



UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

COMPORTAMENTO DE VÓRTICES EM NANODISCOS MAGNÉTICOS NA PRESENÇA DE DEFEITOS NÃO- MAGNÉTICOS

DIEGO FERREIRA CARNEIRO

**Trabalho de dissertação de Mestrado
apresentado à banca examinadora como
requisito parcial à obtenção de título de Mestre
em Física.**

ORIENTADOR: PROF. Dr. SIDINEY DE ANDRADE LEONEL

Juiz de Fora, MG , 2006

Esta dissertação de Mestrado foi analisada e julgada adequada para obtenção de título de Mestre em Física e avaliada em sua forma final pelo orientador e pelos participantes da banca examinadora.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Prof. Dr. Winder Alexander de Moura Melo

Aos meus pais.

Agradecimentos

À Deus, criador e mantenedor do universo;

Aos meus pais Carlos Alberto Alvez Carneiro pelo apoio, carinho e amor que eles tem me dado;

Ao meu irmão Deivy e minha cunhada Ana Paula pelo apoio e grande amizade que nós temos;

À minha namorada Jussara Rafael Ângelo pelo amor e compreensão que tem demonstrado neste período.

Ao grande amigo e parceiro Douglas Martins pela amizade e apoio em todos os momentos.

Aos meus grandes amigos Daniel Berbert e Anderson Moraes que mostraram os grandes irmãos que são pra mim.

A galera da república André Aredes (boi), Beto, Felipe (my lord) e Ted, por proporcionarem momentos inesquecíveis de viola e amizade .

Ao meu orientador. Dr. Sidiney Andrade Leonel, pela amizade construída durante este período, e grande paciência;

Aos grandes amigos que tive a honra de conhecer, Douglas, Bruno Gonçalves, Fernando, Otávio, André Aredes, “World trade”, Charles, Ivo, Helen, Roberto Sales, Rubim, Edgar, Paulo César.

Resumo

Nos últimos anos, o progresso da nanotecnologia permitiu a fabricação de amostras magnéticas com dimensão na escala nanométrica, bem como a evolução de técnicas experimentais para medir suas propriedades. Verificou-se experimentalmente que vórtices aparecem como estados de magnetização de energia mínima em nanodiscos magnéticos. Em escala nanométrica, o efeito de borda e a energia magnetostática tornam-se importantes, criando uma anisotropia de borda sobre os spins próximos a esta. Sabe-se que vórtices são atraídos e presos por defeitos existentes em nanodiscos magnéticos. Isto sugere um mecanismo de controle do movimento de vórtices. Em nosso trabalho estamos interessados em verificar os efeitos de dois buracos sobre a estabilidade do vórtice e sobre a curva de histerese de um nanodisco magnético. Para isto, descrevemos o comportamento magnético de um nanodisco utilizando o modelo de vórtice rígido (analítico) e o modelo XY (simulação) com um termo de anisotropia de borda, um termo de interação com um campo externo e potenciais simulando a existência de buracos. Realizamos cálculos analíticos e de simulação Monte Carlo verificando que a curva de histerese apresenta dois "saltos" que estão associados com dois estados estáveis de vórtices presos, em cada situação, em um dos buracos. Verificamos também que existe um campo crítico que faz o "chaveamento" entre esses dois estados, campo este dependente da distância entre os buracos. Nossas previsões teóricas concordam com resultados experimentais recentes, sugerindo a aplicação desse mecanismo para a construção de memória magnética e elementos de lógica.

Abstract

In recent years, the progress of the nanotechnology allowed the manufacture of magnetic samples with dimension in the nanometric scale, as well as the evolution of experimental techniques to measure its properties. It was verified experimentally that vortices appear as states of magnetization of minimum energy in magnetic dots. In nanometric scale, the effect of edge and the magnetostatic energy become important, creating an edge anisotropy on spins next to this. We know that vortices are attracted and imprisoned for existing defects in magnetic dots. This suggests a mechanism of control of the movement of vortices. In our work we are interested in verifying the effect of two holes on the stability of the vortex and the curve of hysteresis of a magnetic dot. For this, we describe the magnetic behavior of a dot using the model of rigid vortex (analytical) and model XY (simulation) with a term of edge anisotropy, term of interaction with a external field and potential simulating the existence of holes. We carry through analytical calculations and of Monte Carlo simulation verifying that the hysteresis curve presents two “jumps” that are associates with two steady states of imprisoned vortices, in each situation, one of the holes. We also verify that a critical field exists that makes the “switching” between these two states, field this dependent of in the distance between the holes. Our theoretical forecasts agree to recent experimental results, suggesting the application of this mechanism for the construction of magnetic memory and elements of logic.

SUMÁRIO

Resumo.....	v
Abstract.....	vi
Introdução.....	9
1 Materiais magnéticos em baixas dimensões.....	14
1.1 Modelo de Heisenberg.....	16
1.2 Modelo XY e Rotor Planar.....	18
1.3 Modelo XY no limite contínuo.....	19
1.4 O vórtice e a transição de Kosterlitz-Thouless.....	26
1.5 O método Monte Carlo.....	31
1.5.1 Considerações gerais.....	32
1.5.2 Transição entre estados de energia.....	33
1.5.3 Algoritmo de Metropolis.....	34
2 Modelo do nanodisco com dois buracos.....	38
2.1 Considerações gerais e motivações.....	38
2.2 O modelo analítico.....	40
2.3 Modelo analítico na presença de campo externo.....	50
2.3.1 Cálculo da magnetização.....	52
2.3.2 Obtenção da curva de histerese.....	54
3 Resultados de simulações.....	56
3.1 Considerações gerais.....	56

3.2	Resultados obtidos	57
3.2.1	Simulação da curva de histerese	64
	Conclusão e perspectivas futuras	68
	bibliografia.	69

INTRODUÇÃO

Os fenômenos magnéticos ganharam uma dimensão muito grande a partir do século XIX, com a descoberta de sua correlação com a eletricidade. Em 1820, o físico e químico Hans Christian Oersted descobriu que uma corrente elétrica passando por um fio também produzia efeito magnético, mudando a orientação da agulha de uma bússola nas proximidades. Mais tarde, o físico e matemático francês Andre Ampère formulou a lei que relaciona o campo magnético com a intensidade da corrente do fio. O efeito recíproco, pelo qual um fio próximo de um ímã sofre a ação de uma força quando atravessado por uma corrente, foi descoberto logo em seguida. Pouco depois, em 1831, Michel Faraday na Inglaterra e Joseph Henry nos Estados Unidos, descobriram que um campo variável podia induzir uma corrente elétrica num circuito. No final do século XIX estes três fenômenos eram perfeitamente compreendidos e já tinham inúmeras aplicações tecnológicas, das quais o motor e o gerador elétrico eram as mais importantes.

Atualmente, os materiais magnéticos desempenham papel muito importante nas aplicações tecnológicas do magnetismo. Nas aplicações tradicionais, como em motores, geradores, transformadores, etc., eles são utilizados em duas categorias: os **ímãs permanentes** são aqueles que têm a propriedade de criar um campo magnético constante; **os materiais doces, ou permeáveis**, são aqueles que produzem um campo proporcional à corrente num fio nele enrolado, muito maior ao que seria criado apenas pela corrente. A terceira aplicação tradicional dos materiais magnéticos, que adquiriu grande importância nas últimas décadas, é a **gravação magnética**. Esta aplicação é baseada na propriedade que tem a corrente numa bobina, na cabeça de gravação, em alterar o estado de magnetização de um meio magnético próximo. Isto possibilita armazenar no meio a informação contida num sinal elétrico. A recuperação, ou a leitura, da informação gravada, é feita, tradicionalmente, através da indução de uma corrente elétrica pelo meio magnético em movimento na bobina da cabeça de leitura. A gravação magnética é a melhor tecnologia da eletrônica para armazenamento não-volátil de informação que permite

regravação. Ela é essencial para o funcionamento dos gravadores de som e de vídeo, de inúmeros equipamentos acionados por cartões magnéticos, e tornou-se muito importante nos computadores.

As propriedades magnéticas das substâncias se devem a uma propriedade intrínseca dos elétrons, seu *spin* (palavra em inglês que significa girar em torno de si mesmo). Como o elétron tem carga, ao *spin* está associado um momento magnético, o qual se comporta como uma minúscula agulha magnética, tendendo a se alinhar na direção do campo magnético a que está submetida. Nos átomos mais comuns o *spin* total é nulo, pois os elétrons ocupam os orbitais satisfazendo o princípio de Linus Pauling, ora com o *spin* num sentido, ora no outro. Entretanto, para certos elementos da tabela periódica, o *spin* total é diferente de zero, fazendo com que o átomo tenha um momento magnético permanente. Este é o caso dos elementos do grupo de transição do ferro, como níquel, manganês, ferro e cobalto, e vários elementos de terras raras, como európio, gadolínio, etc. Os materiais formados por esses elementos ou suas ligas têm propriedades que possibilitam suas aplicações tecnológicas. O mercado mundial de materiais magnéticos e seus dispositivos compreendem, atualmente, cerca de 150 bilhões de dólares por ano. Por essa razão, a pesquisa para seu aperfeiçoamento é muito intensa em todo o mundo. Mas não é apenas por sua importância tecnológica e econômica que os materiais magnéticos concentram hoje intensa atividade de pesquisa no mundo inteiro. O magnetismo dos materiais constitui um dos campos de pesquisa mais férteis e ativos da física, dada à imensa diversidade das suas propriedades e dos fenômenos que neles são observados.

As aplicações mencionadas são baseadas em propriedades e fenômenos clássicos, todos conhecidos e compreendidos desde o início do século XX. A evolução tecnológica dessas aplicações ocorreu por causa da descoberta de novos materiais, aperfeiçoamento das técnicas de preparação, etc. Porém, nos últimos 15 anos, a pesquisa em materiais magnéticos ganhou um grande impulso por conta de descobertas feitas com estruturas artificiais de filmes muito finos. Os filmes finos podem ser preparados por vários métodos diferentes, dependendo da composição, espessura e aplicação. Todos eles se baseiam na deposição gradual de átomos ou moléculas do material desejado sobre a superfície de outro material que serve de apoio, chamado **substrato**. A fabricação de filmes ultra-finos, com espessuras da ordem ou fração de 1 nanômetro ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$), tornou-se possível graças à evolução das técnicas de alto vácuo. Hoje é possível fabricar estruturas artificiais controlando a deposição de camadas no nível atômico, com alto grau de perfeição e pureza.

É também possível depositar sobre um filme com certa composição química, outro filme de composição diferente. Isto possibilita a fabricação de estruturas com propriedades magnéticas muito diferentes das tradicionais, cuja compreensão microscópica exige o conhecimento detalhado dos filmes, das interfaces e das interações entre os átomos. Estas estruturas compreendem filmes simples de uma única camada magnética sobre um substrato, ou filmes magnéticos e não-magnéticos intercalados, e também estruturas com mais de uma dimensão na escala nanométrica, chamadas nano-estruturas magnéticas de maiores dimensões.

A possibilidade de se fabricar estruturas magnéticas artificiais na escala nanométrica, tem levado ao surgimento de novas áreas de pesquisa básica em magnetismo, estimuladas pela descoberta de novos fenômenos. No movimento de um elétron atravessando um filme grosso (com espessuras de 1 micrômetro ou mais), ele sofre inúmeras colisões no trajeto, perdendo a memória de seu *spin*. No entanto, ao atravessar um filme de espessura nanométrica, ele preserva a orientação original do *spin*. Isto dá origem a propriedades de nano-estruturas magnéticas que não eram conhecidas nos materiais. Um dos novos fenômenos mais importantes é a magnetoresistência gigante, observada em multicamadas de certos filmes magnéticos (como Fe, Co, Ni e suas ligas) intercalados com filmes metálicos não magnéticos (como Cr, Cu, Ru). Para certas espessuras dos filmes não-magnéticos, da ordem de 1 nm, a resistência do sistema varia muito com o campo magnético nele aplicado. Este fenômeno foi descoberto em 1989, tendo como autor principal do trabalho original de Mario Baibich [1]. Este efeito permite fabricar um sensor magnético de dimensões físicas muito reduzidas, que ao ser atravessado por uma corrente elétrica, desenvolve uma tensão elétrica que depende do campo magnético. Além deste, vários outros fenômenos foram descobertos nos últimos anos, tais como acoplamento entre camadas vizinhas, transporte dependente de *spin*, efeito túnel magnético, entre outros. Estes fenômenos têm provocado o surgimento de um grande número de trabalhos científicos que procuram caracterizar as propriedades dos materiais, descobrir novos sistemas e fenômenos e entender microscopicamente suas origens. Por outro lado, as diversas aplicações desses fenômenos na eletrônica estão dando origem a um novo ramo da tecnologia, chamado **spintrônica**, no qual as funções dos dispositivos são baseadas no controle do movimento dos elétrons através do campo magnético que atua sobre o *spin*.

Recentemente, a tecnologia de leitura magnética foi revolucionada com a introdução de cabeças magneto-resistivas, baseadas no efeito de magneto-resistência gigante. Os

avanços tecnológicos nesta área são impressionantes. Para exemplificar, a capacidade de gravação magnética nos discos dos computadores que, em 1995 era de 1 Gigabits/polegada², com a introdução das cabeças de leitura de magneto-resistência gigante, passou para 20 Gigabits/polegada² em 2002, possibilitando fabricar *disk-drives* com capacidades superiores a 100 Gigabits. Nos últimos dois anos ganhou força a idéia de que será possível fabricar uma memória RAM de efeito túnel magnético que venha substituir as memórias de semicondutores atualmente utilizadas, com a grande vantagem de ser não-volátil. Além dessas aplicações, muitas outras estão sendo pesquisadas com base em diversos dispositivos já produzidos em forma de protótipos, como válvulas de *spin*, transistor de *spin* etc.

Como exemplo de outra amostra na escala nanométrica, temos os chamados “magnetic dots”. Estas amostras magnéticas na forma de cilindro, disco ou prisma são fabricados com materiais magnéticos tais como Cobalto e liga de Permalloy ($\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$). Estes materiais ferromagnéticos modelados nas três dimensões espaciais em escala nanométrica apresentam propriedades interessantes, tanto do ponto de vista fundamental quanto do ponto de vista de aplicação tecnológica [2]. Vórtices magnéticos são frequentemente observados em nanopartículas magnéticas em forma de disco e estão sendo investigados de forma intensa, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental [3,4,5,6,7,8]. Estes nanodiscos magnéticos, por apresentarem esta estrutura em forma de vórtice, têm grande potencial para aplicações tecnológicas tais como construção de dispositivos magnéticos de memória de alta densidade [9,10] e sensores de campo magnético de alta-resolução [11].

Sabe-se que a diminuição das dimensões laterais de um ferromagneto faz com que a sua energia magnetostática cresça, aumentando a sua competição com a energia de “exchange”, propiciando assim o aparecimento do vórtice [2]. O efeito de borda torna-se importante na escala nanométrica, por exemplo, a superfície distorce o campo cristalino que atua num íon magnético próximo mudando a anisotropia drasticamente. Isto gera uma anisotropia específica de sítio na borda para os spins, com um eixo preferencial coincidindo com um vetor normal à superfície.

A influência de defeitos em forma de buracos sobre a magnetização de nanodiscos, também pode levar à interessantes aplicações, como controlar o movimento de vórtices sobre estes nanodiscos. Resultados recentes de simulação e de experimentos [11,12,13] mostram que vórtices podem ser atraídos e presos por impurezas não-magnéticas ou

buracos. Atualmente já é possível, usando-se técnicas de litografia, a fabricação de nanodiscos de liga de Permalloy contendo buracos e controlar o movimento do vórtice sobre esses nanodiscos, com a aplicação de um campo magnético externo [12,14,15]. Por exemplo, elementos magnetoresistivos usados para armazenamentos de dados ou operações lógicas, necessitam do “chaveamento” entre dois estados magnéticos estáveis. Um nanodisco magnético contendo dois buracos e sobre a influência de um campo magnético externo, pode ser usado como uma forma alternativa para realizar este “chaveamento” entre dois estados magnéticos estáveis [16]. A tese a seguir se encontra organizada da seguinte maneira: no capítulo 1 faremos uma breve revisão sobre os modelos magnéticos 2D e a dinâmica envolvida. No capítulo 2 será feita uma investigação analítica de como vórtices magnéticos, descritos pelo modelo de Heisenberg, que estão na superfície do nano-disco, são influenciados pela presença de dois buracos não-magnéticos (anti-dots). De forma geral veremos como esses “anti-dots” modificam o potencial de exchange efetivo experimentado pelo vórtice e a influência na curva de histerese. No capítulo 3 veremos os resultados da simulação feitos para o nano-disco. E finalmente apresentaremos as conclusões.

CAPÍTULO 1

MATERIAIS MAGNÉTICOS EM BAIXAS DIMENSÕES

Devido à simplificação dos cálculos matemáticos, materiais magnéticos de baixas dimensões (1D e 2D) tem sido estudado com rigor, no qual podemos exemplificar o modelo de Ising que é resolvido exatamente para uma e duas dimensões. Porém, mesmo em baixas dimensões, resultados exatos são dificilmente obtidos levando à introdução de cálculos numéricos ou aproximados.

Já que a natureza nos apresenta muitas variedades de compostos com características de materiais magnéticos com baixa dimensionalidade, como supercondutores, cristais líquidos, filmes super-fluido, passaram-se a produzir materiais que crescem em cadeias ou camadas, ratificando os modelos 1D e 2D. Além disso, há um grande interesse desse magnetismo em aplicações tecnológicas como armazenagem e transmissão de dados.

Em muitos casos pode haver uma grande diferença entre os resultados teóricos e experimentais. Isto ocorre porque a maioria dos modelos teóricos não inclui impurezas que aparecem nas amostras usadas pelos experimentais. As impurezas aparecem, muitas vezes, devido às dificuldades encontradas na fabricação de amostras. Nos processos de crescimento de cristais, por exemplo, a presença, algumas vezes indesejada, de átomos ou moléculas de elementos que não estão na constituição original deste cristal é constante. Os efeitos na estrutura e nas propriedades dos cristais causados por estes "defeitos" muitas vezes não podem ser previstos pela teoria.

Nas cadeias ou camadas, que fazem parte dos materiais magnéticos, existem interação de troca inter-camada ou inter-cadeia devido aos radicais orgânicos ou íons dos metais alcalinos. Entretanto, apesar da interação de troca ser pequena, esses materiais podem apresentar comportamento tridimensional para temperaturas muito baixas, como é o caso do Hélio líquido. Então, acima de certa temperatura, o material apresentará uma dimensionalidade baixa, tendo uma estrutura de cadeia (1D) ou de camada (2D). Esta é a conhecida região de flutuação que é muito explorada pelos experimentais.

Um exemplo muito conhecido de material 1D é o $CsNiF_3$ (Fig.1.1). Já para um material de comportamento 2D, podemos citar o grafite magneticamente intercalado (K_2NiF_2) (Fig.1.2).

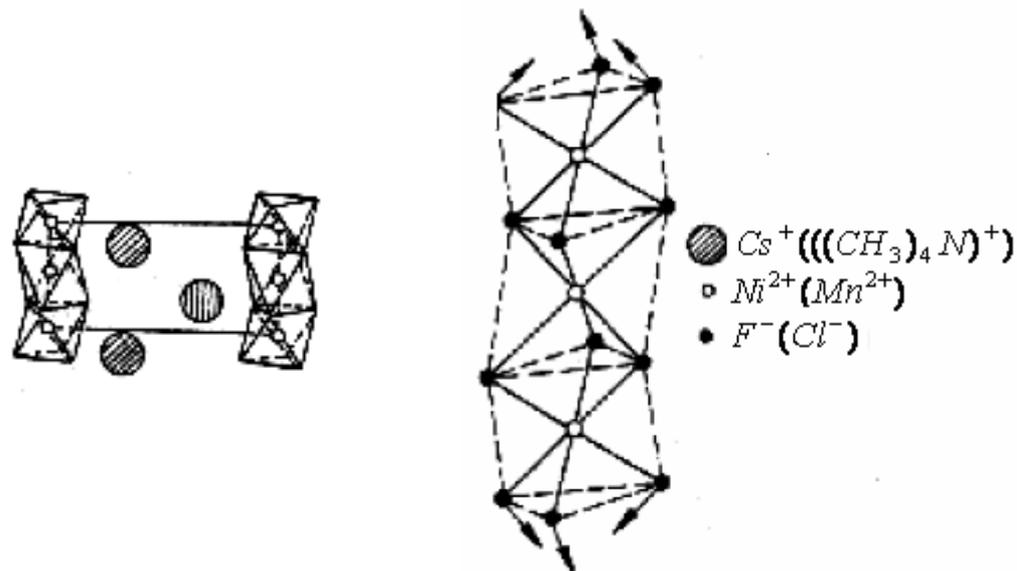


Figura 1.1. Material magnético unidimensional ($CsNiF_3$).

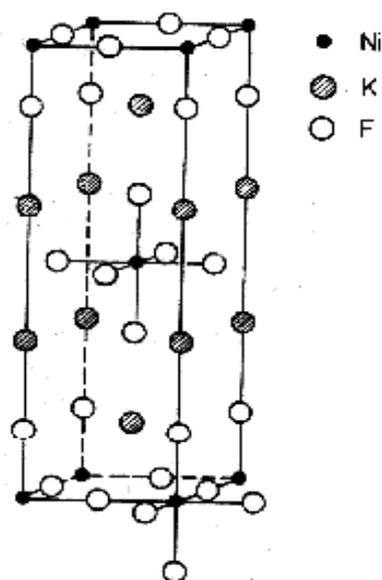


Figura 1.2. Material magnético bidimensional *Tetrafluoreto de Níquel de Potássio* (K_2NiF_2).

1.1 – MODELO DE HEISENBERG

Ao considerarmos um material magnético, podemos observar suas propriedades através das leis mecânica quântica. Entretanto, para sistemas magnéticos com milhões de partículas, é necessário adotar simplificações. Assim, a interação de troca, de origem eletrostática, é responsável pelas propriedades magnéticas de materiais com momento magnéticos localizados. Isso dá origem a um termo de interação de troca que pode ser modelado por $-J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, onde \vec{S}_i é o spin do íon localizado no sítio i . Logo, para um material com vários spins eletrônicos localizados nos átomos da rede cristalina, o termo da energia de troca total do sistema é

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

onde a soma (i,j) indica pares de vizinhos próximos numa rede bidimensional. Este hamiltoniano isotrópico, que só depende da orientação relativas dos spins, é conhecido como hamiltoniano de Heisenberg. Para spins vizinhos temos que $J_{i,j} = J$. Para $J > 0$ temos o acoplamento ferromagnético, uma vez que a configuração mínima do estado fundamental é atingida quando os spins estão alinhados paralelamente ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = 1$). Da mesma forma para $J < 0$ teremos o acoplamento antiferromagnético, em que os spins estão alinhados anti-paralelamente ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$)

Alguns tipos de interações, como spin – órbita e interação dipolar spin - spin, não explicam algumas transições de fase que ocorrem em certos materiais, já que estas são de longo alcance e muito mais fracas comparadas à interação de troca. Entretanto essas interações podem produzir uma anisotropia (direção preferencial para os spins apontarem). Assim, a expressão para o hamiltoniano de spin do modelo de Heisenberg anisotrópico pode ser dada por:

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z). \quad (1.2)$$

Esta hamiltoniana nos mostra vários modelos teóricos para diferentes valores do parâmetro de anisotropia λ :

- Para $\lambda = 1$ recuperamos o modelo de Heisenberg isotrópico no qual os spins não tem direção preferencial para apontar. Como exemplo, temos os íons Mn^{+2} e Fe^{3+} .
- Para $0 \leq \lambda < 1$ os spins tendem a alinhar com o plano xy, o que leva ao modelo de Heisenberg de plano – fácil (Fig.1.3).

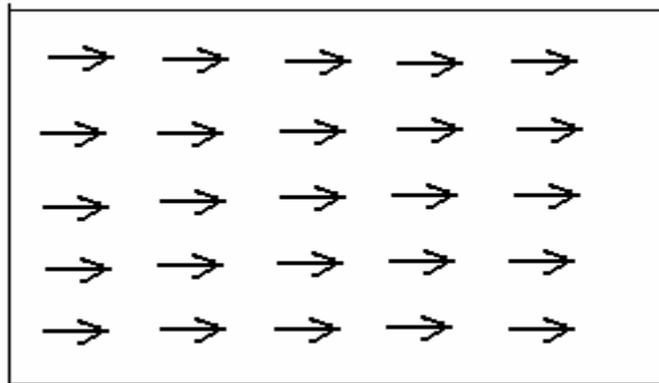


Figura 1.3. Rede quadrada de um sistema ferromagnético de plano – fácil no estado fundamental.

- Para $\lambda > 1$ os spins têm a preferência de apontar na direção do eixo z. Isto caracteriza a simetria de eixo-fácil (fig.1.4), no qual temos como exemplo Co^{2+} .

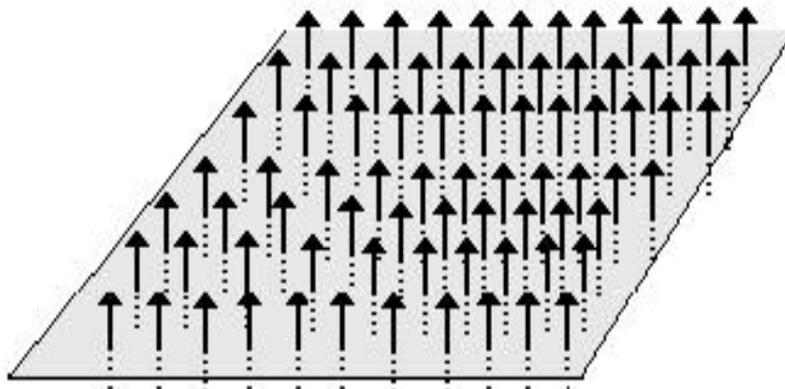


Figura 1.4. Sistema ferromagnético de eixo – fácil.

Vale ratificar que podemos adicionar um campo externo na teoria, introduzindo um termo proporcional à $\sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i$ na hamiltoniana.

1.2 MODELO XY E ROTOR PLANAR

Como extensão dos modelos citados anteriormente, temos dois de grande interesse na física, que é o modelo XY e o Rotor Planar. Como sistemas que equivalem a esses modelos, podemos citar os superfluidos, supercondutores, cristais líquidos, etc. Estes são obtidos fazendo $\lambda = 0$ na hamiltoniana (1.2).

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y). \quad (1.3)$$

Apesar da hamiltoniana do modelo XY e Rotor Planar serem iguais, a diferença dos modelos é que o XY possui dinâmica e o Rotor Planar não. Isto porque, no modelo XY, o vetor de spin \vec{S} possui três componentes $\vec{S}_i = S_i^x \hat{i} + S_i^y \hat{j} + S_i^z \hat{k}$, enquanto os spins do Rotor Planar têm duas componentes $\vec{S}_i = S_i^x \hat{i} + S_i^y \hat{j}$. Assim o Rotor Planar não possui dinâmica, já que, $[S_i^x, H] = [S_i^y, H] = 0$, pois $S_z = 0$. Apesar de termos Componentes z de spin no modelo XY, S_z não aparece no hamiltoniano, oque mostra a grande tendência dos spins ficarem no plano.

Para o modelo XY a dinâmica é obtida da seguinte forma :

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H]. \quad (1.4)$$

Os operadores de spins \vec{S}_i satisfazem à regra de quantização canônica

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\hbar \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \delta_i^j S_\gamma^i \quad (1.5)$$

onde $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é o pseudotensor de Levi-Civita completamente anti-simétrico . Esse pseudotensor assume o valor +1 se α, β, γ cíclicos e -1 se α, β, γ forem anticíclicos.

Ao adotarmos o limite clássico $S \rightarrow \infty$, podemos calcular de forma direta o comutador da expressão (1.5) e obter a equação de movimento para spins clássicos, que será dada por:

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = -J\vec{S}_i \times \sum_j (S_j^x \hat{x} + S_j^y \hat{y}), \quad (1.6)$$

onde \hat{x} e \hat{y} são os vetores unitários nas direções x e y respectivamente. Neste caso, estamos adotando spins como vetores, o que é válido, com boa aproximação, para sistema com números quânticos elevados. Assim podemos conhecer a três componentes do spin simultaneamente.

1.3 MODELO XY NO LIMITE CONTÍNUO:

Devido ao grande número de partículas que constituem os sistemas macroscópicos, seu tratamento analítico se torna muito complicado. Assim, recorre-se, muitas vezes, às técnicas de aproximações como campo médio, Monte Carlo, aproximação auto-consistente etc. Outra aproximação analítica interessante é considerar os spins dos modelos com elevados números quânticos. Os sistemas onde isso é aplicável são chamados de sistemas clássicos de spin, o que corresponde ao limite contínuo. Nesse limite nós consideramos que a direção dos spins varia lentamente e o espaçamento de rede é desprezível. Esse limite é confiável no regime de baixas temperaturas. Veremos a seguir, a versão continua para o modelo XY.

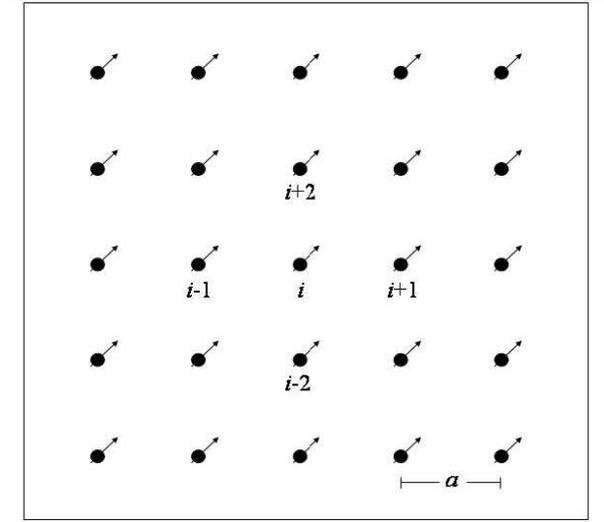


Figura 1.5. Rede quadrada com interação entre primeiros vizinhos.

Seja o vetor de spin \vec{S}_i representado por $\vec{S}_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)$, onde ϕ_i é o ângulo azimutal e θ_i o ângulo polar. Assim a Hamiltoniana (1.3) para esta aproximação fica:

$$H = -J \sum_{i,j} \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (1.6).$$

Cada spin tem apenas quatro vizinhos (Fig.1.5). Assim é conveniente separar o somatório em dois, de forma que:

$$H = -J \sum_i \left[\sin \theta_i \sin \phi_i \left(\sum_{j=1}^4 \sin \phi_j \sin \theta_j \right) + \sin \theta_i \cos \phi_i \left(\sum_{j=1}^4 \sin \theta_j \cos \phi_j \right) \right].$$

Como nesta aproximação o espaçamento de rede tende a zero, podemos expandir os vizinhos do spin \vec{S}_i em torno do sitio i como:

$$\sin \theta_{i\pm 1} \sin \phi_{i\pm 1} = \sin \theta_i \sin \phi_i \pm a \frac{\partial}{\partial x} (\sin \theta_i \sin \phi_i) + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sin \theta_i \sin \phi_i) + \dots$$

$$\sin \theta_{i\pm 2} \sin \phi_{i\pm 2} = \sin \theta_i \sin \phi_i \pm a \frac{\partial}{\partial y} (\sin \theta_i \sin \phi_i) + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\sin \theta_i \sin \phi_i) + \dots$$

$$\sin \theta_{i\pm 1} \cos \phi_{i\pm 1} = \sin \theta_i \cos \phi_i \pm a \frac{\partial}{\partial x} (\sin \theta_i \cos \phi_i) + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sin \theta_i \cos \phi_i) + \dots$$

$$\sin \theta_{i\pm 2} \cos \phi_{i\pm 2} = \sin \theta_i \cos \phi_i \pm a \frac{\partial}{\partial y} (\sin \theta_i \cos \phi_i) + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\sin \theta_i \cos \phi_i) + \dots$$

Aqui a representa o espaçamento de rede, enquanto $i+1$ e $i-1$ são os spins mais próximos ao sitio i pela direita e esquerda, respectivamente. Da mesma forma $i+2$ e $i-2$ são os vizinhos de cima e de baixo respectivamente. Substituindo os termos acima na Halmitoniana e substituindo o somatório por uma integral $\sum_i \rightarrow \int \frac{dxdy}{a^2}$, teremos:

$$\begin{aligned} H - J \int \frac{dxdy}{a^2} & \left\{ 4 \sin^2 \theta + a^2 \sin \theta \sin \phi \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sin \theta \sin \phi) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\sin \theta \sin \phi) \right] + \right. \\ & \left. + \sin \theta \cos \phi \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sin \theta \cos \phi) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\sin \theta \cos \phi) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Podemos integrar por partes os termos similares que aparecem abaixo.

$$\int \sin \theta \sin \phi \frac{d^2}{dx^2} (\sin \theta \sin \phi) dx = - \int \left[\frac{d}{dx} (\sin \theta \sin \phi) \right]^2 dx$$

$$\int \sin \theta \cos \phi \frac{d^2}{dx^2} (\sin \theta \cos \phi) dx = - \int \left[\frac{d}{dx} (\sin \theta \cos \phi) \right]^2 dx.$$

Calculando de forma similar para as derivadas em y e substituindo na Halmitoniana, teremos:

$$H = -J \int \frac{dx dy}{a^2} \left\{ 4 \sin^2 \theta - a^2 \left[\left(\frac{d}{dx} (\sin \theta \sin \phi) \right)^2 + \left(\frac{d}{dy} (\sin \theta \sin \phi) \right)^2 + \left(\frac{d}{dx} (\sin \theta \cos \phi) \right)^2 + \left(\frac{d}{dy} (\sin \theta \cos \phi) \right)^2 \right] \right\}.$$

Sabendo que

$$\left(\frac{d}{dx} (\sin \theta \sin \phi) \right)^2 = \cos^2 \theta \sin^2 \phi \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \cos^2 \phi \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + 2 \sin \theta \sin \phi \cos \theta \cos \phi \frac{d\phi}{dx} \frac{d\theta}{dx}$$

e

$$\left(\frac{d}{dx} (\sin \theta \cos \phi) \right)^2 = \cos^2 \theta \cos^2 \phi \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \sin^2 \phi \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - 2 \sin \theta \sin \phi \cos \theta \cos \phi \frac{d\phi}{dx} \frac{d\theta}{dx}$$

A Hamiltoniana ficará

$$H = \frac{J}{2} \int dx dy \left\{ \frac{4}{a^2} \cos^2 \theta + (\nabla \theta)^2 \cos^2 \theta + (\nabla \phi)^2 \sin^2 \theta \right\}. \quad (1.8)$$

onde o fator 1/2 foi inserido para não se contar o mesmo par de sítios duas vezes.

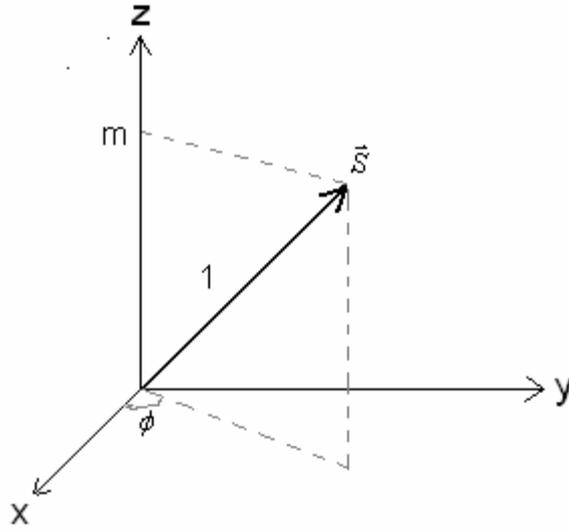


Figura 1.6. Representação do spin nos campos ϕ e m .

É muito comum em matéria condensada, adotar a parametrização de spin $\vec{S}_i = (\sqrt{1-m^2} \cos \phi, \sqrt{1-m^2} \sin \phi, m)$, onde ϕ e m são campos escalares relacionados aos ângulos azimutal e polar conforme a figura 1.6. Desta forma a Hamiltoniana fica:

$$H = \frac{J}{2} \int dx dy \left\{ \frac{4}{a^2} m^2 + \frac{m^2}{1-m^2} (\nabla m)^2 + (1-m^2) (\nabla \phi)^2 \right\}. \quad (1.9)$$

Podemos achar a dinâmica para os campos m e ϕ pela equação quântica de movimento:

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, h] \quad (1.10)$$

onde h é a densidade hamiltoniana dada por

$$h = \frac{J}{2} \left[\frac{4}{a^2} m^2 + \frac{m^2}{1-m^2} (\nabla m)^2 + (1-m^2) (\nabla \phi)^2 \right] \quad (1.11)$$

No limite em que $S \rightarrow \infty$, os campos m e ϕ formam um par de variáveis canonicamente conjugadas. De forma que

$$\dot{m} = \frac{\partial h}{\partial \varphi} \quad \text{e} \quad \dot{\varphi} = -\frac{\partial h}{\partial m} \quad (1.12)$$

A fim de descrevermos o limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico, vamos considerar uma função T que descreve a interação de uma componente do spin localizado no sítio i com seus quatro vizinhos próximos:

$$T = S_i^\alpha (S_{i+1}^\alpha + S_{i-1}^\alpha) + S_i^\alpha (S_{i+2}^\alpha + S_{i-2}^\alpha) \quad (1.13)$$

onde $\alpha = x, y, z$. Então escrevemos as componentes dos primeiros vizinhos como uma expansão em serie de Taylor de forma que:

$$T = 2S_i^\alpha S_i^\alpha + a^2 \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} S_i^\alpha + 2S_i^\alpha S_i^\alpha + a^2 \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} S_i^\alpha + \dots, \quad (1.14)$$

em que a é o espaçamento de rede, ou de outra maneira

$$T = 4(S_i^\alpha)^2 + a^2 \left[\frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} \right] S_i^\alpha, \quad (1.15)$$

onde consideramos apenas termos de segunda ordem na expansão. Então, considerando as 3 componentes e trocando as somas em (1.1) por integrais da forma $\int \frac{dx dy}{a^2}$, obtemos

$$H = -4J \iint \sum_{\alpha=1}^3 (S^\alpha)^2 \frac{dxdy}{a^2} + 2Ja^2 \iint \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^\alpha}{\partial y^2} \right] S^\alpha \frac{dxdy}{a^2} \quad (1.16)$$

Integrando por parte os termos envolvendo derivadas segundas e dividindo a expressão acima por 4 para não contarmos novamente o sítio i , temos:

$$H = -J \iint \sum_{\alpha=1}^3 (S^\alpha)^2 \frac{dxdy}{a^2} + \frac{J}{2} \iint \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S^\alpha}{\partial y} \right)^2 \right] dxdy \quad (1.17)$$

lembrando que $\vec{S} = S^x \hat{i} + S^y \hat{j} + S^z \hat{k}$. A hamiltoniana (1.17) fica :

$$H = -\frac{J}{a^2} \iint (\vec{S})^2 d^2x + \frac{J}{2} \iint \left[\left(\frac{\partial \vec{S}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \vec{S}}{\partial y} \right)^2 \right] dx^2 \quad (1.18)$$

em que $d^2x = dxdy$. A hamiltoniana pode ainda ser substituída por

$$H - E_0 = \frac{J}{2} \iint (\partial_\mu \vec{S})^2 d^2x \quad (1.19)$$

sendo $\mu = 1,2$ e $\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$. Neste caso $E_0 = -\frac{J}{a^2} \iint (\vec{S})^2 d^2x$ é a energia fundamental

do sistema. Tomando essa energia como sendo $E_0 = 0$, obtemos finalmente que:

$$H = \frac{J}{2} \iint (\partial_\mu \vec{S})^2 d^2x \quad (1.20)$$

1.4 O VÓRTICE E A TRANSIÇÃO DE KOSTERLITZ - THOULESS

Quando consideramos modelos de plano-fácil, verifica-se o surgimento de excitações topológicas chamadas de vórtices. Tais excitações ocorrem, basicamente, devido à baixa dimensionalidade do sistema. É sabido também que os vórtices são responsáveis pela transição de Kosterlitz-Thouless. Acredita-se que estes sejam responsáveis pelo pico central na função correlação dinâmica [19], observado através de simulações [20,21,22].

Os vórtices nos apresentam um mínimo local de energia do sistema. As configurações mais simples de vórtices que surgem são as do tipo planar. Neste, há uma anisotropia suficientemente grande para provocar o confinamento dos spins no plano. Assim, fazendo $m = 0$ na expressão (1.11) temos:

$$H = \frac{J}{2} \int (\nabla \phi)^2 d^2 r . \quad (1.21)$$

Esta hamiltoniana define a versão continua do modelo Rotor Planar, em que a correspondente equação de movimento, do princípio variacional, fica:

$$\frac{\delta H}{\delta \phi} = 0 \Rightarrow \nabla^2 \phi = 0 . \quad (1.22)$$

A equação de Laplace acima possui uma solução do tipo vórtice, o qual pode ser representado por:

$$\phi_v(x, y) = q \tan^{-1} \left(\frac{y - y_v}{x - x_v} \right) \quad (1.23)$$

em que q é definida como a carga topológica do vórtice e o par (x_v, y_v) é o centro do sistema. Pensemos então uma configuração em que a carga topológica é $q = +1$, conforme a figura (1.7). Uma forma de definir um vórtice é pela configuração na qual a soma da

diferença dos ângulos de spins vizinhos, numa mesma distância do centro, seja múltiplo de 2π . Podemos sintetizar esta definição através de um conjunto de condições de contorno sobre uma integral de circulação, da forma:

$$\oint \nabla \phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 2\pi(q) \quad (1.24)$$

em que as curvas fechadas englobam a posição do centro do vórtice (\vec{r}_v)

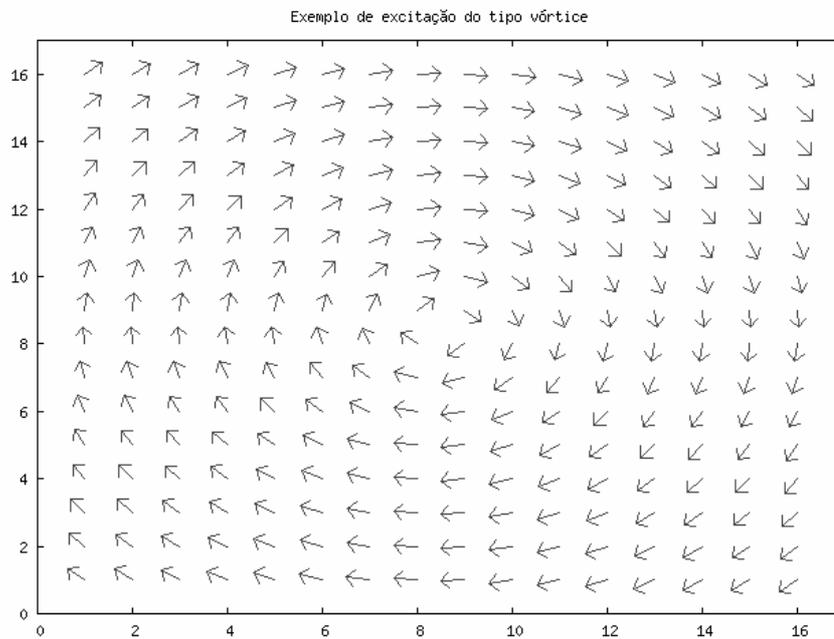


Figura 1.7. Vórtice de carga topológica $q = +1$.

Um vórtice com carga topológica $q = -1$ é usualmente chamado de antivórtice e pode ser representado pela figura (1.8).

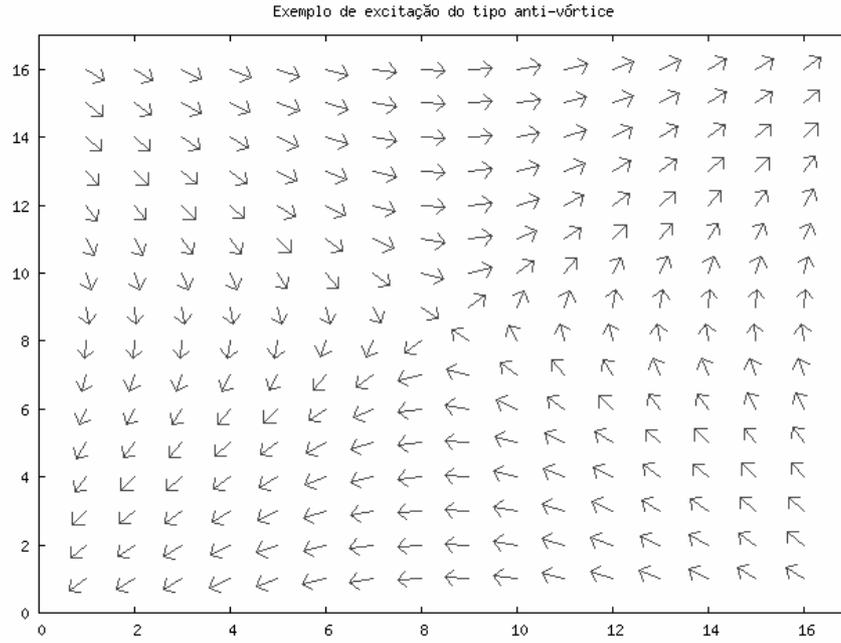


Figura. 1.8. Antivórtice com carga topológica $q = -1$

Podemos, também, obter a energia do vórtice no limite contínuo. Primeiramente, como o problema é cilíndricamente esférico, podemos calcular a integral de circulação (1.24) da forma:

$$2\pi(q) = \oint \vec{\nabla} \phi \cdot d\vec{l} = 2\pi r |\nabla \phi| \quad (1.25)$$

ficando $|\nabla \phi| = \frac{q}{r}$. Utilizando este resultado na hamiltoniana (1.21), chegamos a seguinte energia:

$$E = \frac{Jq^2}{2} \int_0^{2\pi} \int_a^L r dr \frac{1}{r^2} = \pi q^2 J \ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (1.26)$$

como $\nabla \phi$ diverge para grandes distâncias, é necessário levar em consideração os limites da integral radial de (1.26), em que L é o tamanho do sistema e a é o espaçamento de rede. Comumente usa-se o valor $a_0 = 0.24a$ no limite inferior da integral.

É sabido, que sistemas com anisotropia de plano fácil não apresentam ordem de longo alcance (OLA) para temperaturas diferentes do zero absoluto, o que se deve a presença de ondas de spin. Um teorema de Mermin e Wargner em 1966 [23] mostrou que simetrias globais contínuas não se quebram espontâneamente. Assim no modelo XY e o Rotor Planar não têm transição de fase do tipo ordem-desordem, em que há uma temperatura critica entre a fase magnetizada e a fase desmagnetizada. Entretanto, certas evidências, como a mudança de comportamento da função correlação com a temperatura, mostraram que deveria haver algum tipo de transição de fase nestes sistemas. Consideremos a função correlação spin-spin do modelo Rotor – Planar como:

$$C(r) = \langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(r) \rangle = \text{Re} \left[\langle e^{i(\phi(0) - \phi(r))} \rangle \right] \quad (1.27)$$

Para altos valores de temperaturas, superiores à T_c , pode-se mostrar que a função correlação cai exponencialmente com a distância entre os spins r , de forma que:

$$C(r) \cong e^{[-r \ln(K_B T / J)]} = e^{-r / \xi(T)} \quad (1.28)$$

Isto implica a existência de um comprimento característico finito, no qual os spins permanecem correlacionados, apresentando ordem de curto alcance. Quando a temperatura é menor que T_c temos que :

$$C(r) \cong \left(\frac{1}{r} \right)^\eta \quad (1.29)$$

com $\eta = K_B T / 2\pi J$. Assim, (1.29) varia mais lentamente com a distância que (1.28) possuindo um comprimento de correlação infinito.

Observando estes fatos pode-se supor uma transição de fase topológica denominada transição de fase de Kosterlitz-Thouless, primeiramente propostas por estes em 1973 [19]. Quando um sistema possui temperatura inferior à T_c ondas de spins podem surgir

favorecendo pares vórtice-antivórtice. A configuração deste tipo pode ser vista na figura (1.9) e é representado por:

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{y - y_v}{x - x_v}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{y + y_v}{x + x_v}\right), \quad (1.30)$$

em que o vórtice está centrado na posição (x_v, y_v) , e o antivórtice na posição $(-x_v, -y_v)$.

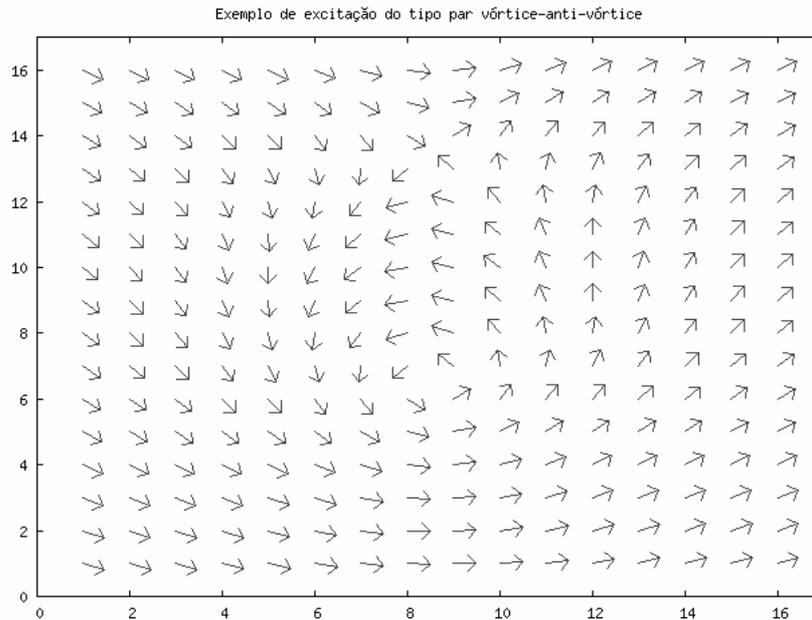


Figura 1.9. Par vórtice-antivórtice com $q = 0$

Assim que a temperatura é aumentada (porém ainda abaixo de T_c), o número de pares tende a aumentar, mas ainda continuam ligados. Entretanto, quando a temperatura é maior que T_c , o sistema fica desordenado e os vórtices se encontram livres fazendo a função correlação cair exponencialmente. Os constituintes dos pares interagem através da energia que depende de sua separação, como dado abaixo

$$E_{v-a} \cong \pi^2 J + 2\pi J \ln(R/a_0) \quad (1.31)$$

em que R é a distância entre o vórtice e o antivórtice. Assim, este tipo de transição de fase é caracterizada pela separação dos pares vórtice-antivórtice em vórtices livres.

Para verificar em que temperatura ocorre a transição, vejamos a energia livre do vórtice, que é dada por:

$$F = E - Ts, \quad (1.32)$$

em que E é dada por (1.26) e s , a entropia representada por $s = K_B \ln \Omega$. Assim a energia livre fica:

$$F = (\pi J - 2K_B T) \ln(L/a), \quad (1.33)$$

Da expressão acima, vemos que para pequenas temperaturas ($\pi J > 2K_B T$) a tendência do aparecimento de pares vórtice-antivórtice prevalece, caso contrário, vórtices livres aparecem de forma espontânea. A temperatura em que ocorre esta mudança de comportamento é estimada por:

$$T_c = \pi J / 2K_B \quad (1.34)$$

1.5 O MÉTODO MONTE CARLO

Neste tópico trataremos de um poderoso método de simulação que nos ajuda a resolver problemas envolvendo sistemas no estado de equilíbrio termodinâmico. Assim, este método está baseado em conceitos da mecânica estatística de equilíbrio.

1.5.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

Consideremos, inicialmente, um sistema com N partículas sendo que $N \approx 10^{20}$, como o caso de um gás ou líquido. Se fossemos tratar a dinâmica de cada partícula separadamente, teríamos N equações diferenciais acopladas para resolver. Caso calculássemos uma por uma, necessitaríamos de um computador com uma memória inexistente hoje em dia, além disso, teríamos comparar nossa solução com observações macroscópicas como pressão e temperatura, por exemplo. Essas grandezas macroscópicas são somas dos constituintes microscópicos, que feitas de forma apropriada acharíamos uma grandeza do tipo $\rho(\vec{x}, t)$, sendo \vec{x} a posição da amostra e t o tempo. Comparar $\rho(\vec{x}, t)$ com o respectivo resultado experimental traria muitas divergências, sendo necessário realizar médias em intervalos espaços-temporais próximos aos do experimento. Entretanto, a mecânica estatística não realiza média espaço-temporais, citada acima, mas uma média chamada “média de ensemble”. Esta é feita de tal forma que a média de uma variável A representada por $\langle A \rangle$ é realizada sobre todos os estados do ensemble, de forma que, para um ensemble canônico, temos:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i \exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right)} \quad (1.35)$$

em que A_i é o valor de A no i -ésimo estado e E_i é a energia deste estado. Como a soma é feita em todas as configurações microscópicas possíveis, este cálculo se torna complicado já que N é muito grande. A idéia central do método Monte Carlo reside exatamente em escolher as configurações mais relevantes em cada temperatura, ao invés, de usar todas as configurações possíveis para o sistema. Esta é a idéia da chamada amostragem seletiva. Ao escolhermos esse método seletivo devemos levar em consideração que algumas configurações são mais prováveis que outras, de forma que se uma configuração n_i gera uma probabilidade $P(n_i)$, a expressão (1.35) fica:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i P(n_i) \exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right)}{\sum_i P(n_i) \exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right)} \quad (1.36)$$

Uma escolha apropriada para $P(n_i)$ é a distribuição de equilíbrio dada por:

$$P_{eq}(n_i) = \frac{\exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right)}{Z} \quad (1.37)$$

onde Z é a função partição. Daí a expressão (1.35) fica, simplesmente:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^M A_i}{M} \quad (1.38)$$

em que M é o número de estados usados para calcular a média. Nos sistemas estudados pelo método Monte Carlo, pode-se usar vários tipos de algoritmos. Dentre os quais se destaca o de Metropolis, como veremos adiante.

1.5.2 TRANSIÇÃO ENTRE ESTADOS DE ENERGIA

Como a idéia do método consiste em escolhermos uma seqüência aleatória de configurações independentes, chamada cadeia de Markov, consideremos $W(x_i \rightarrow \bar{x}_i)$ a probabilidade de transição por unidade de tempo entre as configurações x_i e \bar{x}_i . Uma condição suficiente para garantir que o equilíbrio seja atingido é a condição de balanço detalhado:

$$p(x_i)W(x_i \rightarrow \bar{x}_i) = p(\bar{x}_i)W(\bar{x}_i \rightarrow x_i). \quad (1.39)$$

Portanto, as probabilidades de transição devem ser escolhidas de tal forma que:

$$\frac{W(x_i \rightarrow \bar{x}_i)}{W(\bar{x}_i \rightarrow x_i)} = e^{-\beta.(E_i - \bar{E}_i)} = e^{-\beta.\Delta E_i}. \quad (1.40)$$

Pela equação acima vemos que a probabilidade de transição entre os estados depende somente da diferença de energia entre os mesmos. Vemos também que (1.40) não especifica de forma unívoca as probabilidades de transição. Em simulações Monte Carlo, as duas escolhas mais freqüentes são dadas ou pelo algoritmo de Glauber,

$$W(x_i \rightarrow \bar{x}_i) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh gh \left(\frac{1}{2} \beta.\Delta E_i \right) \right], \quad (1.41)$$

ou pela prescrição de Metrópolis

$$W(x_i \rightarrow \bar{x}_i) = \begin{cases} e^{-\beta.\Delta E_i}; \Delta E_i > 0. \\ 1; \Delta E_i < 0 \end{cases} \quad (1.42)$$

1.5.3 ALGORITMO DE METROPOLIS

Neste trabalho estamos interessados em simular como um sistema de spins, modelo XY, interage com seu meio, o que em mecânica estatística é chamado de reservatório térmico. Sabe-se que no modelo XY ferromagnético a energia é mínima quando todos os spins estão paralelos e contidos no plano, mas, devemos considerar também o efeito de desordem provocado pela temperatura (flutuações térmicas).

Vamos assumir que o sistema em interesse esteja em equilíbrio térmico com o reservatório à temperatura T , também vamos assumir que este seja descrito pelo ensemble canônico, pois a energia do sistema pode flutuar entre uma configuração e outra. Neste ensemble, a probabilidade $P_{\text{est.}}$ de encontrar o sistema em um dado estado, a uma temperatura T , é dada por

$$P_{\Gamma} = C \cdot e^{-\beta \cdot E_{\Gamma}}, \quad (1.43)$$

onde C é uma constante de proporcionalidade e E_{Γ} é a energia do sistema no estado Γ . Cada estado Γ é determinado por uma configuração particular dos spins da rede, esta configuração particular é chamada de microestado do sistema na linguagem da mecânica estatística.

Analisando do ponto de vista microscópico, a mudança do sistema de um estado acessível para outro é devida à interação do mesmo com o reservatório. Cada mudança de orientação de um dado spin faz com que o sistema receba ou doe calor para o reservatório térmico. O método Monte Carlo usa uma aproximação estocástica[24], chamada cadeia de Markov, para simular a troca de energia da rede de spins com o reservatório térmico.

Para fazer com que a rede atinja um estado de equilíbrio, modelamos sua interação com o reservatório térmico, que está à temperatura T , através do algoritmo de Metropolis [25]. O algoritmo de Metropolis é constituído pelas seguintes etapas.

1. Começamos com a rede em um dado microestado, escolhido de forma aleatória;
2. Um spin da rede é escolhido aleatoriamente;
3. Sorteia-se uma nova orientação para este spin;
4. Calcula-se $\Delta E = E_f - E_i$, variação na energia associada à mudança de orientação do spin escolhido no item 2;
5. Se $\Delta E < 0$ então aceita-se esta nova orientação, ou seja, o sistema muda de microestado, pois a energia baixou;

6. Se $\Delta E > 0$ então sorteia-se um número $N_{\text{ale.}}$ no intervalo $[0,1]$. Este número é então comparado com $e^{-\beta \cdot \Delta E}$;
 - Se $N_{\text{ale.}} < e^{-\beta \cdot \Delta E}$ então aceita-se esta nova orientação, ou seja, o sistema muda de microestado;
 - Se $N_{\text{ale.}} > e^{-\beta \cdot \Delta E}$ então não é aceita a nova orientação e o sistema permanece no mesmo microestado;
7. Repete-se os passos acima, desde o item 2, até que a rede esteja em equilíbrio térmico com o reservatório, ou seja, até que as flutuações na energia interna tornem-se pequenas.

O algoritmo apresentado do item 2 ao item 6 define aquilo que chamamos de passo Monte Carlo. Para garantir que a rede esteja em equilíbrio térmico com o reservatório, devemos realizar muitos passos Monte Carlo, permitindo a todos os spins da rede várias oportunidades de mudar de direção. Pode-se imaginar cada passo Monte Carlo como representado uma interação da rede com o reservatório térmico.

O número de passos Monte Carlo necessários para que o sistema atinja o equilíbrio varia com o tamanho da rede, quanto maior esta, maior será o número de passos necessários para atingir o equilíbrio. Em geral, nos primeiros passos o sistema ainda não atingiu o equilíbrio e, neste caso, os valores das quantidades termodinâmicas variam significativamente de um passo a outro. Isto faz com que, por exemplo, a energia do sistema oscile bastante. Conforme aumentamos o número de passos, estas oscilações vão diminuindo e os valores das quantidades termodinâmicas passaram a ter uma pequena variação em torno dos valores médios. Em particular, a energia oscilará um pouco em torno do valor mínimo para a temperatura desejada. Assim, quando observarmos este comportamento para as quantidades termodinâmicas do sistema, saberemos que este está em equilíbrio térmico com o reservatório.

Por exemplo, no caso de sistemas magnéticos, as principais quantidades termodinâmicas calculadas são:

- energia média por spin

$$\langle E \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E_i, \quad (1.44)$$

- magnetização média na direção Z por spin

$$M_z = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M S_i^z, \quad (1.45)$$

- calor específico por spin

$$C_v = \frac{1}{M} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{K_b T^2} \quad (1.46)$$

- e susceptibilidade na direção Z a campo nulo

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{K_b T}. \quad (1.47)$$

CAPÍTULO 2

MODELO DO NANODISCO COM DOIS BURACOS

2.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS E MOTIVAÇÕES

Como mencionado na introdução, recentes progressos na nanotecnologia promoveram resultados interessantes, possibilitando muitas aplicações em materiais magnéticos, como por exemplo o armazenamento magnético de alta densidade usando uma disposição em forma de nanodiscos (chamados também de partículas magnéticas), como sensores magnéticos de alta resolução. Conseqüentemente, há um grande interesse nas propriedades micromagnética de filmes magnéticos nanoestruturados. O uso de nanodiscos magnéticos em alguns dispositivos, requer um comportamento do vórtice de certa forma controlável, provocando um tipo de “chaveamento” entre configurações bem definidas. Desta forma, estruturas magnéticas do tipo vórtice, que são observados freqüentemente em nanodiscos ferromagnéticos, podem ter um papel importante. Muitas características do comportamento de vórtices nos nanodiscos de diversas formas foram estudadas experimental e teoricamente por vários autores[12-16]. Em geral, estes trabalhos não consideram irregularidades, como defeitos, na estrutura do nanodisco. A influência dos defeitos na magnetização pode também conduzir a aplicações interessantes. Por exemplo, pode ser vantajoso fazer um nanodisco magnético de forma apropriada e mover o núcleo do vórtice entre defeitos fixos, em vez de inverter a magnetização do nanodisco como um todo. Recentemente, tornou-se possível a fabricação de nanodiscos constituídos de liga de

Permalloy, que contêm um ou mais defeitos definidos litograficamente[15]. As medidas da magnetização nestes nanodisco com buracos mostram que a estrutura de vórtice pode ser manipulada intencionalmente [14,15], como vemos na figura (2.1), que representa uma parte da curva de histerese para um nanodisco com dois buracos [15]. Na fig. (2.1) o vórtice fica preso num dos buracos dependendo do valor do campo aplicado. A região retangular representa o aprisionamento do vórtice nos buracos, o que mostra um “chaveamento” entre eles.

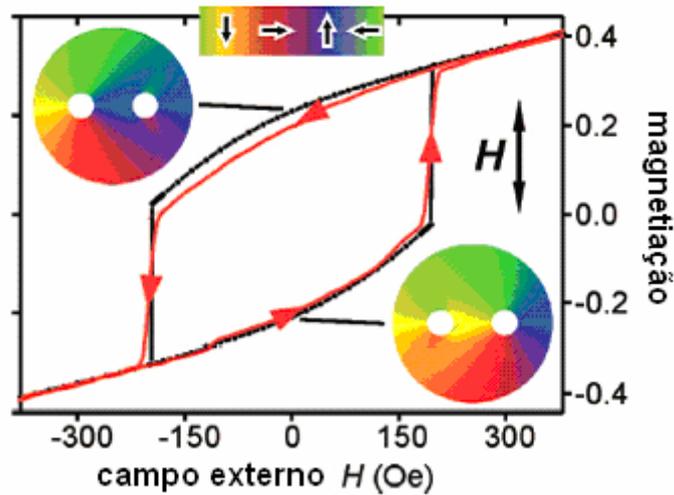


Figura 2.1: Histerese para um disco de Permalloy em que a região retangular representa o “chaveamento” do vórtice entre dois buracos.

De fato, as simulações micromagnéticas e as experiências [14,15] mostraram que o núcleo do vórtice pode ser fixado em um defeito. Entretanto, não foram realizados muitos cálculos analíticos para interação do vórtice com defeitos para este problema. Motivados pelos resultados experimentais apresentados nas referencias [15,17], vamos estudar analiticamente, neste capítulo, o comportamento de vórtices num modelo de nanodisco ferromagnético com dois buracos. Nós empregamos um modelo que combina o modelo de vórtice rígido [8] ao recente modelo proposto para estudar a interação de vórtice-impureza [26,27]. Esta combinação não é simples já que o modelo tem que ser ajustado à energia magnetostática presente num sistema finito como um nanodisco. A energia para um nanodisco, na presença de um campo externo \vec{H} , na aproximação contínua pode ser dada por [3]:

$$W = \frac{L}{2} \iint [(A/M_s^2)(\nabla\vec{M})^2 - \vec{M} \cdot \vec{H}] d^2r, \quad (2.1)$$

o primeiro termo está associado à interação de troca e pode ser obtida facilmente como na equação (1.20) que é de natureza local, e o segundo termo está associado à interação com o campo, que pode ser magnetostático e externo. Aqui \vec{M} representa a magnetização do nanodisco, enquanto M_s é a magnetização de saturação e A, a constante de troca.

2.2 O MODELO ANALÍTICO:

Considere um pequeno disco magnético descrito pelo modelo Heisenberg, num formato cilíndrico, tendo espessura L e raio R, onde a razão $\frac{L}{R} \ll 1$. Desta maneira podemos assumir que a magnetização \vec{M} ao longo do eixo z é uniforme. Assim, numa boa aproximação, a energia desse nanodisco com dois buracos (anti-dots), na presença de um campo magnético aplicado, pode ser escrito como:

$$W = \frac{1}{2} L \iint_S [A(\partial_\mu \vec{m})(\partial^\mu \vec{m}) - M_s^2 \vec{m}(\vec{h}_m + 2\vec{h}_{ext})] U_1(\vec{r} - \vec{r}_1) U_2(\vec{r} - \vec{r}_2) d^2\vec{r} \quad (2.2)$$

onde, A é a constante de troca, $\vec{m} = \vec{M}/M_s$ é o vetor unitário que descreve a magnetização ao longo de S (área do disco), M_s é a magnetização de saturação, $\vec{h}_m = \vec{H}_m/M_s$ é o campo desmagnetizante, \vec{h}_{ext} é o campo externo. Já o potencial $U_i(\vec{r} - \vec{r}_i)$, com $i = 1, 2$, diz respeito aos dois buracos não-magnéticos distribuídos através da face do disco, onde $U_i(\vec{r} - \vec{r}_i) = 0$ se $|\vec{r} - \vec{r}_i| \leq \rho$ e $U_i(\vec{r} - \vec{r}_i) = 1$ se $|\vec{r} - \vec{r}_i| \geq \rho$. Aqui cada buraco corresponde a ausência de spins num pequeno círculo de raio ρ com a mesma espessura L. Assim, nosso sistema é formado por um disco de raio R e espessura L contendo duas cavidades cilíndricas com raio $\rho \ll R$ e cada um centrado em \vec{r}_i , conforme a figura (2.2).

A princípio cada buraco atrai o vórtice [26], modificando o sistema. Do ponto de vista do termo de troca, os buracos conduzem o vórtice ao estado de menor energia, como veremos. Além disso, a distribuição de cargas ao longo das bordas internas dos buracos aumentará a energia magnetostática, além de alterar o produto escalar $\vec{m} \cdot \hat{n}$ sempre que o buraco não estiver no centro geométrico da face do disco, onde \hat{n} é o vetor unitário normal à superfície do disco. Assim, o campo \vec{h}_m pode ser expresso em termos do potencial associado a este, onde $\vec{h}_m = -\nabla\Phi_m$ e $\Phi_m = \Phi_v + \Phi_i^B + \Phi_{ext}^B$. Aqui, Φ_v é o potencial magnetostático relacionado à carga volumétrica, enquanto Φ_{ext}^B e Φ_i^B estão relacionados às bordas externas e internas (dos buracos), respectivamente. Vamos considerar a simetria da magnetização do vórtice em $\vec{r} = \vec{0}$.

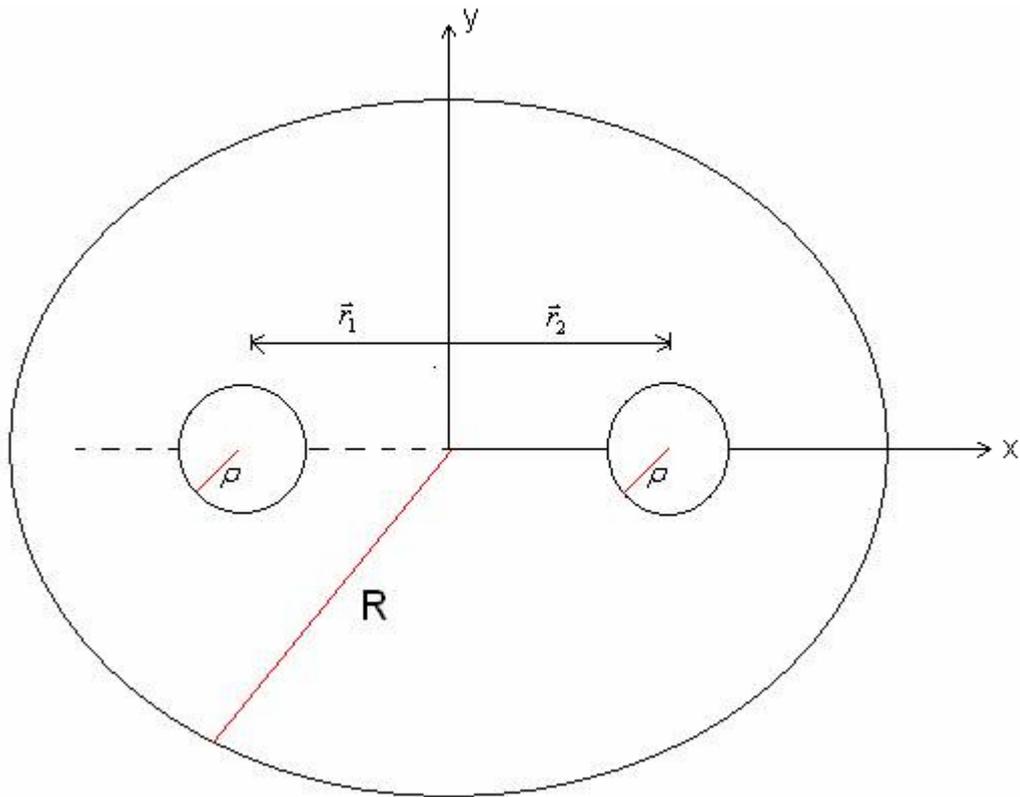


Figura 2.2: Nanodisco de raio R , contendo dois buracos alinhados no eixo x , nas posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 a partir do centro do disco.

Neste caso, é conveniente escrever: $\vec{m} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$, com $\theta = \theta_v$ e $\varphi = \arctan(y/x) \pm \pi/2$. Consideramos θ_v tal que $\sin\theta_v = 0$ no centro do disco, $\vec{r} = 0$, enquanto $\sin\theta_v \rightarrow 1$, longe do centro do disco, $r \gg a$, onde a é o espaçamento de rede.

Em outras palavras, a magnetização consiste numa região onde um pequeno trecho de uma componente do spin sai do plano, regulando a energia de troca, e outra região onde os spins estão praticamente confinados na face do disco. Neste caso, as quantidades $\vec{m} \cdot \hat{n}$ em $r = R$ e $\nabla \cdot \vec{m}$ são identicamente nulas e não contribuem para o campo \vec{h}_m . Se considerarmos um buraco não-magnético centralizado em \vec{r}_1 , o potencial devido a este atrairá o vórtice de modo a minimizar a energia de troca. Porém, esse deslocamento produz um aumento da energia magnetostática, visto que $\vec{m} \cdot \hat{n} \neq 0$ na borda lateral do disco, além das cargas superficiais da borda interna do buraco. Assim, além da magnetização do vórtice não exibir simetria cilíndrica, temos uma competição entre os termos de troca e magnetostático a fim de minimizar a energia total, o que torna o problema interessante. Tal problema foi tratado nos trabalhos [4] e [22] em que os resultados analíticos estavam qualitativamente de acordo com a simulação micromagnética. Aqui trataremos mais um buraco centrado em \vec{r}_2 e por simplicidade ambos os buracos estão alinhados no eixo x conforme a figura 2.2. Para ver este efeito consideraremos o cálculo baseado na energia de troca usando dois defeitos de raio $\rho = a$ (espaçamento de rede). Nós iremos generalizar os cálculos para defeitos maiores e incluiremos a energia magnetostática assim como a influência do campo magnético externo. O potencial experimentado pelo vórtice na presença dos dois defeitos de raio $\rho = a$ colocados nas posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 , devido à energia de troca é definido por:

$$V_{eff} = E_{bura\ cos} - E, \quad (2.3)$$

em que $E_{bura\ cos}$ e E são as energias do vórtice na presença dos buracos e na ausência deles, respectivamente. Assim o potencial efetivo pode ser dado por [27]:

$$V_{eff}(r_1, r_2) = \frac{A\pi}{2} \ln \left(1 - \frac{a^2}{r_1^2 + b^2} - \frac{a^2}{r_2^2 + b^2} + \frac{a^4}{(r_1^2 + b^2)(r_2^2 + b^2)} \right) \quad (2.4)$$

onde b é uma constante introduzida para eliminar divergências quando o centro do vórtice coincide com o centro do buraco.

Para ver o que acontece com a eq. (2.3) quando consideramos um buraco maior ($\rho = ja$, $j > 1$), imaginamos j sítios vazios distribuídos no disco em que a distância entre eles é mantida fixa. Se o vórtice é fixado num buraco, a presença de outros buracos deve diminuir a energia que fixa o vórtice, pois os outros buracos também atraem o vórtice. Os dois buracos de raio $\rho > a$ atraem o vórtice através do potencial similar à (2.3), porém agora a constante b deve ser diferente e é estimada considerando j centros de buracos e centro do vórtice no mesmo ponto de acordo com a Ref. [27], de forma que $\rho \approx b_j$. A energia depende agora, não somente do número de buracos, mas da sua distribuição no disco. Nosso interesse é em dois buracos de tamanho arbitrário de forma que $\rho \ll R$. O buraco é formado por j sítios vazios, vizinhos e de raio a que forma um buraco de raio ρ .

Na discussão acima, consideramos somente a energia de troca. Neste caso, se o vórtice está, inicialmente, no centro do disco, os buracos localizados nas posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 farão, a princípio, com que o vórtice desloque para um dos buracos, minimizando a energia do sistema. Contudo, o trabalho de Guslienko [8] mostrou que para um deslocamento d , em que $d \ll R$, do centro do vórtice em relação ao centro de um disco, a energia de troca, similarmente obtida como a equação (1.18), também decresce por:

$$w(d) = \frac{\pi A}{2} \ln \left(1 - \frac{d^2}{R^2} \right) \quad (2.5)$$

Assim, a energia de troca devido ao deslocamento do centro do vórtice em direção ao centro de um dos defeitos do nanodisco pode ser dado por:

$$V_{exc}(r_1, r_2) = \frac{A\pi}{2} \ln \left[(1-s^2) \left(1 - \frac{a^2}{(r_1 - sR)^2 + b^2} - \frac{a^2}{(r_2 - sR)^2 + b^2} + \frac{a^4}{[(r_1 - sR)^2 + b^2][(r_2 - sR)^2 + b^2]} \right) \right] \quad , \quad (2.6)$$

onde $s = \frac{d}{R}$, mede o deslocamento relativo do centro do vórtice, enquanto $b \cong 1.147\rho$ de acordo com a referência [3]. Vale ratificar que este modelo é válido para um deslocamento relativo pequeno ($s \ll 1$). Podemos notar que cada termo $g_i = \frac{a^2}{(|\vec{r}_i - \vec{s}/R|^2 - b^2)}$ corresponde ao potencial atrativo que cada buraco produz no vórtice, enquanto o produto $g_1 g_2$, presente no último termo do potencial, diz respeito à competição entre eles [25]. Quando temos um sistema magnético pequeno, as coisas se tornam mais interessantes uma vez que o vórtice sofre um distúrbio no seu perfil e a magnetização já não tem simetria cilíndrica. Daí, a energia magnetostática aumenta e uma força restauradora aparece a fim de puxar o vórtice de volta ao centro do disco. Essa energia magnetostática está relacionada somente às cargas superficiais $\sigma = \vec{M} \cdot \hat{n}$ que aparecem na borda do disco e na parede interna dos buracos, e pode ser dada por [8]:

$$W_m = \frac{1}{2} \int dS \int dS' \frac{\sigma(\vec{r})\sigma(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2.7)$$

onde

$$\sigma(\vec{r}) = -M_s \frac{s \sin(\varphi)}{\sqrt{1 + s^2 - 2s \cos(\varphi)}}, \quad (2.8)$$

a integral é tomada sobre toda a superfície do disco e o deslocamento do vórtice é assumido como paralelo ao eixo Ox. Calculando W_m como função de s para a borda do disco, temos:

$$V_{1m} = W_{1m}(s) - W_{1m}(0) = 2M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) \sum_{\gamma > 0} F_\gamma(L/R) I_\gamma^2(s) \quad (2.9)$$

Onde

$$F_1(x) = \int_0^{\infty} \frac{J_1^2(t)}{t} \left(1 - \frac{1 - e^{-xt}}{xt} \right) dt \quad \text{e} \quad I_\gamma(s) = 2 \int_0^{\pi} dt \frac{\sin(t) \sin(\gamma t)}{\sqrt{1 - 2s \cos(t) + s^2}} \quad (2.10)$$

$\gamma = 1, 2, \dots, J_\gamma$ são funções de Bessel e para s pequeno, podemos usar a expansão $I_\mu^2(s) = \pi^2 \delta_{\mu,1} + O(s^2)$. A contribuição, devido ao buraco da esquerda, é estimada considerando duas regiões: $|s - r_1 / R| < \rho / R$ e $|s - r_1 / R| \geq \rho / R$. Se o centro do vórtice coincide com o centro do buraco $|s - r_1 / R| = 0$. Para a primeira região $|s - r_1 / R| < \rho / R$, a contribuição da energia magnetostática, devido o buraco da esquerda, pode ser escrita como:

$$V_{2m} = 2M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) (s - r_1 / R) \sum_{\gamma > 0} F_\gamma(L / \rho) I_\gamma^2(s - r_1 / R) \quad (2.11)$$

Para a região $|s - r_2 / R| < \rho / R$, relativo ao buraco da esquerda, temos um caso similar à eq.(2.10) dado por:

$$V_{3m} = 2M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) (s - r_2 / R) \sum_{\gamma > 0} F_\gamma(L / \rho) I_\gamma^2(s - r_2 / R) \quad (2.12)$$

Por outro lado, a segunda região $|s - r_1 / R| \geq \rho / R$ e $|s - r_2 / R| \geq \rho / R$, em que o centro do vórtice está fora dos buracos, o produto $\vec{m} \cdot \hat{n}$ será negativo numa metade da cavidade e positivo na outra metade. Desta forma, as cargas magnéticas na parede da cavidade não mudam apreciavelmente com a distância entre os centros do vórtice e do buraco. De forma que:

$$V_{3m} = 2M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) (\rho / R)^2 \sum_{\gamma > 0} F_\gamma(L / \rho) I_\gamma^2(\rho / R) \quad (2.13)$$

Daí, a energia magnetostática total $V_{mag} = V_{1m} + V_{2m} + V_{3m}$, para um pequeno deslocamento do vórtice, é estimada por:

$$V(s, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2\pi^2 M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) F_1(L/R) s^2 + 2\pi^2 \alpha M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) F_1(L/R) \left(s - \frac{r_1}{R}\right)^2 + 2\pi^2 \beta M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) F_1(\rho/R) \left(s - \frac{r_2}{R}\right)^2 + 2\pi^2 \gamma M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) F_1(\rho/R) \left(\frac{\rho}{R}\right)^2 \quad (2.14)$$

onde o primeiro termo está relacionado com a energia magnetostática de toda a superfície do disco, incluindo a lateral, enquanto os outros termos estão associados ao aprisionamento do vórtice num dos buracos. Como vimos, teremos três situações distintas:

- i) O vórtice está centrado no primeiro buraco, daí $\alpha = 1$ e $\beta = \gamma = 0$;
- ii) O vórtice está centrado no segundo buraco, daí $\alpha = \gamma = 0$ e $\beta = 1$;
- iii) O vórtice não está preso num dos buracos, daí $\alpha = \beta = 0$ e $\gamma = 1$.

De maneira direta podemos representar o potencial experimentado pelo vórtice, na ausência de campo externo, como:

$$V_{eff}(s, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_{ex} + V_{mag} \quad (2.15)$$

Apresentamos abaixo o potencial efetivo V_{eff} em função de s . Vemos que estados biestáveis que aparecem no potencial efetivo, em que o vórtice fica preso num dos buracos, aparecem para certos valores dos raios dos buracos ρ , separação dos centros dos buracos $D \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ e a largura de *Exchange* $l_{ex} = \sqrt{A}/M_s$. Estes estados biestáveis ocorrem para D pequeno. Como vemos nas figuras (2.3), (2.4), (2.5) e (2.6), adotamos $R = 250$ nm e $L = 30$ nm.

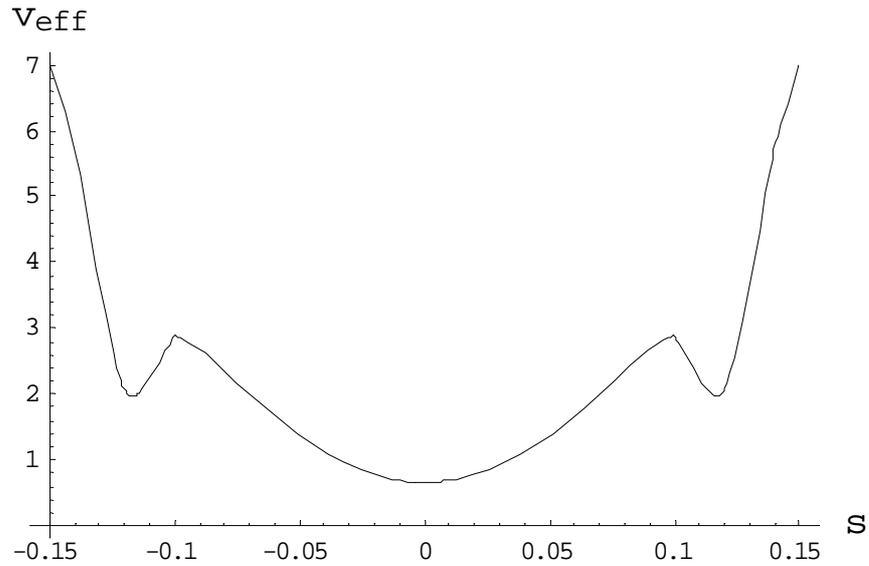


Figura 2.3. Mostra o gráfico de V_{eff} versus s . A origem do sistema de coordenadas é o centro do nanodisco e os buracos estão centrados nas posições $r_1 = -30nm$ ($s = -0.12$) e $r_2 = 30nm$ ($s = 0.12$) respectivamente. Aqui $\rho = 5nm$ e $l_{ex} = 17nm$.

Na figura (2.3) aparecem dois estados metaestáveis, relacionados aos dois buracos. Entretanto, a mínima energia se encontra entre os dois buracos ($s = 0$) o que favorece o aprisionamento do vórtice no centro do disco.

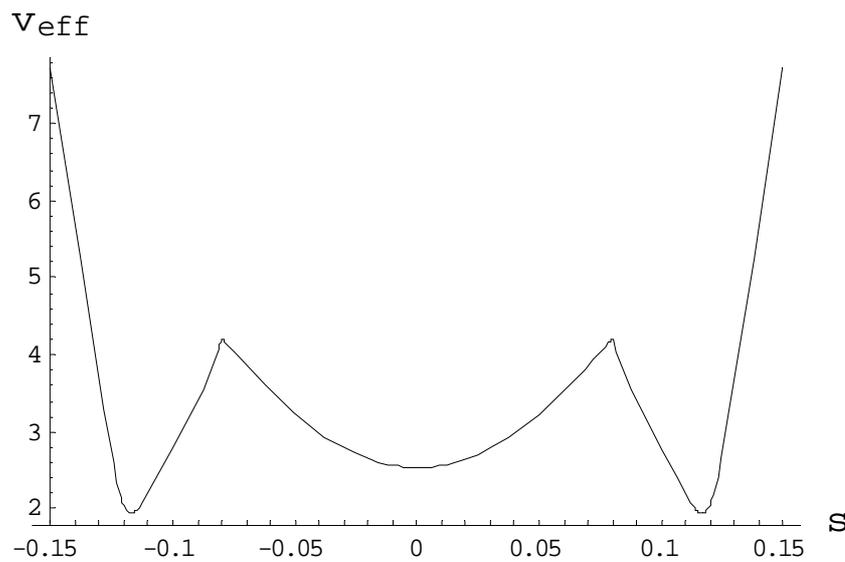


Figura 2.4. V_{eff} como função de s . Neste caso, os parâmetros são idênticos ao caso de cima, porém o raio do buraco é $\rho = 10 nm$.

Para a figura (2.4), foi mantida a mesma distância entre os buracos da figura (2.3), porém os raios dos buracos foram aumentados para $\rho = 10$ nm. Neste caso o centro do vórtice tende a se deslocar para um dos buracos, onde se encontra o estado de mínima energia.

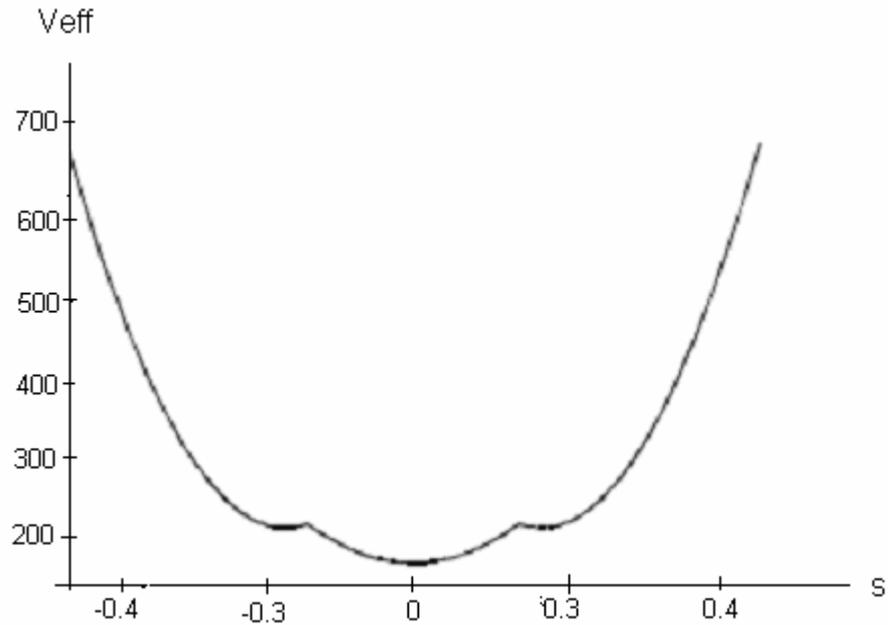


Figura 2.5. V_{eff} como função de s , em que $\vec{r}_1 = (-50nm)\hat{i}$ e $\vec{r}_2 = (50nm)\hat{i}$, $\rho = 42.5$ nm e $l_{ex} = 5.7$ nm.

Assim como na figura (2.3), a figura (2.5) mostra o potencial efetivo de interação do vórtice, em que a mínima energia para o vórtice se encontra no centro do disco, porém a largura de “exchange” é agora $l_{ex} = 5.7$ nm.

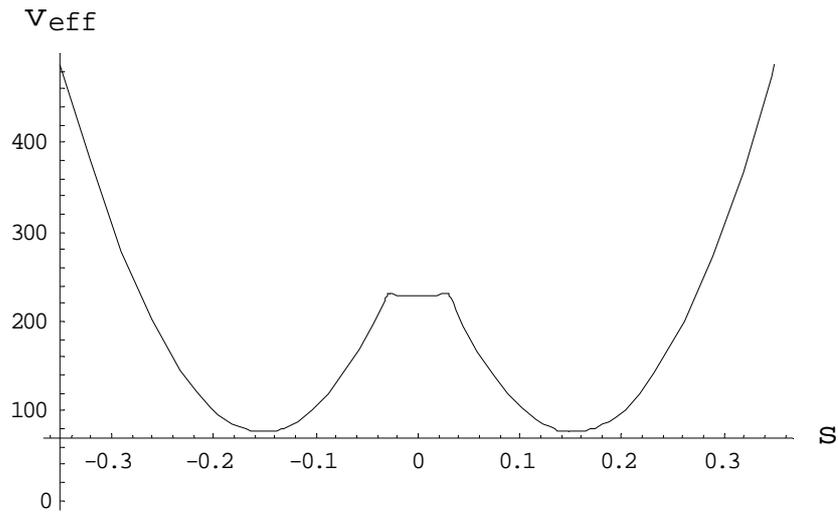


Figura 2.6. V_{eff} como função de s . Aqui os parâmetros são idênticos à figura (2.3), porém,

$$\vec{r}_1 = -(80nm)\hat{i} \text{ e } \vec{r}_2 = (80nm)\hat{i}$$

De posse desses resultados, vemos que os estados biestáveis tendem a diminuir se aumentarmos a distância entre os buracos ou diminuirmos o raio do buraco, dependendo da largura de *Exchange*. Nas figuras (2.4) e (2.6) os estados biestáveis aumentam e o centro do vórtice tende a ficar preso num dos buracos espontaneamente. Estes resultados analíticos estão, qualitativamente, de acordo com os experimentos, mas os estados biestáveis podem ser observados experimentalmente para separações dos defeitos da ordem de 200nm, porém, para os cálculos analíticos, estes estados podem ocorrer para separação do buraco no máximo da ordem de 120nm. Tal divergência pode ser explicada pelo fato de que os cálculos analíticos são válidos para pequenos deslocamentos do centro do vórtice.

2.3 MODELO ANALÍTICO NA PRESENÇA DE CAMPO EXTERNO

A presença de um campo magnético externo na direção perpendicular a linha que une os centros dos buracos pode contribuir para o deslocamento do vórtice na direção do eixo x. Supondo que o campo é aplicado na direção do eixo y, a contribuição da energia de Zeeman pode ser aproximada por:

$$V_{\text{hext}} \cong -\pi M_s^2 (R^2 - 2\rho^2) h_{\text{ext}} (s - s_0), \quad (2.16)$$

em que $\vec{h}_{\text{ext}} = \vec{H}_{\text{ext}} / M_s$ é o campo externo e s_0 é a posição de equilíbrio do vórtice que é calculada fazendo $\frac{dV_{\text{eff}}}{ds} = 0$ em (2.15). Assim, o novo potencial de interação pode ser dado por:

$$V' = V_{\text{eff}} + V_{\text{hext}} \quad (2.17)$$

Claramente, com a presença do campo externo, teremos uma nova posição de equilíbrio $s_h \neq s_0$ que é calculada fazendo $\frac{dV'}{ds} = 0$, em que o ponto de mínimo na figura (2.7) se apresenta em $V' \approx 0.621$ para $s_h \approx -0.121$ e na figura (2.8) em $V' \approx 0.621$ para $s_h \approx 0.121$.

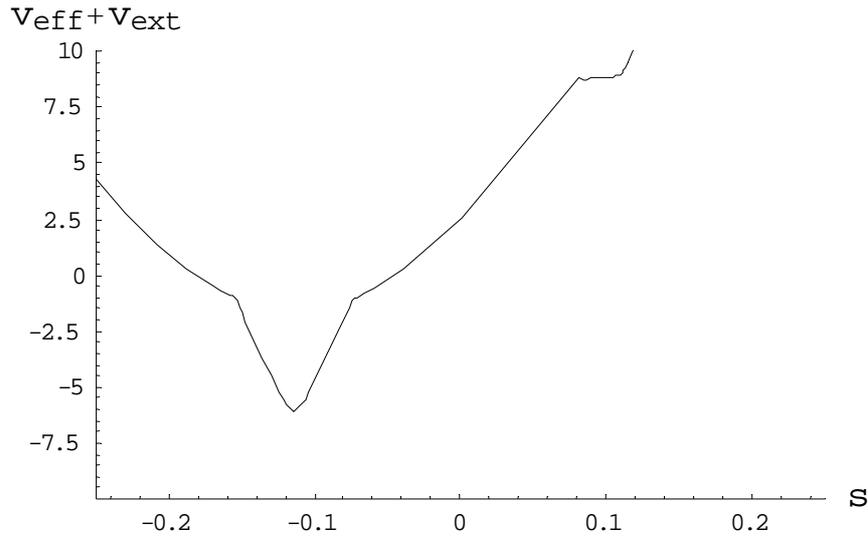


Figura 2.7. Potencial de interação na presença de um campo externo aplicado na direção y .

Os parâmetros deste caso são os mesmos da figura (2.4) e o campo externo é dado por

$$\vec{h}_{\text{ext}} = -(0.10)\hat{y}. \text{ A mínima energia para o vórtice é no buraco da esquerda.}$$

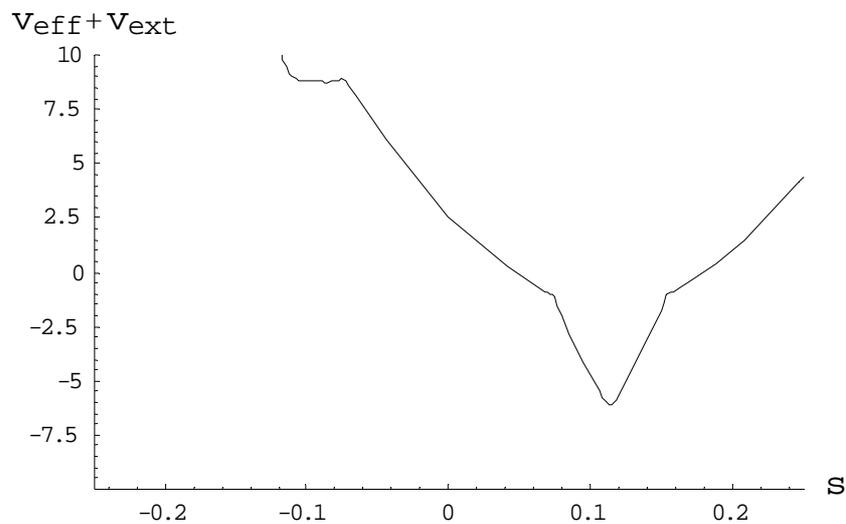


Figura 2.8. Potencial de interação na presença de um campo externo aplicado na direção y .

Os parâmetros deste caso são os mesmos da figura (2.4) e o campo externo é dado por

$$\text{porém } \vec{h}_{\text{ext}} = (0.10)\hat{y}. \text{ Aqui, a mínima energia para o vórtice é no buraco da direita.}$$

Vemos que a aplicação de um campo magnético externo nos sentidos positivo e negativo do eixo y faz com que o vórtice tenha a mínima energia num dos buracos, ou seja, pode favorecer o aprisionamento do vórtice em um dos buracos. Isso nos possibilita certo

controle do vórtice através do campo externo aplicado. É possível que o vórtice desenvolva uma pequena oscilação em torno do ponto de equilíbrio, isto devido à oscilação topológica que ocorre em torno de impurezas magnéticas.

2.3.1 Cálculo da Magnetização

Como vimos acima, a posição de equilíbrio $s_0 = (x_0, y_0)$ para o vórtice na ausência do campo magnético, pode ser obtida fazendo-se $\frac{dV_{eff}}{ds} = 0$. Está claro, que s_0 depende dos parâmetros do disco e dos buracos, além disso, pelo sistema de coordenadas adotado, $x_0 \neq 0$ e $y_0 = 0$. Assim a magnetização ao longo da face do disco pode ser obtida minimizando o primeiro termo da hamiltoniana (2.2) e será dada por:

$$m_x(s_0) = \frac{\mp y}{\sqrt{(x - s_0 R)^2 + y^2}}, \quad m_y(s_0) = \frac{\pm (x - s_0 R)}{\sqrt{(x - s_0 R)^2 + y^2}}, \quad (2.18)$$

no qual os sinais \pm estão associados às rotações horária e anti – horária do vetor \vec{m} na face do disco, respectivamente. Já que o sistema possui simetria sobre reflexão no eixo x, a magnetização ao longo do eixo x anula-se, enquanto a componente y da magnetização será dada por:

$$\langle M_y \rangle \cong M_s \left[\frac{1}{\pi R^2} \int_{disco} m_y(s_0) dx dy - \frac{1}{\pi \rho^2} \int_{buraco1} m_y(s_0) dx dy - \frac{1}{\pi \rho^2} \int_{buraco2} m_y(s_0) dx dy \right] \quad (2.19)$$

Que é valido para $|s - s_0| \ll 1$. As integrações acima são tomadas na área da face do disco e nos dois buracos (de mesmo raio ρ), respectivamente.

Com a presença do campo magnético externo, a posição de equilíbrio para o vórtice será s_h . Assim, as componentes da magnetização média do nanodisco na presença do campo magnético externo são $\langle M_x \rangle = 0$ e $\langle M_y \rangle$ que é dada por (2.18) com $m_y(s_0)$ substituído por $m_y(s_h)$. No cálculo da magnetização iremos usar o sinal de baixo (sentido anti-horário da magnetização), o que indica que o vórtice prenderá no buraco da direita para $h_{ext} > 0$ e no da esquerda para $h_{ext} < 0$. Usando os parâmetros do nanodisco $l_{ex} = 17nm$ e considerando $R = 250nm$, $L = 30nm$, $\rho = 10nm$, e $D = 60nm$, plotamos a magnetização média $\langle M_y \rangle$ versus h_{ext} necessário para manter o centro do vórtice na posição s_h como mostra a figura (2.9). Nós representaremos esse campo por $h_{ext}(s_h)$. Como o campo desta figura não é varrido num intervalo constante não podemos associar com a histerese. Assim o gráfico dá apenas a magnetização do disco necessária para manter o vórtice tanto dentro quanto fora do buraco.

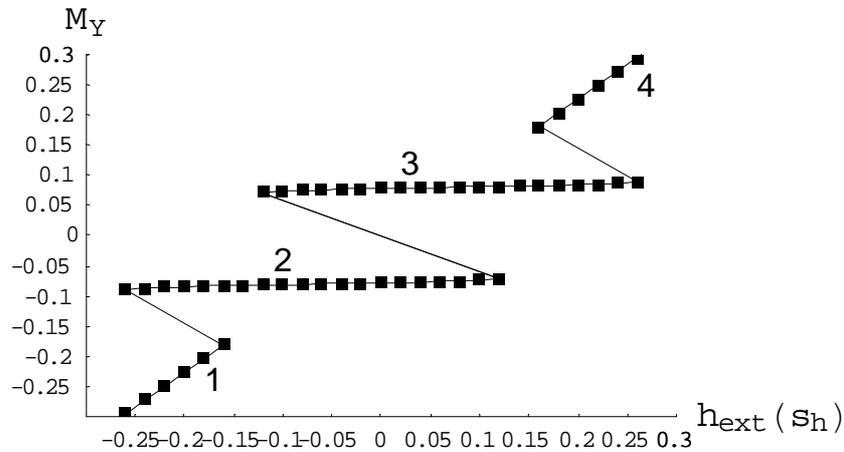


Figura.2.9. Magnetização vs campo externo para manter o vórtice em s_h .

Notemos que há quatro regiões indicadas com linhas retas. Duas delas têm a mesma inclinação (1 e 4 na Fig.2.9) e (2 e 3 na Fig.2.9). As linhas 1 e 4 mostram a magnetização necessária para manter o vórtice em posições fora dos buracos, enquanto as linhas 2 e 3 nos dão a situação em que o centro do vórtice está no buraco da esquerda ou da direita.

2.3.2 Obtenção da curva de histerese

De acordo com a figura 2.9 podemos obter o traço de histerese para um disco com os mesmos parâmetros do caso acima. Nos experimentos, geralmente, o campo magnético externo é varrido num intervalo de -1 a 1. É necessário lembrar que os dois buracos estão localizados nas posições $r_1 = -30nm$ e $r_2 = 30nm$. Quando o campo está decrescendo, a magnetização média também decresce devido o deslocamento do vórtice como na fig. 2.10 (linha 1), já que a posição de equilíbrio do centro do vórtice muda ao se aproximar de um dos buracos. Seguindo o processo, para o valor de campo $h_{ext} \approx 0.182$ o centro do vórtice encontra a borda do buraco da direita e o valor da magnetização média é $M_y \approx 0.196M_s$. A partir daí, um pequeno decréscimo do campo causará uma queda abrupta na magnetização como vemos na fig. 2.10 (linha 2), pois o centro do vórtice cai dentro do buraco, tendo um rápido deslocamento e o campo $h_{ext} \approx 0.182$ não é suficiente para manter

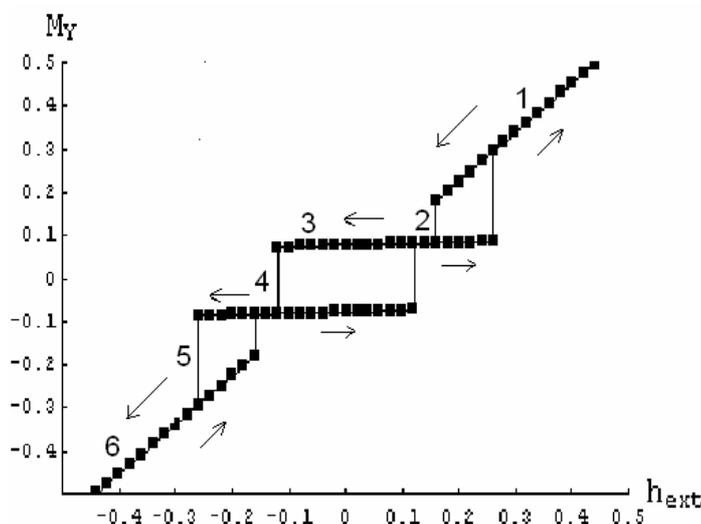


Figura 2.10. traço de histerese para o nanodisco com dois buracos

o centro do vórtice tão próximo da borda interna do buraco. Depois, a magnetização cairá vagarosamente através da linha 3 até o valor em que o campo vale $h_{ext} \approx -0.112$ e $M_y \approx 0.098M_s$. Esta pequena inclinação da linha 3 está associada a forte interação entre o

vórtice e o buraco quando o centro vórtice está dentro do buraco. A queda abrupta que ocorre na linha 4 está associada a saída do buraco da direita e entrada no buraco da esquerda. Já a linha 5 diz respeito a interação do vórtice com a borda interna do buraco da esquerda seguida da linha 6, quando o vórtice sai deste buraco.

A região retangular central mostrada na histerese da figura (2.10) está qualitativamente de acordo com os resultados experimentais das referências [14,15]. Um comportamento interessante ocorre na região central da histerese que está associada a dois estados estáveis . As variações na região central da histerese estão relacionadas ao salto do centro do vórtice de um estado para o outro, o que chamamos de “chaveamento” entre estados. Este mecanismo de “chaveamento” pode ser explicado da seguinte maneira: Consideremos, inicialmente, o estado de equilíbrio quando o centro do vórtice está num dos buracos, por exemplo, na esquerda. Nesta situação, a força de aprisionamento, associada ao potencial V_{eff} , atua no centro do vórtice. Depois que se aumenta o campo magnético externo ao longo do eixo y ($h_y > 0$), é possível mover o vórtice através da barreira de potencial que separa os dois buracos. Assim, o vórtice saltará para o buraco da direita. Quando o campo é invertido ocorrerá o mesmo processo e o vórtice voltará para o buraco da esquerda, fechando o ciclo.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS DE SIMULAÇÕES

3.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

Realizamos simulações de Monte Carlo usando o algoritmo de Metropolis numa rede quadrada em forma de disco com dois buracos (ver fig. 3.1). Para que as simulações de Monte Carlo dêem resultados aceitáveis, é necessário desprezar, no cálculo dos valores médios das grandezas, os passos em que há grande oscilação da energia do sistema, ou seja, os passos nos quais o sistema ainda não está em equilíbrio. Para compararmos os resultados com as previsões teóricas do capítulo 2, partimos de configurações iniciais do tipo vórtice centrado (Fig. 3.1). Este procedimento ajuda o sistema a equilibrar mais rápido (com menos passos Monte Carlo).

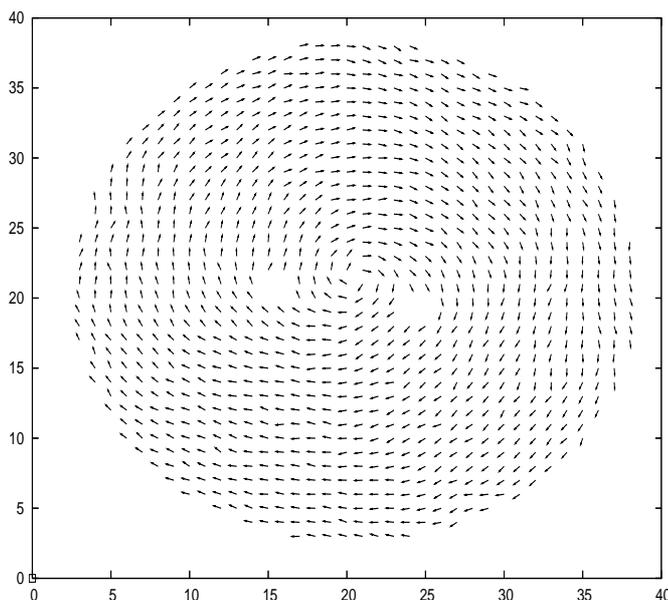


Figura 3.1: Rede quadrada em forma de disco com dois buracos não-magnéticos

Como os resultados experimentais sugerem que estes sistemas têm um comportamento fortemente planar (pela presença de vórtices), vamos simular um nanodisco magnético pelo modelo de rede discreta descrito pelo hamiltoniano abaixo [3]:

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + B \sum_i (\vec{S}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (3.1)$$

em que a primeira parte está associada a hamiltoniana do modelo XY, já que estamos considerando o disco com espessura desprezível e as somas são sobre os sítios i e sobre seus primeiros vizinhos j . O segundo termo está associado aos efeitos de borda do disco, pois estamos considerando um sistema finito, em que a soma se estende sobre os spins da borda i' . No segundo termo \hat{n} é o vetor normal à superfície e B corresponde a uma constante de anisotropia que orienta \vec{S} com respeito à superfície. Desta forma, haverá uma competição entre energia de troca e a energia magnetostática associada à borda do disco. Assim, teremos uma configuração de energia mínima quando os vetores de spin da borda estiverem perpendiculares ao vetor normal, ou seja, tangentes à borda em cada ponta desta e os demais spins no plano em forma de vórtice centrado. Nas simulações utilizamos redes quadradas $L \times L = 40 \times 40$. Por conveniência assumimos que $J = S = 1$ e medimos a temperatura em unidades de J ($T_{med} = T / J$).

3.2 RESULTADOS OBTIDOS

Apresentaremos a seguir os resultados de simulação Monte Carlo para o sistema descrito pela hamiltoniana (3.1) na presença de dois buracos não-magnéticos a fim de visualizarmos como o sistema atinge o equilíbrio a uma certa temperatura. Na figura 3.2 mostramos a energia do sistema em função do número de passos Monte Carlo à temperatura $T / J = 0.05$, para uma rede 40×40 em forma de disco com dois buracos (figura 3.3) de raio $\rho = 1a$ e a distância entre os seus centros $D = 10a$, em que a é o

espaçamento de rede. Aqui o parâmetro de anisotropia $B/J = 0.01$. Pelo gráfico da Fig. 3.2 observamos que após 5000 passos Monte Carlo o vórtice estabilizou entre os dois buracos. Realizamos várias simulações e vimos que para uma razão $\rho/D \sim 0.12$, o estado estável para o vórtice se encontra no centro do disco. Este resultado está de acordo com as previsões analíticas das figuras 2.3 e 2.5.

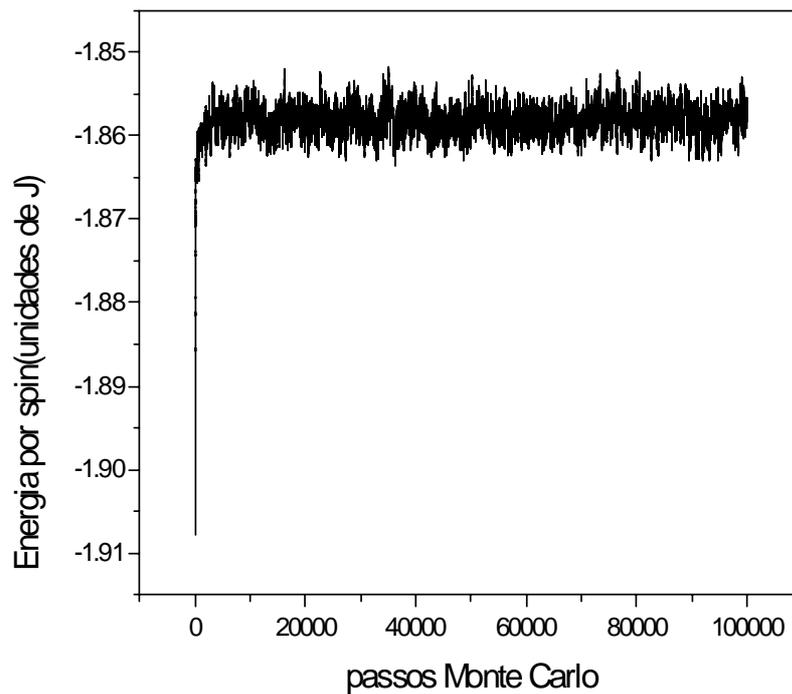


Figura 3.2: Energia por spin X número de passos Monte Carlo para um rede 40x40 em forma de disco com dois buracos de raio $\rho = 1a$ e distância entre eles $D = 10a$.

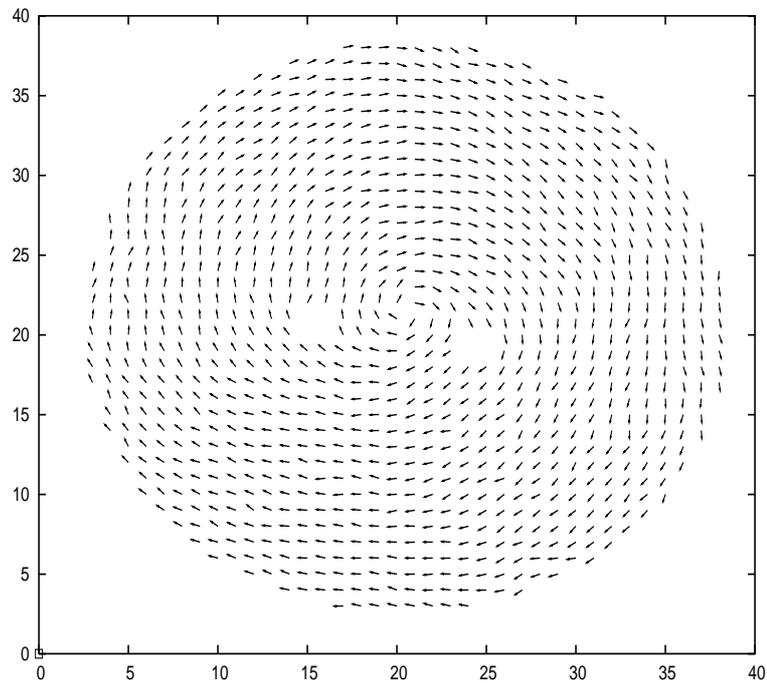


Figura 3.3: Configuração do vórtice na rede 40x40 com dois buracos de raio $\rho = 1a$ e distância entre eles $D = 10a$, após 50.000 passos Monte Carlo.

Nas figuras 3.4 e 3.5 mostramos, respectivamente, a energia em função do número de passos Monte Carlo e a configuração da rede em forma de disco após 50.000 passos. Neste caso consideramos que o raio do buraco vale $\rho = 3a$ e a distância entre os centros dos buracos permanece $D = 10a$, para o parâmetro de anisotropia $B/J = 0.01$. Assim como anteriormente, o sistema estabilizou após 5000 passos. Vemos que agora o estado de estabilidade do vórtice se encontra num dos buracos. Realizamos várias simulações e notamos que para uma razão $\rho/D \sim 0.32$ o vórtice tende a ficar aprisionado num dos buracos, o que está de acordo com as previsões analíticas referentes às figuras 2.4 e 2.6.

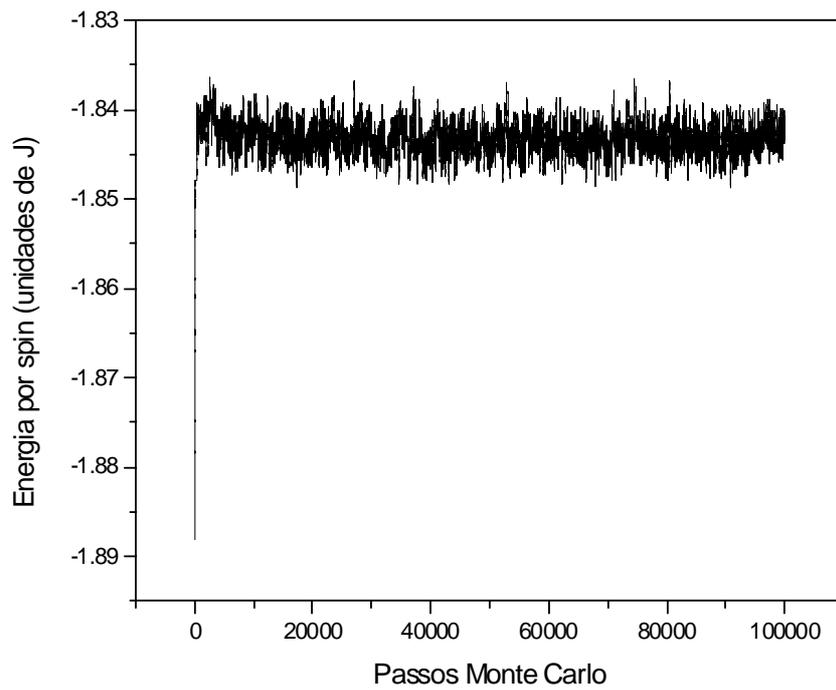


Figura 3.4: Energia por spin \times passos Monte Carlo para uma rede 40×40 em forma de disco com dois buracos de raio $\rho = 3a$ e a distância entre eles $D = 10a$

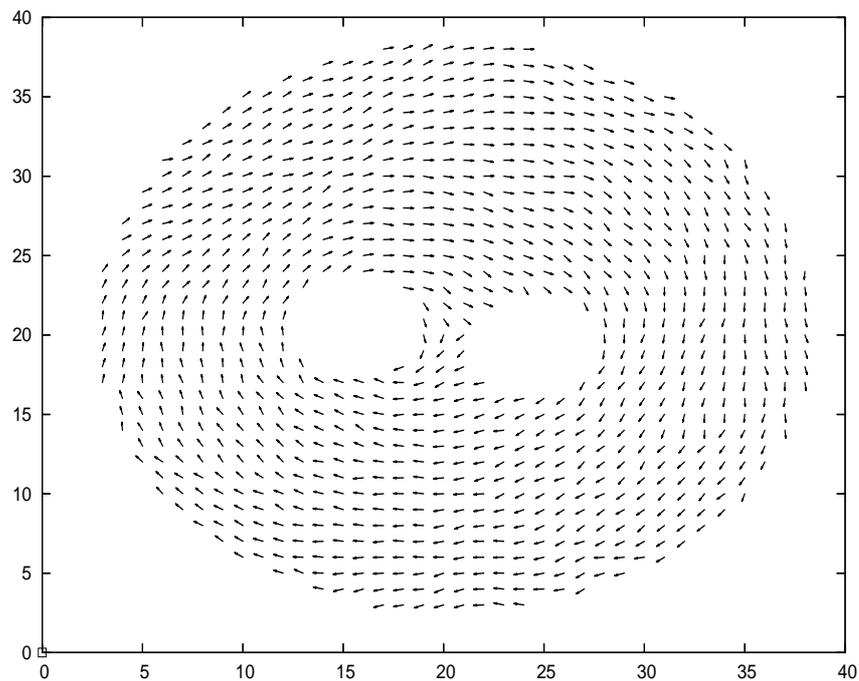


Figura 3.5: Configuração do vórtice numa rede 40×40 com dois buracos de raio $\rho = 3a$ e distância entre eles $D = 10a$, após 50.000 passos Monte Carlo.

O estudo analítico apresentado no capítulo 2 é baseado no modelo do vórtice rígido e energia magnetostática. Neste estudo não aparece explicitamente um termo ou parâmetro relacionando a energia magnetostática com uma anisotropia de borda, similar ao termo B que aparece na hamiltoniana (3.1). Em nossas simulações fizemos uma investigação rápida sobre o efeito do termo B na condição de estabilidade do vórtice. Para isto, mantendo o raio dos buracos $\rho = 3a$ e a distância entre seus centros $D = 10a$, mudamos o valor do parâmetro B/J de 0.01 para 0.05. Como podemos ver nas figuras 3.6 e 3.7 agora o vórtice não foi atraído para nenhum dos buracos como ocorreria para $B/J = 0.01$. Isto mostra que o parâmetro B tem influência sobre a configuração de equilíbrio do vórtice. Esta influência, e a relação com o modelo contínuo, requer um estudo mais detalhado que pretendemos realizar futuramente. Numa primeira observação, nos parece que a relação ρ/D , para as quais o vórtice se estabiliza sobre um dos buracos, depende do valor B/J .

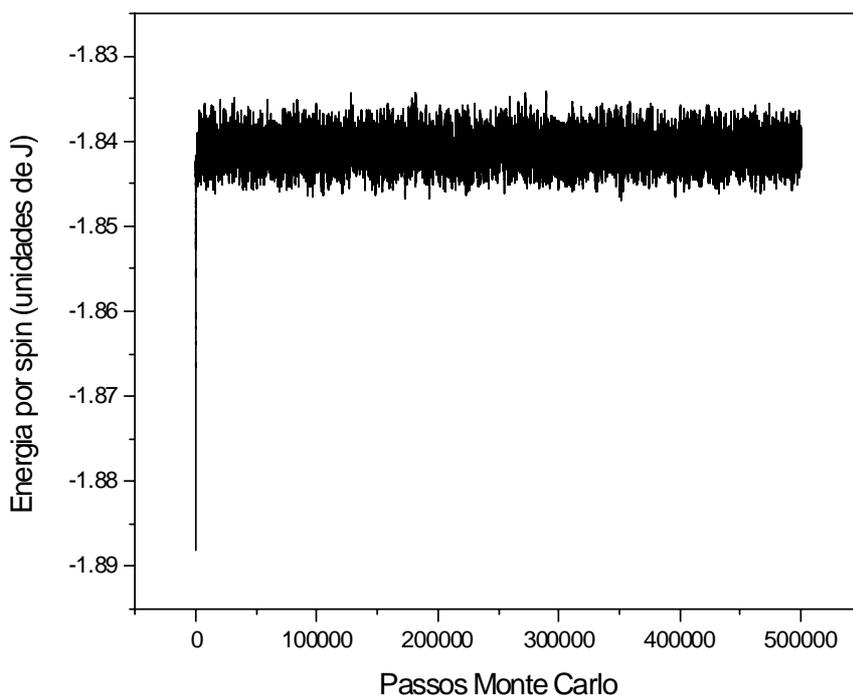


Figura 3.6: Energia por spin \times passos Monte Carlo para uma rede 40×40 em forma de disco com dois buracos de raio $\rho = 3a$ e a distância entre eles $D = 10a$ para um parâmetro de anisotropia $B = 0.05$

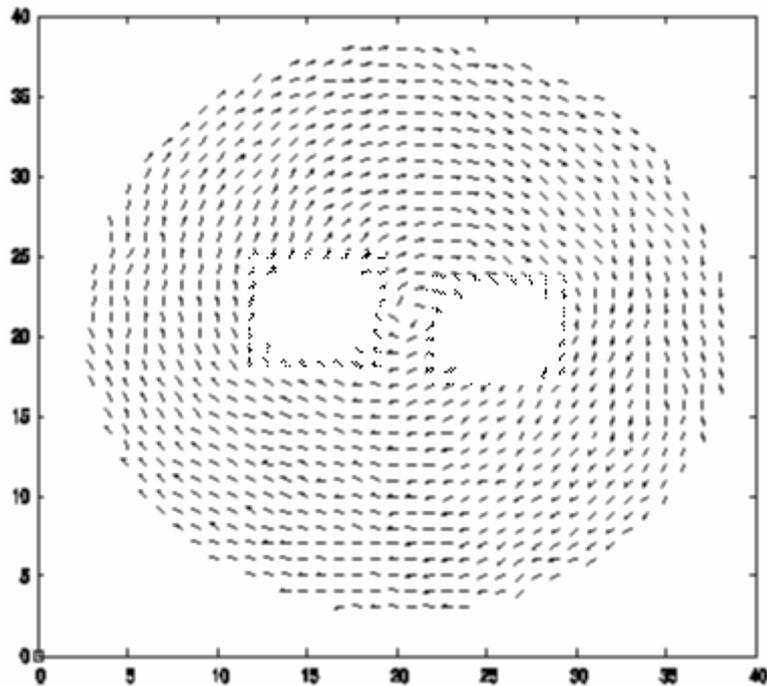


Figura 3.7 : Configuração de equilíbrio do vórtice para $B = 0.05$

Consideremos, a seguir, a aplicação de um campo magnético no sentido positivo do eixo y , no mesmo sistema da figura 3.4 . As figuras 3.8 e 3.9 mostram a energia por spin em função do número de passos Monte Carlo e as configurações do vórtice com a aplicação do campo, respectivamente. Vemos que após 5000 passos o vórtice estabilizou no buraco da esquerda (Figura 3.9 (a)). Ao chegar em 15000 passos, o campo externo foi ligado e a energia do sistema aumentou até 30000 passos, e a partir deste ponto a energia estabilizou mostrando o aprisionamento do vórtice no buraco da direita (Figura 3.9(b)). Assim como nos resultados analíticos das figuras 2.7 e 2.8, podemos ver que a presença de um campo externo pode forçar o vórtice a sair de um buraco e ser aprisionado no outro buraco (chaveamento).

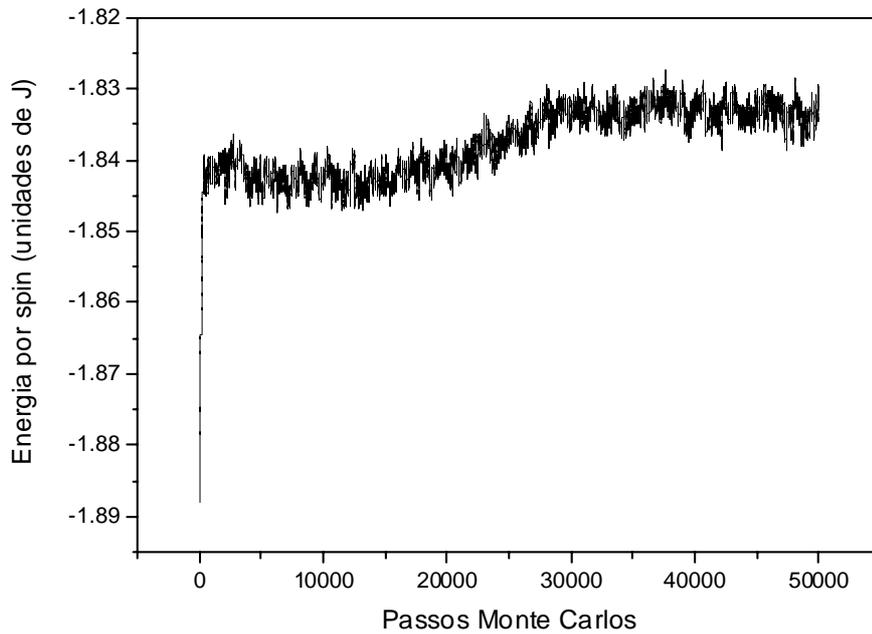


Figura 3.8: Energia por spin \times passos Monte Carlo para uma rede 40×40 em forma de disco com dois buracos de raio $\rho = 3a$ e a distância entre eles $D = 10a$ que mostra a transição da estabilidade do vórtice de um buraco para o outro, após um campo ser ligado.

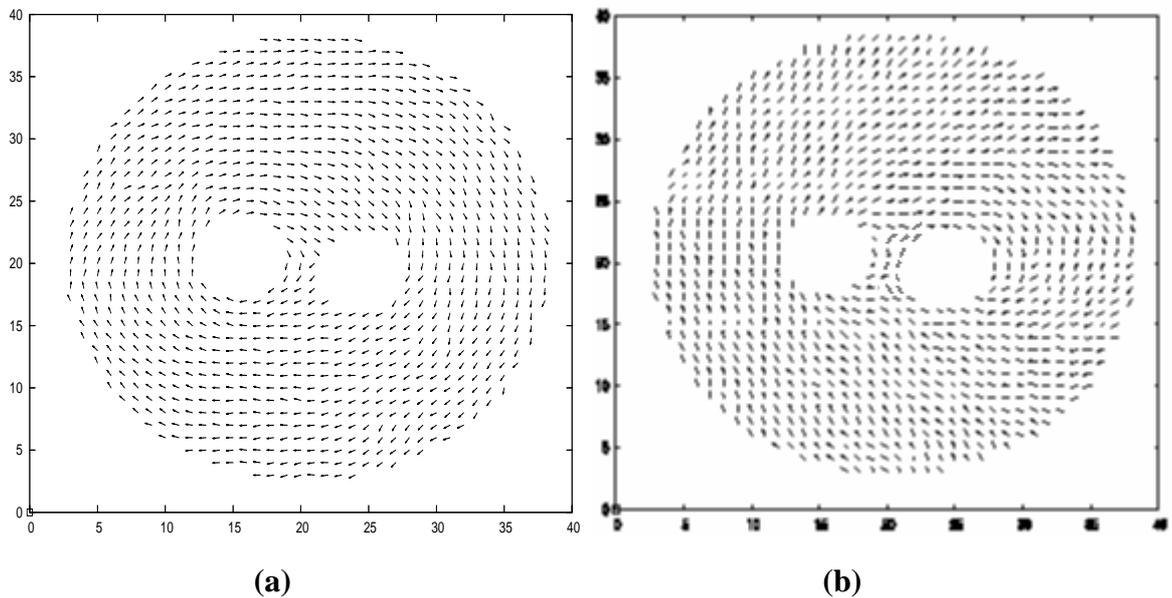


Figura 3.9: (a) Configuração do vórtice aprisionado no buraco da esquerda após 5000 passos Monte Carlo (antes). (b) Configuração do vórtice aprisionado no buraco da direita, devido à presença de um campo externo, após 30000 passos (depois).

3.2.1 Simulação da curva de Histerese

Com o objetivo de simular a curva de Histerese, consideramos $\rho = 2a$ e $D = 14a$ para $B = -0.01$. O intervalo de variação do campo externo h_{ext}/J é entre -0.1 até 0.1. Para obter uma configuração estável do sistema, variamos a temperatura de $T/J = 0.2$ até $T/J = 0.1$. Após os primeiros 30.000 passos Monte Carlo, o vórtice estabilizou no buraco da direita. Quando chegamos aos 60.000 passos, o campo externo foi ligado. Obtivemos assim uma curva de histerese representada na figura 3.10. Note que esta curva tem um comportamento qualitativo semelhante ao comportamento experimental apresentada na figura 2.1. Com a simulação, vimos que o vórtice permaneceu no buraco da direita (figura 3.11) para a variação do campo de $h_{ext}/J = -0.1$ até $h_{ext}/J = 0.04$ (linha 1 da figura 3.10).

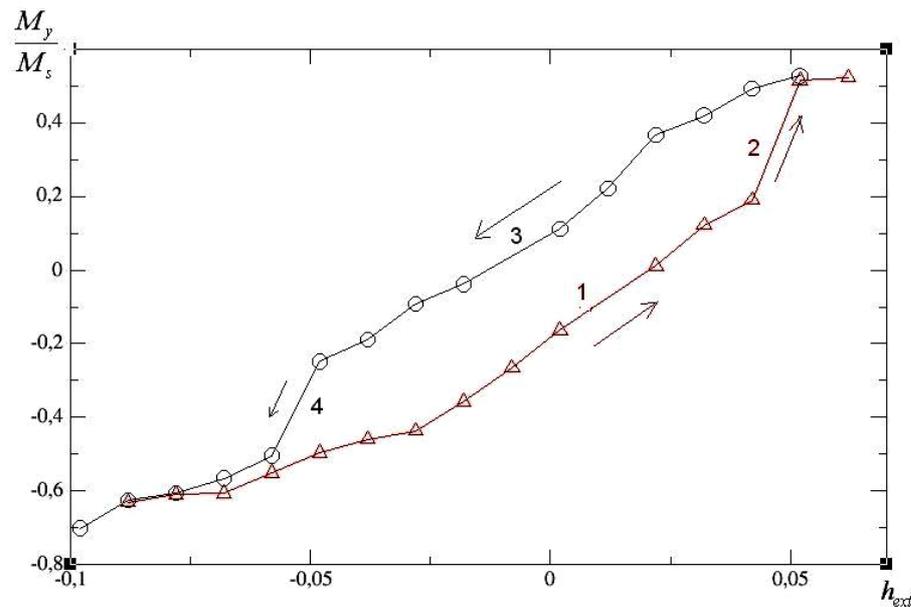


Figura 3.10 : Curva de histerese para o disco com $\rho = 2a$ e $D = 14a$.

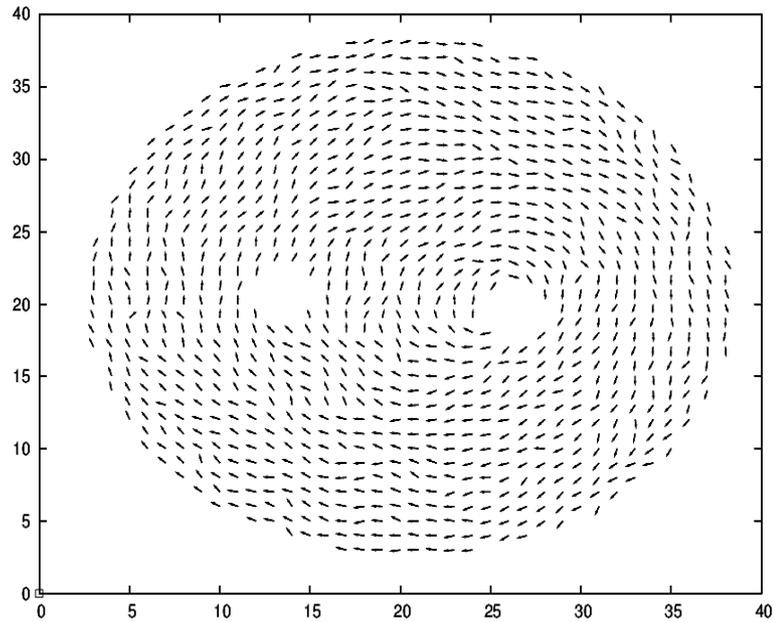


Figura 3.11: Uma configuração do vórtice referente à linha 1 da curva de histerese.

Quando o campo externo chega a $h_{ext} / J = 0.04$, ocorre um salto abrupto na magnetização de $M_y / M_s = 0.12$ para $M_y / M_s = 0.51$ (linha 2 da figura 3.10). Nesta situação, podemos ver uma configuração do vórtice na transição do buraco da direita para o da esquerda (figura 3.12)

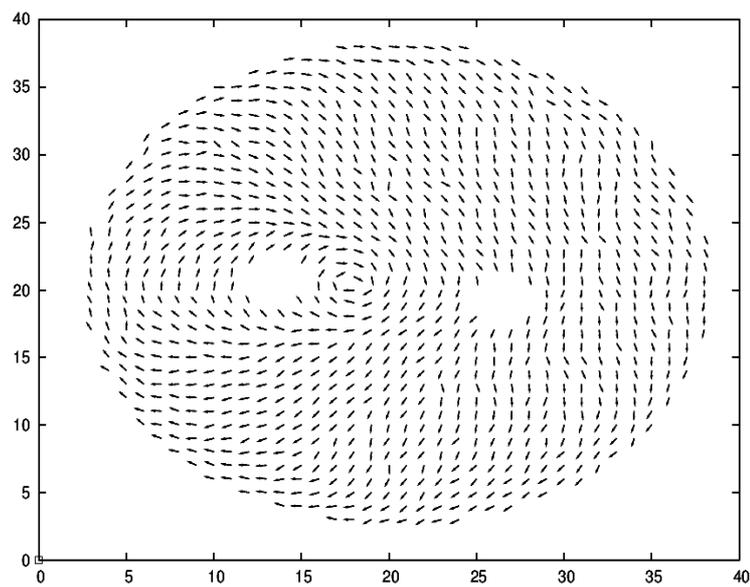


Figura 3.12: Uma configuração do vórtice referente à linha 2 da curva de histerese.

Seguindo o processo, o vórtice se mantém preso no buraco da esquerda (figura 3.13) quando o campo é varrido de $h_{ext}/J = 0.1$ até $h_{ext}/J = -0.04$ de acordo com a linha 3 da figura 3.10.

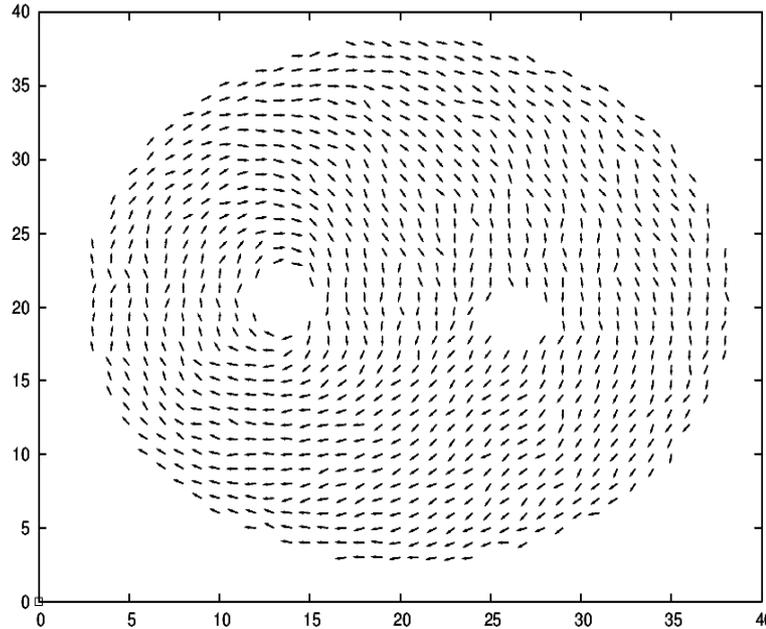


Figura 3.13: Uma configuração do vórtice referente à linha 3 da curva de histerese.

Ao chegar no campo $h_{ext}/J = -0.04$, ocorre uma queda abrupta na magnetização de $M_y/M_s = -0.28$ para $M_y/M_s = -0.45$ conforme a linha 4 da figura 3.10. Neste caso o vórtice solta do buraco da esquerda (ver figura 3.14), e volta para o buraco da direita, fechando assim o ciclo.

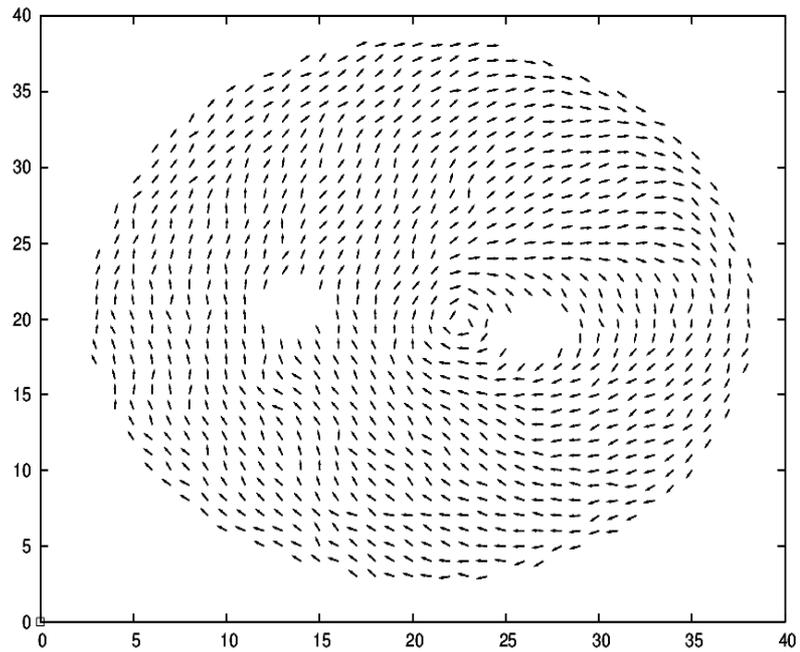


Figura 3.14: Uma configuração do vórtice referente à linha 4 da curva de histerese

Assim como na curva de histerese obtida no modelo contínuo, ocorre um “chaveamento” entre as duas configurações estáveis do vórtice. Entretanto, o platô central obtido na histerese via simulação (figura 3.10) e experimental (figura 2.1) possui uma inclinação maior que a do platô da curva de histerese da figura 2.10. Isto porque no cálculo analítico consideramos o modelo de vórtice rígido, porém nas simulações e nos experimentos o vórtice pode apresentar deformações, o que é fisicamente provável.

CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS

Como visto dos resultados experimentais e de nossas previsões teóricas, quando dois buracos são incluídos num nanodisco magnético com magnetização do tipo vórtice, este poderá ficar preso num dos buracos, ou seja, apresentar estados biestáveis de energia .

Dos cálculos analíticos, vimos que a aplicação de um campo externo promove o salto do vórtice de um buraco para o outro, o que chamamos de “chaveamento” entre os buracos. Com isto construímos a curva de histerese e obtivemos um comportamento similar ao obtido experimentalmente [14,15]. Entretanto, o “loop” central da curva de histerese do modelo analítico, relacionado ao “chaveamento” do centro do vórtice entre dois estados estáveis, é verificada para pequenos valores de ρ e D em comparação daqueles usados nos experimentos. Assim nossos resultados analíticos concordam com os experimentais para pequenos deslocamentos do centro do vórtice em relação à posição de equilíbrio s_h .

Nas simulações Monte Carlo, conseguimos observar os estados biestáveis que aparecem para o vórtice, assim como o mecanismo de “chaveamento”. Diferentemente do modelo analítico, o “loop” central da curva de histerese via simulação apresenta uma certa inclinação, semelhante aos resultados experimentais. Isto acontece, pois nas simulações não consideramos o modelo de vórtice rígido e levamos em consideração os efeitos de temperatura.

Em nossas simulações usamos um modelo de rede discreta baseado no modelo XY, com adição do termo de anisotropia de borda relacionado à energia magnetostática. Neste termo aparece um parâmetro de anisotropia B que pode ter o seu valor ajustado de forma que quanto maior o seu valor, maior a tendência do vórtice de ficar centrado. Isto influi no valor do campo de “chaveamento” e nos estados biestáveis de energia do vórtice e deve ser levado em consideração do ponto de vista experimental. Na parte final desse trabalho fizemos uma breve investigação sobre o efeito do parâmetro B e vimos que realmente este interfere no valor campo mínimo de “chaveamento”. Pretendemos, em trabalhos futuros, entender melhor os efeitos desse parâmetro de anisotropia B sobre a formação dos estados de vórtices nos nanodiscos e relacioná-los aos efeitos de borda e a geometria do sistema.

BIBLIOGRAFIA

- [1] M.N. Baibich et al., Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988)
- [2] Proceedings of the 43rd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Miami, FL; 9-12 November 1998- J.Appl. Phys. 85,4277 (1999).
- [3] V.E.Kireev and B.A.Ivanov; Phys.Rev.B 68, 104428(2003).
- [4] Afrânio R.Pereira; Phys.Rev.B71, 224404(2005).
- [5] R.P.Cowburn, D.K.Koltsov, A.O.Adeyeye, M.E.Welland and D.M.Tricker; Phys.Rev.Lett. 83,1042 (1999).
- [6] M.Schneider, H.Hoffmann and J.Zweck; Appl.Phys.Lett.77,2909 (2000).
- [7] J.Raabe, R.Pulwey, R.Sattler, T.Schweinbock, J.Zweck and D.Weiss; J.Appl.Phys.88, 4437(2000).
- [8] K.Yu.Guslienko, V.Novosad, Y.Otani, H.Shima and K.Fukamichi; Appl.Phys.Lett.78, 3848(2001).
- [9] A.Maeda, M.Kume, T.Ogura, K.Kukkoru, T.Yamada, M.Nishikawa and Y.Harada; J.Appl.Phys.76, 6667(1994).
- [10] J.F.Smyth, S.Shultz, D.R.Fredkin, D.P.Kern, S.A.Rishton, H.Schmidt, M.Cali and T.R.Koethler; J.Appl.Phys. 69, 5262(1991).
- [11] J.N.Chapman, P.R.Aitchison, K.J.Kirk, S.McVitie, J.C.S.Kools and M.F.Gillies; J.Appl.Phys.85, 5828(1999).
- [12] A.R.Pereira, S.A.Leonel, P.Z.Coura, B.V.Costa; Phys.Rev.B.71,014403(2005).
- [13] M.Rahm, J.Biberger, V.Umansky and D.Weiss; J.Appl.Phys.93, 7429(2003).
- [14] M.Rahm, R.Hollinger, V.Umansky and D.Weiss; J.Appl.Phys.95, 6708(2004).
- [15] M.Rahm, J.Stahl, W.Wegscheider and D.Weiss; Appl.Phys.Lett.85,1553 (2004).
- [16] Thomas Uhlig, M.Rahm, Christian Dietrich, Rainer Hollinger, Martin Heumann, Dieter Weiss and Josef Zweck; Phys.Rev.Lett.95, 237205 (2005)
- [17] M.Rahm, J.Stahl and D.Weiss; Appl.Phys.Lett.87, 182107 (2005).

- [18] N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller and E.Teller; J.Chem.Phys.21, 1087 (1953); para revisão, veja por exemplo; Monte Carlo Methods in Statistical Physics, edited by K.Binder(Springer New York, 1979).
- [19].M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973).
- [20] F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, and C. Kawabata, Phys. Rev. Lett.59, 117 (1987); Phys. Rev.B 39, 591 (1989).
- [21] M.E. Gouvêa, G.M. Wysin, A.R. Bishop, and F.G. Mertens, Phys. Rev. B 39, 11840 (1989).
- [22] A.R. Pereira, A.S.T. Pires, M.E.Gouvêa and B.V. Costa, Z. Phys. B: Condens.Matter 89, 109 (1992).
- [23] N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966).
- [24] Salinas, Silvio R.A.- Introdução à física estatística – EDUSP.
- [25] F.M. Paula, A.R. Pereira, and L.A.S. Mól, Phys. Lett. A329, 155 (2004).
- [26] A.R. Pereira, L. A. S. Mól, S. A. Leonel, P. Z. Coura, and B. V. Costa, Phys. Rev. B **68**, 132409 (2003).
- [27] F. M. Paula, A. R. Pereira, and L. A. S. Mól, Phys. Lett. A **329**, 155 (2004)