 084320 (2009).

²⁴D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 076104 (2011).

²⁵J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083–3086 (2012).

²⁶A. A. Thiele, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 230–233 (1973).

²⁷A. P. Guimarães, *Principles of Nanomagnetism* (Springer, Heidelberg, 2009).

Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires

V. A. Ferreira,^{a)} D. Toscano,^{b)} S. A. Leonel,^{c)} P. Z. Coura,^{d)} R. A. Dias,^{e)} and F. Sato^{f)}

Laboratório de Simulação Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

(Received 25 April 2013; accepted 13 June 2013; published online 1 July 2013)

We used numerical simulations to study the dynamical behavior of the transverse domain wall (TDW) in nanowires made of Permalloy-79 contaminated by pointlike magnetic impurities. It was observed that the magnetic impurities can behave both as pinning (attractive) and as scattering (repulsive) sites for the TDW. We have found that the nearer to the bottom edge of the nanowire is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the pinning and the scattering energy, which agrees with experimental observation. We also observed that the interaction energy and the range of the interaction potential depend on the width of the nanowire. The presence of magnetic impurity affects the motion of the TDW. © 2013 AIP Publishing LLC.

[<http://dx.doi.org/10.1063/1.4812562>]

I. INTRODUCTION

Recently, magnetic nanostructures such as magnetic nanowires, that exhibit domain walls (DW), have been investigated for applications in logic devices^{1,2} and in high speed random access memories (high speed RAM).^{3,4} Magnetic domains and DWs can be used for logic and memory operations. For the development of such technologies, it is crucial to understand the process of magnetization of these ferromagnetic structures as well as control the movement of DWs. Particularly in magnetic nanowires, the relation between the thickness and width provides two types of DWs, the vortex domain wall (VDW) and the transverse domain wall (TDW).^{5,6} The competition between exchange energy and magnetostatic energy is responsible for the predominance of one of these structures. For smaller widths, the magnetostatic energy is minimized by forming a transverse domain wall. If the width increases, this energy also increases due to the appearance of many free magnetic charges, which favors the formation of one closure structure, characteristic of vortex domain wall.

The manipulation of DWs in the nanowire is made by using applied magnetic fields^{7–11} or spin-polarized currents.^{12–16} For the applicability of DWs, their mobility should be large and possible to be controlled. Applying an external magnetic field along the magnetization axis of the nanowire moves the DW to minimize the Zeeman energy. The maximum velocity achieved by DW depends on the material damping parameter,^{12,17} the intensity and the type of the external applied field,^{8,11,18} and the dimensions of the nanowire.^{19–21} This velocity is limited by the Walker field²²

and above this field the internal structure of DW is modified by the precession of the magnetization, which leads to a reduction in its velocity. This fact has been confirmed experimentally.^{23,24}

The position control of the DW is proposed by various forms of pinning.^{9,17,25–28} Experimentally, artificial defects as constrictions and protrusions which alter the local geometry of the nanowire are used to generate a potential that acts as a pinning site for DW.^{29–31} In Ref. 17, the authors alter the damping constant through Ho doping in nanowires of Permalloy, which changes the pinning field of DWs and their velocity. The micromagnetic simulations show that the increase of damping constant makes the structure of the DW more rigid. In Ref. 28, the irradiation of chromium ions in a sample of Permalloy induces the formation of soft magnetic spots square in the nanowire, which generate pinning sites without the need to modify its geometry. Through topological defects, experimental measurements determine the velocity and position of the VDW in spin valve by measuring the change in giant magnetoresistance.³² Studies of a single DW in a magnetic wire show the possibility of controlling the velocity and trapping the DW experimentally by varying local fields.³³ To determine and understand the pinning potential of DWs generated by intrinsic defects or created in their geometry is of paramount importance to understand and control the dynamics of DWs.

In this work, we use spin dynamic simulation to study the effect of magnetic impurities in the DW dynamics. We consider nanowires made of Permalloy with length $L = 1.3 \mu\text{m}$, width w between 10.0 nm and 65.0 nm, and thickness $t = 10 \text{ nm}$, with a TDW as shown in Fig. 1. Following Ref. 34, we consider the interaction between the magnetic sites in the nanowires and the impurities depending only on the exchange energy. We analyze the interaction energy between the magnetic impurity and TDW. Finally, we consider an applied magnetic field on the axis of magnetization of the nanowire and verify the changes in the velocity of TDW due to the presence of an impurity.

^{a)}Electronic mail: vanessaferreira@fisica.ufjf.br

^{b)}Electronic mail: danielotocano@fisica.ufjf.br

^{c)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidney@fisica.ufjf.br

^{d)}Electronic mail: pablo@fisica.ufjf.br

^{e)}Electronic mail: radias@fisica.ufjf.br

^{f)}Electronic mail: sjfsato@fisica.ufjf.br

II. MODEL AND METHODOLOGY

The magnetic nanowires are modeled by magnetic moments with dipole-dipole and exchange interactions. The model Hamiltonian for the nanowires in the presence of the magnetic impurities can be written as³⁴

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{(i \neq i', j)} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{(i', j)} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{i, j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\}, \quad (1)$$

where i and j represent sites of the pure sample and i' is for sites containing impurities; $\hat{m}_i$, $\hat{m}_j$, and $\hat{m}_{i'}$ are dimensionless vectors that satisfy the condition $|\hat{m}| = 1$ representing the magnetic moments located in the sites i , j , and i' , respectively; r_{ij} is the distance between the sites i and j measured in units of length, a is the lattice parameter of the material; and J (in units of energy) is the exchange coupling constant between $\hat{m}_i$ and $\hat{m}_j$. The exchange interactions between magnetic sites and that one containing the impurity were modelled by ferromagnetic coupling with the exchange constant strength J' differing its value for sites without defects J . J' is the exchange coupling constant between $\hat{m}_{i'}$ and $\hat{m}_j$, and D is the dipole strength. Z is the Zeeman energy of the system and b_i^{ext} is the external magnetic field. The lattice parameter a represents the distance between the first neighbors sites in a cubic lattice. The sums in the first and second terms are over nearest neighbors. The first term represents the ferromagnetic coupling only for sites without impurities, whereas the second takes into account the exchange interaction between sites with and without impurities. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where $\mathcal{H}$ is the dimensionless term in curly brackets. The system energy is measured in units of J . The dynamics of the system is followed, as in Refs. 34 and 35, by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} [\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)], \quad (2)$$

where τ is the dimensionless time defined as $\tau = t \cdot \omega_0$, where t is the Hamiltonian time, measured in seconds,³⁶ α is the material damping parameter, and $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i , containing individual contributions from the exchange, dipolar, and Zeeman fields.

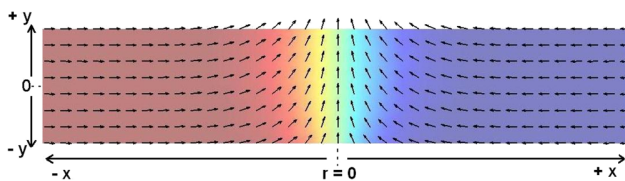


FIG. 1. Schematic view of the nanowire with length L along x-axis, width ω along y-axis, and thickness t along z-axis. Initially, the TDW is considered in the center of the nanowire at $r=0$.

We used the reference value $\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ for Permalloy-79.³⁵ We integrated the equations of motion (2) using a fourth-order predictor-corrector scheme with a damping parameter $\alpha = 0.01$ and time step $d\tau = 0.01$ ($dt = 4.7 \times 10^{-14} \text{ s}$ for Permalloy-79).

In the micromagnetic approach, the interaction constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs. 34, 37, and 38, we have chosen to use cubic cells of edge length a . In this case, the interaction constants between the cells are given by $J = 2A/a$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. If there is an external applied magnetic field, the coefficient of Zeeman interaction is $\frac{Z}{J} = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_S = 8.6 \times 10^5 \text{ A/m}$ and the exchange stiffness constant $A = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$. Using these parameters, we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5.3 \text{ nm}$ and the unit cell size was chosen as $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$. The simulations were performed with no cutoff in the dipolar energy term.

As for vortex core in the nanodisks,³⁴ we describe two possible types of magnetic impurities acting as pinning ($J' < J$) or scattering ($J' > J$) sites for the TDW in the nanowires.

The application of a field pulse b_i^{ext} along the nanowire axis (x-axis) moves the TDW. The field pulse is given by

$$b_i^{ext}(t) = b_i^{ext}[1 - \cos(2\pi f t)], \quad (3)$$

where we used the frequency $f = 1 \text{ GHz}$. The domain wall velocity $v(t)$ can be calculated from the derivative of the average magnetization of the nanowire²⁰

$$v(t) = \frac{L}{2} \frac{d\langle m_x(t) \rangle}{dt}, \quad (4)$$

where m_x represents the magnetization in the x direction.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

Initially, the TDW was set at the center of the nanowire in the presence of a magnetic impurity a few sites away. We observed that if $J'/J < 1$, the TDW moves toward the magnetic impurity site and is trapped by it due to an effective attractive potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity, as shown in Fig. 2. If we consider $J'/J > 1$, the TDW moves away of the magnetic impurity site due to an effective repulsive potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity, as shown in Fig. 3.

Since the TDW is asymmetrical with respect to the y-axis (see Fig. 1), we analyzed the behavior of the potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity considering different positions to the magnetic impurity along the y-axis. In this work, “bottom edge” refers to the edge where the TDW magnetization points toward the inside of the nanowire and “top edge” refers to the edge where the TDW magnetization points toward the outside of the nanowire (see Fig. 4). Figure 5 shows the interaction energy behavior as a function of the relative distance (r/a) between

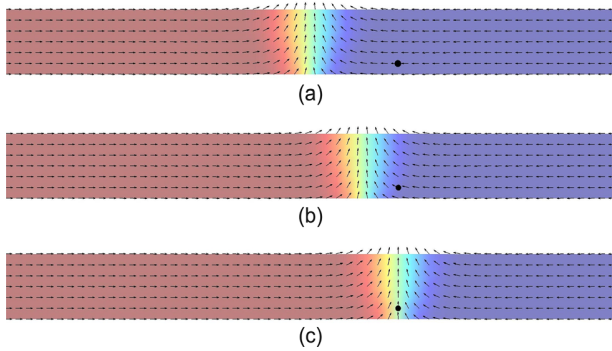


FIG. 2. Snapshots of the dynamical behavior of the TDW near an attractive magnetic impurity $J'/J < 1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. The black circle symbol represents a magnetic impurity. (a) A typical initial configuration with the TDW at the center of the nanowire and the magnetic impurity located eight sites away from the center. (b) Configuration after 7 ns. (c) Configuration after 14 ns showing TDW pinning at the magnetic impurity.

the center of the TDW and the magnetic impurity for each y position considered. First, we considered an attractive impurity with $J'/J = 0.1$ in the nanowire with $\omega = 45$ nm.

We have found that the nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the pinning energy. From the experimental view point, the introduction of magnetic impurity near to the bottom edge of the nanowire is more favorable to pinning TDW. This also happens for ring-shaped nanowires where topological edge defects confine VDW.³⁰ If the impurity is located very near to the bottom edge of the nanowire, the interaction energy has a Gaussian profile, as shown in Fig. 5 for $y/a = -4.5$ and -3.5 . If the impurity is located not very near to the bottom edge of the nanowire, the profile of the interaction energy presents two minimum points, as shown in Fig. 5 for $y/a \geq -2.5$.

Figure 6 shows the results considering repulsive impurity with $J'/J = 2.5$ in the nanowire with $\omega = 45$ nm. Figure 7 shows the results considering attractive impurity with $J'/J = 0.1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. It is observed from Figure 6 that for repulsive impurity, the interaction energy presents the same behavior. Comparing the results of Figures 5 and 7, we observed that the interaction

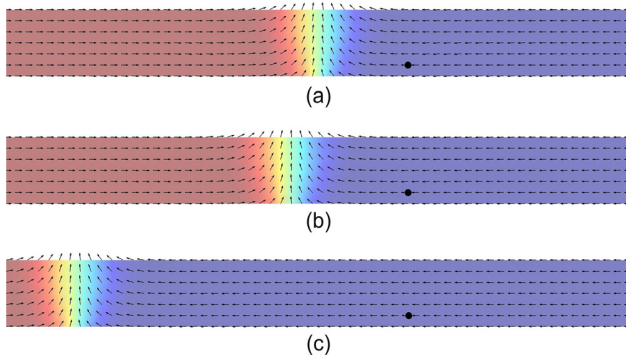


FIG. 3. Snapshots of the dynamical behavior of the TDW near a repulsive magnetic impurity $J'/J > 1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. The black circle symbol represents a magnetic impurity. (a) A typical initial configuration with the TDW at the center of the nanowire and the magnetic impurity located eight sites away from the center. (b) Configuration after 7 ns. (c) Configuration after 14 ns showing TDW scattering by the magnetic impurity.

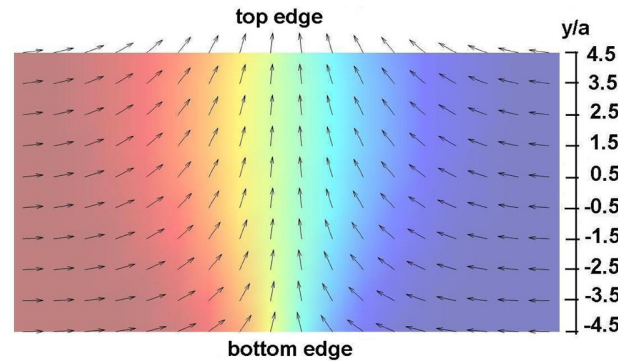


FIG. 4. Schematic view of how we consider the y position of the magnetic impurity in the nanowire. In this example, the nanowire has $\omega = 9a$. Bottom edge refers to the edge where the TDW magnetization points toward the inside of the nanowire, and top edge refers to the edge where the TDW magnetization points toward the outside of the nanowire.

energy and the interaction range depend on the width of the nanowire. For example, considering the magnetic impurity on the bottom edge, for $\omega = 45$ nm, the interaction range is $\approx 9a = 45$ nm and for $\omega = 25$ nm, the interaction range is $\approx 8a = 40$ nm. This is due to the fact that the wall-width parameter Δ depends on the ω .^{6,19} It can also be observed from Figures 5 and 7 that the interaction range r/a depends on the y position of the magnetic impurity in the nanowire. We have found that the nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, smaller is the interaction range. For $\omega = 45$ nm and $y/a = -4.5$, the interaction range is $\approx 9a = 45$ nm and for $\omega = 45$ nm and $y/a = 4.5$, the interaction range is $\approx 12a = 60$ nm. This is due to the fact that the TDW is narrower on the bottom edge.

We also analysed the behavior of the potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity as a function of the relative distance (r/a) between them for various values of J'/J (see Fig. 8). We consider $\omega = 25$ nm and the magnetic impurity located on the bottom edge of the nanowire. We observed from Figure 8 that the interaction range does not depend on the ratio J'/J and the interaction energy has a Gaussian profile.

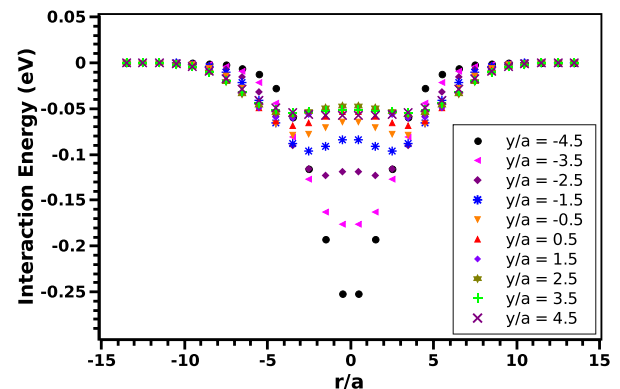


FIG. 5. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r = 0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 0.1$ and $\omega = 45$ nm.

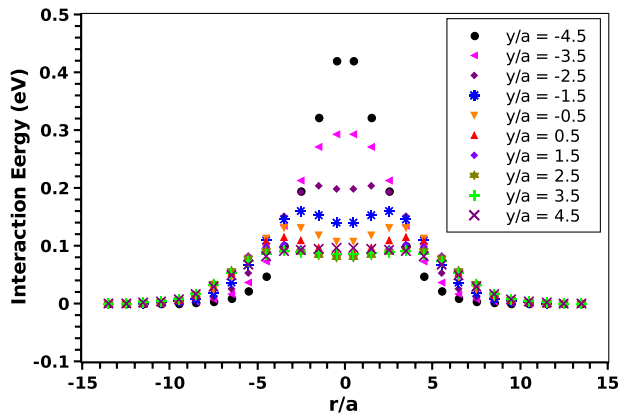


FIG. 6. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 2.5$ and $\omega = 45$ nm.

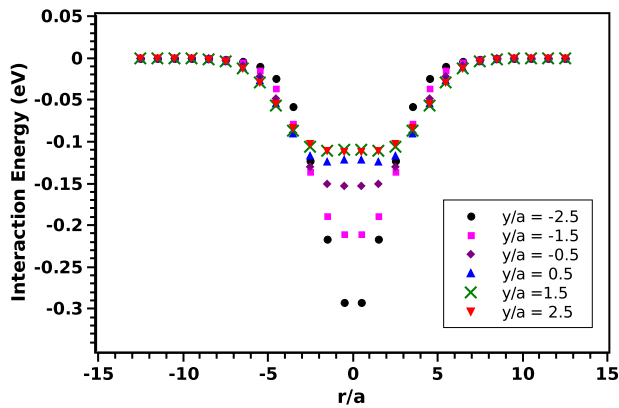


FIG. 7. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 0.1$ and $\omega = 25$ nm.

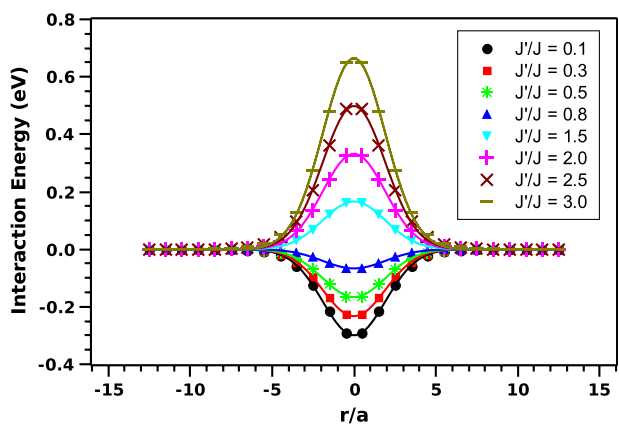


FIG. 8. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the J'/J . Here, we consider $\omega = 25$ nm and the impurity located on the bottom edge of the nanowire at $y/a = -2.5$.

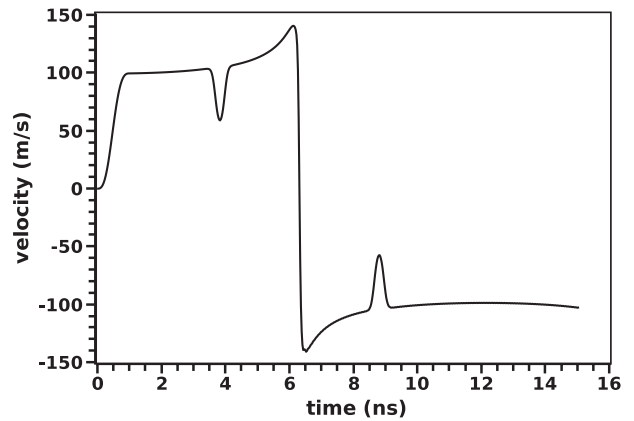


FIG. 9. TDW velocity as a function of time in a nanowire with $\omega = 10$ nm and a magnetic impurity ($J'/J = 1.5$) at $r/a = 70$, $y/a = -1.5$. The applied magnetic field pulse has the amplitude 2 mT and 1.0 ns.

Finally, we consider the application of a magnetic field pulse given by Eq. (3) with $b_t^{ext} = 2$ mT and 1.0 ns along the positive x -axis of a nanowire with $\omega = 25$ nm and a magnetic impurity at $r/a = 70$ and $y/a = -1.5$. During the field pulse, the TDW reaches a velocity of 100 m/s and continues the movement along the positive x -axis direction of the nanowire, as shown in Figure 9. At 3.90 ns, the TDW passes through the magnetic impurity and due to its influence, we observed an instantaneous variation in the TDW velocity. At 6.40 ns, the TDW reaches the edge of the nanowire, where it is reflected and starts to move in the opposite direction (negative velocity).²⁰ We can also observe a similar instantaneous variation in the TDW velocity when it passes again through the magnetic impurity. Thus, we can observe that the presence of magnetic impurities affects the velocity of the TDW. A quantitative study of the effect of magnetic impurities on the TDW motion can be done in the future to further conclusions.^{39,40}

IV. CONCLUSION

In summary, we have used spin dynamics simulations to study the behavior of the interaction potential between TDW and magnetic impurities in magnetic nanowires. We use the model proposed in Ref. 34 for magnetic impurities. We observed that if the exchange constant strength J' between magnetic sites of the sample and that one containing the impurity is smaller than the exchange coupling constant J between magnetic sites in the sample ($J' < J$), the interaction potential between TDW and the impurity is attractive. If $J' > J$, the interaction potential between TDW and the impurity is repulsive. We used the known values of the parameters for the Permalloy-79. We have found that the interaction range and the interaction energy between TDW and magnetic impurities depend on the position of the impurity along the transverse direction in the nanowire. The nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the interaction energy, which agrees with experimental observations. The interaction energy and the interaction range depend on the width of the nanowire. We also observed that the presence of magnetic impurity affects

the motion of the TDW. A nonmagnetic defect, such as a cavity, has already been intentionally incorporated in Permalloy nanomagnets by using an image reversal electron beam lithography process.^{41,42} A cluster of magnetic impurities can be lithographically inserted in nanowires by depositing a ferromagnetic material into a cavity previously created. The inclusion of a cluster of magnetic impurities can induce changes in the magnetic properties locally. A local reduction of the magnetization saturation by the insertion of soft magnetic material acts as a pinning region for the TDW²⁸ and we believe that a local increase would act as a scattering region. The insertion of hard magnetic material besides inducing a local variation of the magnetization saturation can also affect locally the magnetocrystalline anisotropy. As the exchange energy dominates, we believe that a local variation in the magnetocrystalline anisotropy should not affect qualitatively our results, but a quantitative study can be done to further conclusions. We observe that a potential technological application in memory devices can be the use of magnetic impurities lithographically inserted in magnetic nanowires to control the positions of the domain walls.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian Agencies). Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

- ¹D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. P. Cowburn, *Science* **309**, 1688 (2005).
- ²K. Nagai, Y. Cao, T. Tanaka, and K. Matsuyama, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D130 (2012).
- ³S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, *Science* **320**, 190 (2008).
- ⁴M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. P. Parkin, *Science* **320**, 209 (2008).
- ⁵R. D. McMichael and M. J. Donahue, *IEEE Trans. Magn.* **33**, 4167 (1997).
- ⁶Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* **290**, 750 (2005).
- ⁷D. Atkinson, D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, and R. P. Cowburn, *Nature Mater.* **2**, 85 (2003).
- ⁸C.-Y. You, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 192514 (2008).
- ⁹M. Negoita, T. J. Hayward, and D. A. Allwood, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 072405 (2012).
- ¹⁰A. Goussev, J. M. Robbins, and V. Slavitskiy, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 147202 (2010).
- ¹¹G. S. D. Beach, C. Nistor, C. Knutson, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *Nature Mater.* **4**, 741 (2005).
- ¹²J. He, Z. Li, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **73**, 184408 (2006).
- ¹³M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, Y. B. Bazaly, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 037204 (2007).
- ¹⁴G. S. D. Beach, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1272 (2008).
- ¹⁵S. Fukami, T. Suzuki, Y. Nakatani, N. Ishiwata, M. Yamanouchi, S. Ikeda, N. Kasai, and H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 082504 (2011).
- ¹⁶R. Wieser, T. Stapelfeldt, E. Y. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, *EPL* **97**, 17009 (2012).
- ¹⁷T. A. Moore, P. Mohrke, L. Heyne, A. Kaldun, M. Klau, D. Backes, J. Rhensius, L. J. Heyderman, J.-U. Thiele, G. Woltersdorf, A. F. Rodriguez, F. Nolting, T. O. Montes, M. A. Nio, A. Locatelli, A. Potenza, H. Marchetto, S. Cavill, and S. S. Dhesi, *Phys. Rev. B* **82**, 094445 (2010).
- ¹⁸H.-G. Piao, X. Zhang, H.-C. Choi, D.-H. Kim, and C.-Y. You, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D301 (2012).
- ¹⁹A. Thiaville, J. M. García, and J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* **242**, 1061 (2002).
- ²⁰D. G. Porter and M. J. Donahue, *J. Appl. Phys.* **95**, 6729 (2004).
- ²¹A. Kunz, *J. Appl. Phys.* **99**, 08G107 (2006).
- ²²N. L. Schryer and L. R. Walker, *J. Appl. Phys.* **45**, 5406 (1974).
- ²³J. Yang, C. Nistor, G. S. D. Beach, and J. L. Erskine, *Phys. Rev. B* **77**, 014413 (2008).
- ²⁴K. Kondou, N. Ohshima, D. Chiba, S. Kasai, K. Kobayashi, and T. Ono, *J. Phys. Condens. Matter* **24**, 024217 (2012).
- ²⁵D. Bedau, M. Klau, M. T. Hau, S. Krzyk, and U. Rudiger, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256602 (2008).
- ²⁶T.-A. Övari, S. Corodeanu, and H. Chiriac, *J. Appl. Phys.* **109**, 07D502 (2011).
- ²⁷F. G. Sanchez, H. Szabolcs, A. P. Mihai, L. Vila, A. Marty, J.-P. Attan, J. C. Toussaint, and L. D. B. Prejbeanu, *Phys. Rev. B* **81**, 134408 (2010).
- ²⁸A. Vogel, S. Wintz, T. Gerhardt, L. Bocklage, T. Strache, M.-Y. Im, P. Fisher, J. Fassbender, J. McCord, and G. Meier, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 202501 (2011).
- ²⁹M.-Y. Im, L. Bocklage, P. Fisher, and G. Meier, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 147204 (2009).
- ³⁰D. Bedau, M. Klau, S. Krzyk, and U. Rudiger, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146601 (2007).
- ³¹S.-M. Ahn, K.-W. Moon, D.-H. Kim, and S.-B. Choe, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D309 (2012).
- ³²X. Jiang, L. Thomas, R. Moriya, and S. S. P. Parkin, *Nano Lett.* **11**, 96 (2011).
- ³³M. Vsquez, G. A. Basheed, G. Infante, and R. P. D. Real, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 037201 (2012).
- ³⁴D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 076104 (2011).
- ³⁵D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, J. C. S. Rocha, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 014301 (2011).
- ³⁶L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, and J. M. D. Coey, *Phys. Rev. B* **77**, 104431 (2008).
- ³⁷J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083–3086 (2012).
- ³⁸D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 252402 (2012).
- ³⁹B. N. Filippov, M. N. Dubovik, and L. G. Korzunin, *Phys. Met. Metallogr.* **112**, 330 (2011).
- ⁴⁰I. M. Miron, T. Moore, H. Szabolcs, L. D. B. Prejbeanu, S. Auffret, B. Rodmacq, S. Pizzini, J. Vogel, M. Bonfim, A. Schuhl, and G. Gaudin, *Nature Mater.* **10**, 419 (2011).
- ⁴¹M. Rahm, J. Biberger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **93**, 7429 (2003).
- ⁴²M. Rahm, R. Hillinger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **95**, 6708 (2004).

Position of the transverse domain wall controlled by magnetic impurities in rectangular magnetic nanowires

D. Toscano,^{1,a)} V. A. Ferreira,^{1,b)} S. A. Leonel,^{1,c)} P. Z. Coura,^{1,d)} F. Sato,^{1,e)} R. A. Dias,^{1,f)} and B. V. Costa^{2,g)}

¹Laboratório de Simulação Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

²Laboratório de Simulação, Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais 30123-970, Brazil

(Received 17 February 2014; accepted 7 April 2014; published online 25 April 2014)

We have performed numerical simulations to demonstrate that the domain wall movement can be controlled introducing a distribution of magnetic impurities in a nanowire. In particular, we have considered two identical impurities equidistant from the nanowire width axis. Pinning and scattering sites for the domain wall can be defined by magnetic impurities, consisting of a local variation of the exchange constant. The domain wall motion was induced by application of a magnetic field pulse and our results indicate that it is possible to control the domain wall position.

© 2014 AIP Publishing LLC. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4872438>]

I. INTRODUCTION

The controlled movement of domain walls in magnetic nanowires is a subject of fundamental importance for the realization of future spintronic devices, used to perform logical operations^{1,2} or even to encode information for data storage.^{3,4}

A transverse domain wall can be injected into a rectangular nanowire made of a soft magnetic material;^{5–7} since the magnetic shape anisotropy predominates over the magnetocrystalline anisotropy, the magnetization of wire is largely aligned along the axis of nanowire length. In this type of domain wall, the magnetization is confined on the plan structure of the strip, and at the boundary between the domains, the magnetization develops a component along the nanowire width (y -axis, see Fig. 1) in which the magnetic moments vary gradually from one domain to another. At the wall, the magnetization can point along $+y$ or $-y$ direction; the polarity of the domain wall is determined by the direction of this magnetization. From the technological point of view, these two-fold degenerated states can be useful to store information, so that a nanowire containing a single transverse domain wall could store one bit of data.

There are two kinds of transverse domain walls which depend on the magnetization orientation between the antiparallel domains; thus, a head-to-head or a tail-to-tail domain wall can be formed. When multiple domain walls are present in the same nanowire, adjacent domain walls alternate between head-to-head and tail-to-tail configurations. When the nanowire presents a pair of domain walls, they interact with each other.⁸ Their domain wall polarities define if the interaction will be attractive (parallel polarities) or repulsive (antiparallel polarities).

Domain walls can be manipulated through the application of a magnetic field^{9–14} or a spin-polarized current.^{15–18} For small or moderate excitations, domain walls behave as quasi-particles restricted to the unidirectional movement. When an external magnetic field is applied along the wire's length to move a single domain wall, the domain with magnetization oriented in the direction of the field expands to minimize the Zeeman energy, and, as a result, the wall is shifted from its equilibrium position. Thus, we can associate dynamic variables with the domain wall, such as position, velocity, and so on. For the movement control of the domain wall, it is very important to determine or even impose critical positions where the domain wall stops. These critical points can be pinning or scattering sites, respectively, corresponding to potential well or potential barrier for the domain wall. The inclusion of well-located confining potentials in the system can be accomplished by different ways. Generally, non-magnetic imperfections which distort locally the wire geometry generate pinning sites. Thus, notches along the edges of the wire have been widely used to trap domain walls.^{19–26} We believe that both pinning and scattering sites can be originated from a local modification of the sample magnetic properties. As it has been reported in previous articles,^{27–32} magnetic impurities, e.g., localized magnetic modifications obtained by ion irradiation or implantation into magnetic thin films and multilayers have been employed to manipulate and control the magnetization dynamics in nanostructured systems. In this case, no local modification of

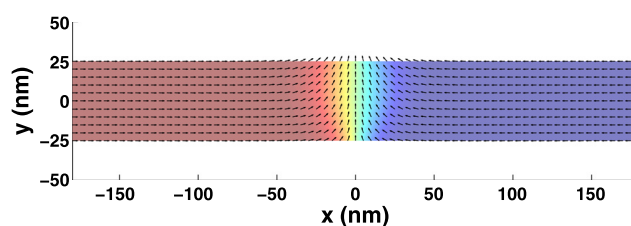


FIG. 1. Schematic view of the nanowire with length L along x -axis, width d along y -axis, and thickness t along z -axis. Initially the transverse domain wall is considered at the geometric center of the wire.

^{a)}Electronic mail: danilotoscano@fisica.ufjf.br

^{b)}Electronic mail: vanessaferreira@fisica.ufjf.br

^{c)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidiney@fisica.ufjf.br

^{d)}Electronic mail: pablo@fisica.ufjf.br

^{e)}Electronic mail: sjfsato@fisica.ufjf.br

^{f)}Electronic mail: radias@fisica.ufjf.br

^{g)}Electronic mail: bvc@fisica.ufmg.br

system geometry is required. Recently, magnetic soft spots have already been intentionally incorporated in Permalloy nanowires and has been used to induce pinning sites.^{33,34} Furthermore, for nanowires with perpendicular magnetic anisotropy, pinning sites can arise from a local reduction of the anisotropy constant.³⁵ Up to now, there are no experimental results about which possible magnetic impurity could come to act as a scattering center for transverse domain walls. In fact, little or nothing is mentioned about scattering sites and their potential applications in devices involving domain wall movement.

In this paper, we investigate the possibility of using magnetic impurities to control the transverse domain wall position along a rectangular magnetic nanowire. For this purpose, linear arrangements of magnetic impurities have been designed as shown in Figs. 2 and 3. We show that with the usage of linear arrangement of impurities, one can create a two-fold degenerate state in the system, that is, the wall is pinned or blocked in the neighborhood of one of these magnetic impurities. Thus, besides storing one bit in the domain wall polarity, it is possible to store another bit in its position. Consequently, a nanowire containing a single transverse domain wall confined between two identical magnetic impurities could store up to 2 bits of data.

II. MODEL AND METHODOLOGY

In an early study, we have presented a Hamiltonian model describing two types of pointlike magnetic impurities that can behave as pinning or scattering sites for the transverse domain wall in magnetic nanowires.³⁶ It has been emphasized that a local variation (decrease or increase) of the exchange constant was responsible by emergence of a short-range interaction potential (attractive or repulsive) between the domain wall and the magnetic impurity. We have considered a classical ferromagnet model described by the following Hamiltonian:

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i'j \rangle} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{\text{ext}} \right\}, \quad (1)$$

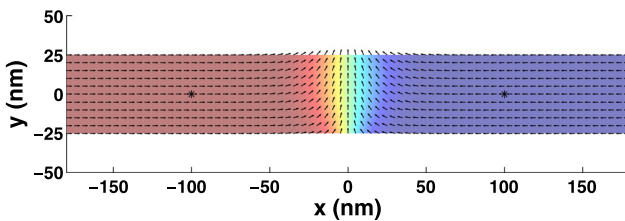


FIG. 2. Schematic view of the modified nanowires. The two black spots represent small clusters containing magnetic impurities located on the wire axis at $y_{\text{imp}} = 0$, $x_{\text{imp}} = -100$ nm, and $x_{\text{imp}} = 100$ nm. They can act as pinning or scattering sites for the domain wall.

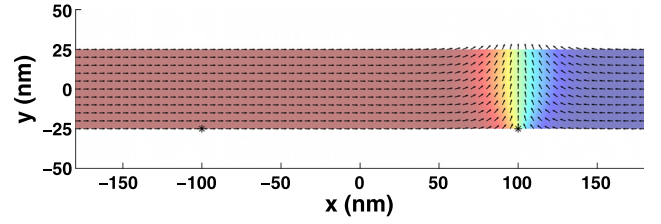


FIG. 3. Schematic view of the modified nanowires. The two black spots represent small clusters containing magnetic impurities located on the wire edge at $y_{\text{imp}} = -25$ nm, $x_{\text{imp}} = -100$ nm, and $x_{\text{imp}} = 100$ nm. They can act as pinning or scattering sites for the domain wall.

where $\hat{m}_k \equiv (m_k^x, m_k^y, m_k^z)$ is a dimensionless vector with $|\hat{m}_k| = 1$ representing the magnetic moment located at the site k of the lattice. The first term in Eq. (1) represents the ferromagnetic coupling only for sites without impurities, whereas the second takes into account the exchange interaction between sites with and without impurities. The exchange interactions between magnetic sites and the one containing the impurity were modeled by ferromagnetic coupling with the exchange constant strength J' differing of its value for sites without impurities J . Thus, we have been describing two possible types of magnetic impurities, acting as pinning ($J'/J < 1$) or scattering ($J'/J > 1$) sites for the domain wall. The following terms are dimensionless versions of dipolar and Zeeman interactions, respectively. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where $\mathcal{H}$ is the dimensionless term in curly brackets. The system energy is measured in unities of J .

In the simulations, we have been developing and using our own numerical code written in Fortran 90 programming language. The dynamics of the system is followed by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} [\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)], \quad (2)$$

where $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i containing individual contributions from the exchange, dipolar, and Zeeman fields.

In the micromagnetics approach, the interactions constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs. 37–39, we have chosen to use cubic cells of edge length a . In this case, the interactions constants between the cells are given by $J = 2Aa$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. If there is an external magnetic field, the coefficient of Zeeman interaction is $\frac{Z}{J} = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_s = 8.6 \times 10^5$ A/m, the exchange stiffness constant $A = 1.3 \times 10^{-11}$ J/m, and the damping constant $\alpha = 0.01$. Using these parameters, we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \approx 5.3$ nm and the unit cell size was chosen as $5 \times 5 \times 5$ nm³. The time t is obtained by $t = \tau/\omega_0$, where τ is the dimensionless simulation time and $\omega_0 = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \mu_0 \gamma M_s$. The equations of motion (2) were integrated forward by using the fourth-order predictor-corrector scheme with time step $\Delta\tau = 0.01$.

In our simulations, we have used the nanowires with length $L = 1 \mu\text{m}$, width $d = 50 \text{ nm}$ and thickness $t = 5 \text{ nm}$, differing one to another only in the magnetic impurities arrangement parameters: the local variation of the exchange constant J'/J and its position $(\pm x_{\text{imp}}, y_{\text{imp}})$. For a local reduction of the exchange constant, we have considered five different values, $J'/J = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$, and 0.7 , whereas for a local increase of the exchange constant, we have used $J'/J = 1.3, 1.5, 1.7, 2.0$, and 3.0 . The adopted coordinate system is shown in Fig. 1. The impurity coordinate parallel to the wire axis (x -axis) was fixed $x_{\text{imp}} = \pm 100 \text{ nm}$ and the two impurities were assumed to be identical, that is, we have considered the same value for J'/J . For the coordinate y_{imp} , we have considered two situations. One of them, due to symmetry, the pair of impurities was placed exactly on the wire axis, $y_{\text{imp}} = 0$ (see Fig. 2). In the other, they were strategically located on the wire edge, in particular, the one where the magnetic moments of the wall point toward the inside of the wire, $y_{\text{imp}} = -25 \text{ nm}$ (see Fig. 3), because the strength of the pinning and scattering is maximized in this case as it has been addressed in Ref. 36.

In order to obtain the remanent states of the nanowires, we have chosen, as initial condition, the system with a single transverse domain wall in the head-to-head structure placed exactly at the middle of the two magnetic impurities (see, for example, Fig. 2). The integration of the equations of motion (2) at zero external magnetic field, $\vec{b}_i^{\text{ext}} = \vec{0}$, leads the system to a local energy minimum configuration, and we assumed that the nanowire remanent state was reached. Due to the arrangement of impurities to be symmetric, the domain wall stays at the geometric center of the wire. To study the effect of pinning and scattering, the domain wall motion was induced by the application of a low magnetic field pulse in order to move the wall toward the impurity on the right. Thus, the domain wall found a new equilibrium position in the neighborhood of the impurity (see, for example, Fig. 3). The equilibrium configurations obtained in this way were saved

and used as initial configurations in other experiments where the field was applied in both directions along the x -axis.

Over a wide range of the excitation amplitudes B and exchange constant ratio J'/J , we numerically calculated the dynamic response of the wall under the influence of a homogeneous magnetic field pulse given by $\vec{B}_i^{\text{ext}} = B \hat{x}$. In all simulations, the duration of the pulse was always the same, $\Delta t = 0.5 \text{ ns}$. The relation between the applied magnetic field and its dimensionless correspondent is $\vec{B}_i^{\text{ext}} = \mu_0 M_S \vec{b}_i^{\text{ext}}$.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

Figs. 4 and 5 are event diagrams showing the dynamics behavior of the wall under the influence of the field pulse. In Figs. 4 and 5, the sub-figures (a) and (c) represent the situation where the impurities were located on the wire axis and sub-figures (b) and (d) represent the situation where the impurities were located on the wire edge. In sub-figures (a) and (b), the magnetic field was applied in the negative direction of the x -axis, whereas in sub-figures (c) and (d), it was applied in the opposite direction (in the positive direction of the x -axis). From Figs. 4 and 5, we can observe the occurrence of some events, which are indicated in their captions.

Analyzing Fig. 4, it can be noted that there is a depinning field, which is the minimum value of the applied field required for the domain wall escapes from the potential well created by the pinning impurity. Below this minimum value, the domain wall remains pinned to the impurity. The magnitude of the depinning field depends not only on the reduction of the exchange constant but also on the impurities location. It is possible to observe that pinning effects are stronger when the impurities are on the wire's edge, in particular, that one where domain wall is narrower. This observation is in agreement with the results presented in our recent work.³⁶ In that work, due to the fact that the domain wall is asymmetric with respect to the y -axis (see Fig. 1), we demonstrated that when the impurity is located on the wire edge where

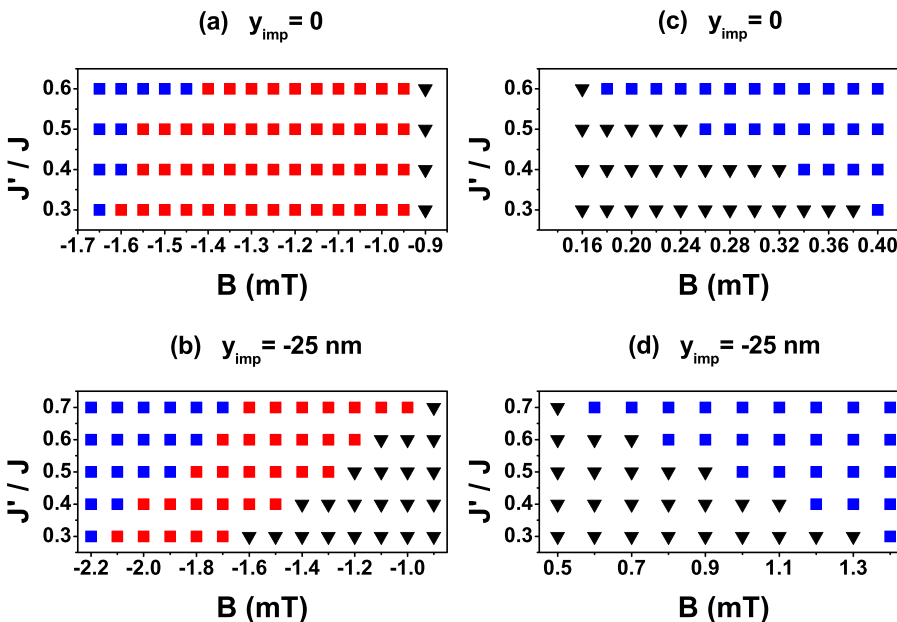


FIG. 4. Position controllability diagrams of the domain wall using a pair of magnetic impurities acting as pinning sites. Black triangles correspond to a combination of parameters for which the wall remained trapped to the impurity on the right. Red squares correspond to the events in which the domain wall position could be controlled, that is, after applying the magnetic field pulse, the wall was moved toward the impurity on the left and was captured by it (see the video in the supplementary material⁴⁰ labeled S1). Blue squares correspond to the events where the wall was depinned from the impurity on the right and was expelled.

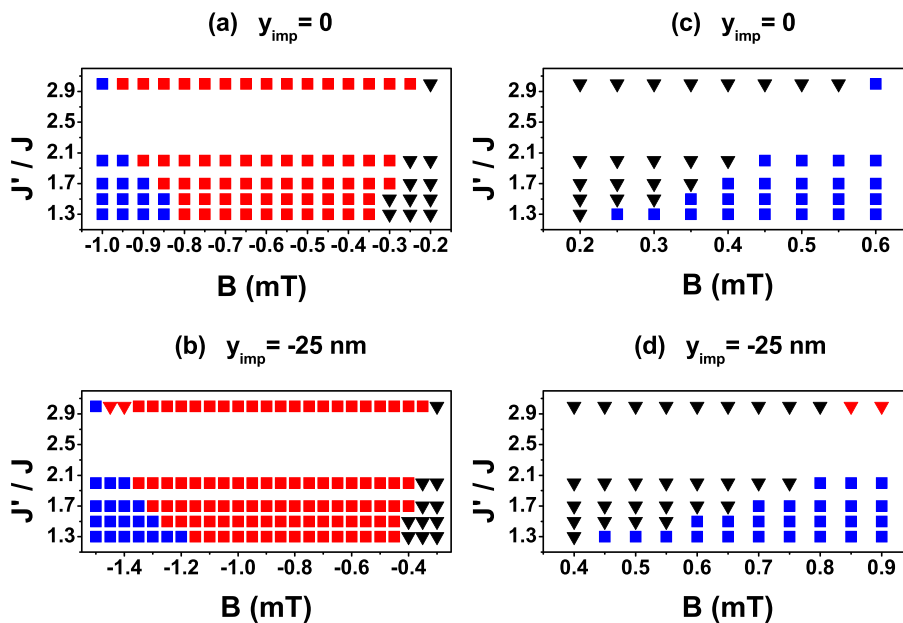


FIG. 5. Position controllability diagrams of the domain wall using a pair of magnetic impurities acting as scattering sites. Black triangles correspond to a combination of parameters for which the wall remained on its equilibrium position near the impurity on the right. Red squares correspond to the events in which the domain wall position could be controlled, that is, after applying the magnetic field pulse, the wall was moved toward the impurity on the left and was blocked by it (see the video in the supplementary material⁴⁰ labeled S2). Red triangles correspond to a combination of parameters for which the wall stopped on its equilibrium position near the impurity on the left. Blue squares correspond to the events where the wall was not blocked by the impurities and was expelled.

head-to-head domain wall is narrower, the strength of the pinning and scattering are maximized. For excitation amplitudes strong enough above the depinning field, the wall can escape from the potential well created by the impurity, and it can result in the wall expulsion or wall capture by the second impurity, depending on the direction of the applied field.

The diagrams of Fig. 5 are similar to the diagrams of Fig. 4 except that the impurities represent potential barriers for the domain wall. By analyzing Figs. 5(c) and 5(d), one can observe that there is a deblocking field which is the minimum value of the applied field required for the domain wall that overcomes the potential barrier created by the scattering impurity. Below this minimum value, the domain wall remains blocked by the impurity. The magnitude of the deblocking field depends not only on the increase of the exchange constant but also on the impurities location, for the same reasons explained above. For excitation amplitudes strong enough above the deblocking field, the wall can overcome the potential barrier created by the impurity, and it can result in the wall expulsion or wall blocking by the second impurity, depending on the direction of the applied field.

Since we know the depinning or deblocking fields, it is possible to control the domain wall position in modified nanowires. The control of the domain wall position occurs in a certain range of the parameters involving the tuning of the excitation amplitude and the depth (height) of the potential well (barrier) (see, for example, the supplemental videos S1 and S2 in Ref. 40).

Furthermore, it was observed in our simulations that tail-to-tail domain wall is asymmetric with respect to the y-axis and is narrower on one of the wire edges. Although in this work we considered the head-to-head domain wall, we found that for both types of wall and chirality, if we strategically inserted the magnetic impurities on the wire edge where the domain wall is narrower, the strength of the pinning and scattering will be maximized. Consequently, one can also control the position of the tail-to-tail domain wall with the same parameters used to control the position of the

head-to-head domain wall (see, for example, videos S3 and S4 in Ref. 40).

In summary, we have demonstrated by computational simulation that dynamics of the transverse domain wall in a rectangular magnetic nanowire can be controlled introducing a distribution of magnetic impurities in the system. The magnetic impurities consisting of a local variation of the exchange stiffness constant can represent locally a potential well or a potential barrier for the domain wall. The usage of a linear arrangement of impurities consisting of a pair of identical magnetic impurities has been proposed to stabilize the domain wall motion. By imposing very well defined positions along the wire (pinning or scattering sites), we can control the domain wall position. Although the results presented here are for a very simple distribution of magnetic impurities, we believe their consequences can be planned and extended for the realization of future spintronic devices based on magnetic domain walls.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian Agencies). Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF. We would like to thank our friend Dr. Wilson Oliveira, who is no more for pleasant coexistence and friendship in these 24 years in the Departamento de Física da UFJF.

¹D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. P. Cowburn, *Science* **309**, 1688–1692 (2005).

²K. Nagai, Y. Cao, T. Tanaka, and K. Matsuyama, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D130 (2012).

³S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, *Science* **320**, 190–194 (2008).

⁴M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. P. Parkin, *Science* **320**, 209–211 (2008).

⁵R. P. Cowburn, D. A. Allwood, G. Xiong, and M. D. Cooke, *J. Appl. Phys.* **91**, 6949–6951 (2002).

- ⁶A. Himeno, T. Ono, S. Nasu, K. Shigeto, K. Mibu, and T. Shinjo, *J. Appl. Phys.* **93**, 8430–8432 (2003).
- ⁷M. Hayashi, L. Thomas, Ya. B. Bazaliy, C. Rettner, R. Moriya, X. Jiang, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 197207 (2006).
- ⁸A. Kunz and E. W. Rentsch, *IEEE Trans. Magn.* **46**, 1556–1558 (2010).
- ⁹T. Ono, K. Shigeto, K. Mibu, N. Hosoi, and T. Shinjo, *Science* **284**, 468–470 (1999).
- ¹⁰D. Atkinson, D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, and R. P. Cowburn, *Nature Mater.* **2**, 85–87 (2003).
- ¹¹Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, *Nature Mater.* **2**, 521–523 (2003).
- ¹²G. S. D. Beach, C. Nistor, C. Knutson, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *Nature Mater.* **4**, 741–744 (2005).
- ¹³C.-Y. You, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 192514 (2008).
- ¹⁴M. Vázquez, G. A. Basheed, G. Infante, and R. P. D. Real, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 037201 (2012).
- ¹⁵L. Berger, *J. Appl. Phys.* **49**, 2156–2161 (1978).
- ¹⁶A. Yamaguchi, T. Ono, S. Nasu, K. Miyake, K. Mibu, and T. Shinjo, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 077205 (2004).
- ¹⁷M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, Y. B. Bazaliy, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 037204 (2007).
- ¹⁸G. S. D. Beach, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1272–1281 (2008).
- ¹⁹C. K. Lim, T. Devolder, C. Chappert, J. Grollier, V. Cros, A. Vaurès, A. Fert, and G. Faini, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2820–2822 (2004).
- ²⁰M. Kläui, H. Ehrke, U. Rüdiger, T. Kasama, R. E. Dunin-Borkowski, D. Backes, L. J. Heyderman, C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, G. Faini, E. Cambril, and W. Wernsdorfer, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 102509 (2005).
- ²¹L. Thomas, M. Hayashi, X. Jiang, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. P. Parkin, *Nature (London)* **443**, 197–200 (2006).
- ²²M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, X. Jiang, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 207205 (2006).
- ²³M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, and S. S. P. Parkin, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 162503 (2008).
- ²⁴L. K. Bogart, D. Atkinson, K. O'Shea, D. McGrouther, and S. McVitie, *Phys. Rev. B* **79**, 054414 (2009).
- ²⁵M.-Y. Im, L. Bocklage, P. Fischer, and G. Meier, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 147204 (2009).
- ²⁶D. Djuhana, H.-G. Piao, S.-H. Lee, D.-H. Kim, S.-M. Ahn, and S.-B. Choe, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 022511 (2010).
- ²⁷C. Chappert, H. Bernas, J. Ferre, V. Kottler, J.-P. Jamet, Y. Chen, E. Cambril, T. Devolder, F. Rousseaux, V. Mathet, and H. Launois, *Science* **280**, 1919–1922 (1998).
- ²⁸L. D. Ozkaya, R. M. Langford, W. L. Chan, and A. K. Petford-Long, *J. Appl. Phys.* **91**, 9937–9942 (2002).
- ²⁹L. Folks, R. E. Fontana, B. A. Gurney, J. R. Childress, S. Maat, J. A. Katine, J. E. E. Baglin, and A. J. Kelloc, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 2601–2604 (2003).
- ³⁰J. Fassbender, J. von Borany, A. Mücklich, K. Potzger, W. Möller, J. McCord, L. Schultz, and R. Mattheis, *Phys. Rev. B* **73**, 184410 (2006).
- ³¹J. Fassbender and J. McCord, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 579–596 (2008).
- ³²J. Fassbender, T. Strache, M. O. Liedke, D. Markó, S. Wintz, K. Lenz, A. Keller, S. Facsko, I. Mönch, and J. McCord, *New J. Phys.* **11**, 125002 (2009).
- ³³A. Vogel, S. Wintz, T. Gerhardt, L. Bocklage, T. Strache, M.-Y. Im, P. Fisher, J. Fassbender, J. McCord, and G. Meier, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 202501 (2011).
- ³⁴M. A. Basith, S. McVitie, D. McGrouther, and J. N. Chapman, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 232402 (2012).
- ³⁵T. Gerhardt, A. Drews, and G. Meier, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 024208 (2012).
- ³⁶V. A. Ferreira, D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, R. A. Dias, and F. Sato, *J. Appl. Phys.* **114**, 013907 (2013).
- ³⁷D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 076104 (2011).
- ³⁸J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083–3086 (2012).
- ³⁹D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 252402 (2012).
- ⁴⁰See the supplementary material at <http://dx.doi.org/10.1063/1.4872438> for videos of the following: video S1 shows the control of the head-to-head domain wall position using a pair of magnetic impurities acting as pinning sites. In this simulation, we have used $J'/J = 0.5$ and excitation amplitude $B = 1.60$ mT. Initially, the field pulse was applied in the negative direction of the x-axis. After the wall is captured by the impurity on the left, the field pulse was applied in the opposite direction, and so on. Video S2 shows the control of the head-to-head domain wall position using a pair of magnetic impurities acting as scattering sites. In this simulation, we have used $J'/J = 1.5$ and excitation amplitude $B = 1.15$ mT. Initially, the field pulse was applied in the negative direction of the x-axis. After the wall is blocked by the impurity on the left, the field pulse was applied in the opposite direction, and so on. Video S3 shows the control of the tail-to-tail domain wall position using a pair of magnetic impurities acting as pinning sites. In this simulation, we have used $J'/J = 0.5$ and excitation amplitude $B = 1.60$ mT. Initially, the field pulse was applied in the negative direction of the x-axis. After the wall is captured by the impurity on the left, the field pulse was applied in the opposite direction, and so on. Video S4 shows the control of the tail-to-tail domain wall position using a pair of magnetic impurities acting as scattering sites. In this simulation, we have used $J'/J = 1.5$ and excitation amplitude $B = 1.15$ mT. Initially, the field pulse was applied in the negative direction of the x-axis. After the wall is blocked by the impurity on the left, the field pulse was applied in the opposite direction, and so on.

