

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DOUTORADO EM FÍSICA

Maxwel Gama Monteiro Junior

**Métodos em GPU para explorar a estabilidade topológica de nanomagnetos**

JUIZ DE FORA

2020

Maxwel Gama Monteiro Junior

Métodos em GPU para explorar a estabilidade topológica de nanomagnetos

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

Orientador: Prof. Dr. Fernando Sato

Coorientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

JUIZ DE FORA

2020

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Gama Monteiro Junior, Maxwell.

Métodos em GPU para explorar a estabilidade topológica de nanomagnetos / Maxwell Gama Monteiro Junior. -- 2020.  
208 p. : il.

Orientador: Fernando Sato

Coorientador: Sidiney de Andrade Leonel

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2020.

1. Micromagnetismo. 2. Programação em Paralelo. 3. Memórias MRAM. 4. Defeitos Topológicos. 5. GPU. I. Sato, Fernando, orient. II. de Andrade Leonel, Sidiney, coorient. III. Título.

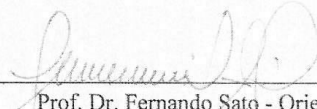
**Maxwel Gama Monteiro Junior**

**"Métodos em GPU para explorar a estabilidade topológica de nanomagnetos".**

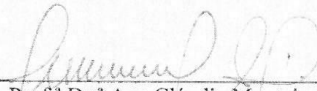
Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial a obtenção do grau de Doutor em Física. Área de Concentração: Física.

Aprovada em 07 de outubro de 2020.

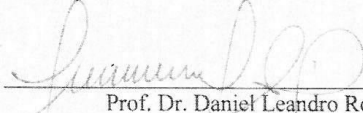
BANCA EXAMINADORA



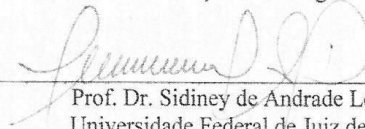
Prof. Dr. Fernando Sato - Orientador  
Universidade Federal de Juiz de Fora



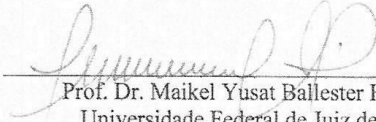
Prof.ª Dr.ª Ana Cláudia Monteiro Carvalho  
Universidade Federal de São João Del-Rei



Prof. Dr. Daniel Leandro Rocco  
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais



Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel  
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. Dr. Maikel Yusat Ballester Furones  
Universidade Federal de Juiz de Fora



*Em todos os mundos que teriam sido possíveis, dedico esse esforço à Ramona e Cícero.*

# Agradecimentos

Primeiramente, agradeço imensamente à minha esposa Ramona. Sem ela não só essa tese não teria sido concluída como diversos outros planos também não. Nossa cumplicidade está muito acima do lugar comum de relacionamento amoroso e devo todas as minhas superações ao carinho e apoio dela.

Agradeço também ao meu orientador Prof. Fernando Sato, que durante uma longa jornada prestou apoio ao meu aprendizado e também agiu como bom amigo em todos os momentos. Sua orientação me trouxe confiança e independência que me deixam seguro para trilhar os caminhos futuros, e também de que a experiência do doutorado foi proveitosa e enriquecedora.

Agradeço a todos os meus amigos e colegas do departamento de física da UFJF, os docentes e demais funcionários com os quais tive a sorte de conviver durante os anos de doutorado. Levo um pouco da vivência de cada um para o futuro, com a certeza de que todos esses contatos me deixaram mais experiente, mais empático e mais preparado para retribuir aos mais novos toda a ajuda que recebi.

Por último e não menos importante, agradeço também à minha família, em especial meus pais. Dentro de todas as possibilidades ruins e dentro das minhas limitações elevadas, fui criado em um lar com amor e carinho o suficiente para aprender a me aceitar e me reconhecer, assim fazendo também com os outros. Graças a minha família textos como esse e minhas interações com o mundo são possíveis.

Agradeço também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), e à UFJF por todo o suporte financeiro e estrutural tão indispensável para a realização desse trabalho.

*“Computers are useless. They can only give you answers”.*

Pablo Ruiz Picasso

## Resumo

Nessa tese, demonstramos uma metodologia original para o tratamento computacional do micromagnetismo, que descreve de maneira contínua detalhes das interações fundamentais que regem a dinâmica da magnetização em um material ferromagnético. Utilizando a tecnologia de unidades de processamento gráfico, nosso algoritmo é capaz de alcançar um alto grau de eficiência na simulação de casos gerais de materiais magnéticos, com liberdade total na escolha de parâmetros físicos e geometria das amostras e com uma melhora média de duas ordens de grandeza no tempo de simulação para problemas típicos. Isso é possível a partir do cálculo integral das interações de longo alcance presentes, sem truncamentos ou hipóteses de natureza numérica que restringem mais o domínio de validade das simulações.

Além disso, também desenvolvemos um método de integração original adaptado para os sistemas não-lineares típicos da equação dinâmica do micromagnetismo (a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert ou LLG). O integrador é uma adaptação do método do ponto médio esférico, recentemente demonstrado como sendo simplético para sistemas de spin clássicos, analogamente ao método de Verlet para a equação Newtoniana de movimento. O uso desse integrador depende de uma formulação Hamiltoniana discretizada para as interações magnéticas em materiais, que mostramos ser equivalente até segunda ordem ao modelo micromagnético contínuo.

Aplicamos essa metodologia criada em diversos tipos de problemas pertinentes ao estudo do ferromagnetismo de sistemas complexos. Nossa metodologia se mostrou adequada para lidar com fenômenos envolvendo cargas topológicas na magnetização, como vórtices e skyrmions.

Propomos uma geometria modificada para nanodiscos a fim de miniaturizar dispositivos baseados no uso da polaridade de vórtices magnéticos para o seu funcionamento. Também usamos o método para estudar efeitos estocásticos em sistemas sobre a presença de corrente, interessantes para aplicações em temperatura ambiente. Diversas aplicações futuras também são apresentadas, transformações entre cargas topológicas e efeitos térmicos ou outras perturbações externas.

**Palavras-chave:** Micromagnetismo; Programação em Paralelo; Memórias MRAM; Defeitos topológicos; GPU.

## Abstract

In this thesis, we demonstrate an original methodology for the computational and numerical treatment of micromagnetism, which continuously describes details of the fundamental interactions that govern the dynamics of magnetization in a ferromagnetic material. Using the technology of graphic processing units (GPUs), our algorithm is able to achieve a high degree of efficiency in the simulation of general cases of magnetic materials, with total freedom in the choice of physical parameters and geometry of the samples and with an average improvement of two orders of magnitude in the simulation time for typical problems. This is possible from the integral calculation of the long-range interactions present, without truncations or numerical hypotheses that further restrict the validity domain of the simulations.

In addition, we have also developed an original integration method adapted to the nonlinear systems typical of the dynamic micromagnetism equation (the Landau-Lifshitz-Gilbert or LLG equation). The integrator is an adaptation of the spherical midpoint method, recently demonstrated to be symplectic for classical spin systems, analogously to the Verlet method for the Newtonian equation of motion. The use of this integrator depends on a discretized Hamiltonian formulation for the magnetic interactions in materials, which we have shown to be equivalent until second order to the continuous micromagnetic model.

We applied this methodology created in several types of problems pertinent to the study of ferromagnetism of complex systems. Our methodology proved to be adequate to deal with phenomena involving topological loads in the magnetization, such as vortices and skyrmions, enabling the study of them in different time scales, which we verified from benchmarking tests.

We propose a modified geometry for nanodisks in order to miniaturize devices based on the use of magnetic vortex polarity for their operation. We also used the method to study stochastic effects in systems on the presence of current, showing that thermal noise does not destroy the balance of interesting states for applications at room temperature. Several future applications are also presented, with an emphasis on non-trivial geometries, transformations between topological loads and thermal effects or other external disturbances that hinder the use of previously established methodologies.

**Key-words:** Micromagnetism; Parallel Programming; MRAM Memories; Topological defects; GPU.

## Riassunto

In questa tesi, dimostriamo una metodologia originale per il trattamento computazionale e numerico del micromagnetismo, che descrive continuamente i dettagli delle interazioni fondamentali che governano la dinamica della magnetizzazione in un materiale ferromagnetico. Utilizzando la tecnologia delle unità di elaborazione grafica (GPU), il nostro algoritmo è in grado di raggiungere un elevato grado di efficienza nella simulazione di casi generali di materiali magnetici, con totale libertà nella scelta dei parametri fisici e geometrici dei campioni e con un miglioramento medio di due ordini di grandezza nel tempo di simulazione per problemi tipici. Ciò è possibile dal calcolo integrale delle interazioni di lungo raggio presenti, senza troncamenti o ipotesi numeriche che restringano ulteriormente il dominio di validità delle simulazioni.

Inoltre, abbiamo anche sviluppato un originale metodo di integrazione adattato ai sistemi non lineari tipici dell'equazione del micromagnetismo dinamico (l'equazione di Landau-Lifshitz-Gilbert o LLG). L'integratore è un adattamento del metodo del punto medio sferico, recentemente dimostrato di essere semplicistico per i sistemi di spin classici, analogamente al metodo di Verlet per l'equazione del moto di Newton. L'utilizzo di questo integratore dipende da una formulazione Hamiltoniana discretizzata per le interazioni magnetiche nei materiali, che abbiamo dimostrato essere equivalente fino al secondo ordine al modello micromagnetico continuo.

Abbiamo applicato questa metodologia creata in diversi tipi di problemi pertinenti allo studio del ferromagnetismo di sistemi complessi. La nostra metodologia si è dimostrata adeguata per affrontare fenomeni che coinvolgono carichi topologici nella magnetizzazione, come vortici e skyrmion, consentendone lo studio in diverse scale temporali, che abbiamo verificato da test di benchmarking.

Proponiamo una geometria modificata per nanodischi al fine di miniaturizzare dispositivi basati sull'uso della polarità del vortice magnetico per il loro funzionamento. Abbiamo anche utilizzato il metodo per studiare gli effetti stocastici nei sistemi sulla presenza di corrente, dimostrando che il rumore termico non distrugge l'equilibrio di stati interessanti per applicazioni a temperatura ambiente. Vengono inoltre presentate diverse applicazioni future, con un'enfasi su geometrie non banali, trasformazioni tra carichi topologici ed effetti termici o altri disturbi esterni che ostacolano l'uso di metodologie stabilite in precedenza.

**Palabras-clave:** Micromagnetismo; Programmazione Parallela; MRAM; Carica Topologica; GPU;

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – O primeiro dispositivo de armazenamento de memória. . . . .	15
Figura 2 – Esquema de funcionamento de um disco rígido típico. . . . .	16
Figura 3 – Esquema de funcionamento de uma MTJ com suas respectivas camadas livre (CL), de referência (CR) e barreira de tunelamento (BT). . . . .	17
Figura 4 – Acoplamento entre <b>J</b> , <b>L</b> , e <b>S</b> . . . . .	23
Figura 5 – Comportamento típico de um material em regime paramagnético com a temperatura. . . . .	28
Figura 6 – Ilustração do Campo magnetostático em uma amostra circular. . . . .	39
Figura 7 – Interação DM localizada na interface entre camadas de um filme fino de CoPt. . . . .	42
Figura 8 – Torques correspondentes a cada termo da equação LLG. . . . .	46
Figura 9 – Distribuição normalizada da carga topológica em um material bidimensional. . . . .	49
Figura 10 – Alguns membros da família de funções $h_t(x, t)$ cuja composição resulta em $\mathbb{H}(x, t) = (1 - t)x^3 + te^x$ . . . . .	51
Figura 11 – Estrutura da magnetização na vizinhança imediata de um ponto de Bloch. . . . .	54
Figura 12 – Grade discretizada em uma rede cúbica e regular para implementação do método das diferenças finitas em uma esfera e um círculo. . . . .	57
Figura 13 – Visão intuitiva do fluxo de instruções de um programa serial (acima) e um paralelo (abaixo). . . . .	58
Figura 14 – Esquema de um processador com memória distribuída. . . . .	60
Figura 15 – Esquema de um processador com memória compartilhada. . . . .	61
Figura 16 – Divisão física da memória de uma GPU CUDA. . . . .	63
Figura 17 – Divisão abstrata da memória de uma GPU CUDA, em uma matriz de threads e blocks. . . . .	64
Figura 18 – Esquemática da redução de soma para um vetor de 7 posições. . . . .	72
Figura 19 – Esquemática do método de N-Corpos. . . . .	77
Figura 20 – Seção transversal da esfera e discretização. . . . .	84
Figura 21 – Stencil de 7 pontos usando os primeiros vizinhos de sítio em uma rede cúbica discreta. . . . .	95
Figura 22 – Esquema de células virtuais para implementação das condições de contorno da eq. 5.2. . . . .	97
Figura 23 – Comparação entre os métodos do ponto médio esférico (linha sólida) e clássico (pontos). . . . .	107

Figura 24 – Geometria da amostra do problema #4 do NIST (acima) e Campo vetorial magnetização do estado inicial (abaixo). . . . .	115
Figura 25 – Evolução temporal da magnetização do problema #4 para os integradores considerados. . . . .	117
Figura 26 – Evolução temporal da magnetização do problema #4 para os integradores considerados. . . . .	120
Figura 27 – Mecanismo de inversão (primeiro instante em que $M_x = 0$ ) para o problema #4. . . . .	122
Figura 28 – Densidade de carga topológica $n(\mathbf{r})$ no momento da inversão do Campo para o segundo caso do problema #4. . . . .	124
Figura 29 – Evolução temporal do erro da sequência $(\alpha)_n$ . . . . .	128
Figura 30 – Evolução temporal da energia para dois casos de Campo. . . . .	129
Figura 31 – Tempo total $T_R$ sobre tempo total simulado $T_S$ para estruturas de diversos números de células $N$ . . . . .	131
Figura 32 – Modelo de polinômio de sexta potência para o aprisionamento aprimorado de um vórtice em um nanodisco. . . . .	142
Figura 33 – Comprimento térmico $T_{ex}$ em função dos comprimentos de correlação $a$ para amostras de Py. . . . .	157
Figura 34 – Dinâmica da magnetização em equilíbrio para as temperaturas de $300K$ e $600K$ (acima e abaixo respectivamente). . . . .	159
Figura 35 – Skyrmion formado pela quebra da simetria de inversão em um Campo magnetização. . . . .	171
Figura 36 – Localização do skyrmion segundo os primeiros momentos de $\langle n \rangle$ , $\langle m_z \rangle$ e otimização via sapos, em uma nanofita finita de $2\mu m$ de largura. . . . .	173
Figura 37 – Raio do skyrmion em função do tempo durante aplicação de uma densidade de corrente. . . . .	174
Figura 38 – Evolução dinâmica da inversão da polaridade em um nanodisco torre de Hanoi. . . . .	176
Figura 39 – Dinâmica da carga topológica definida pela eq. 3.1. . . . .	177
Figura 40 – Modo girotrópico do vórtice chegando ao estado de equilíbrio no interior da estrutura de torre de Hanoi. . . . .	179



# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
<b>I</b>	<b>Teoria e Implementações</b>	<b>20</b>
<b>2</b>	<b>Ferromagnetismo em Sólidos</b>	<b>21</b>
2.1	Campos e momentos magnéticos na matéria	21
2.2	Magnetização e Campos clássicos	26
2.3	Micromagnetismo e interações magnéticas	31
2.3.1	Interação de Troca	34
2.3.2	Interação Magnetostática	37
2.3.3	Interação Zeeman	40
2.3.4	Interações Anisotrópicas	40
2.3.5	Interação de Troca Antissimétrica	42
2.3.6	Outras interações	44
2.3.7	Dinâmica da magnetização	44
<b>3</b>	<b>Topologia e Solitons Magnéticos</b>	<b>48</b>
3.1	Homotopias e cargas topológicas	48
3.2	Estabilidade topológica	51
3.3	Conservação de Cargas Inteiras	53
<b>4</b>	<b>Métodos Numéricos e Paralelismo em GPUs</b>	<b>56</b>
4.1	Problemas em Domínios Discretos	56
4.2	Estruturas de Dados e Execução	58
4.3	CUDA: Warps, Threads, Blocks, Grids	62
4.4	Técnicas de Paralelismo	68
4.5	Lista de Vizinhos	78
4.6	Discretização Espacial de Domínios Magnéticos	81
4.7	Discretização Temporal da Dinâmica Micromagnética	85
4.8	A Condição de Courant-Friedrichs-Lewy	90
<b>5</b>	<b>Micromagnetismo Implementado em Paralelo</b>	<b>93</b>
5.1	A Hamiltoniana Micromagnética	93
5.2	O Método do Ponto Médio Esférico	103
5.3	Método Predictor-Corretor Esférico	110

5.3.1	Convergência ao Equilíbrio . . . . .	111
5.3.2	Estabilidade de Passos Temporais . . . . .	112
5.4	Validação Numérica do Modelo Preditor-Corretor . . . . .	114
5.4.1	$\mu$ MAG Standard Problem #4 . . . . .	114
5.4.2	Benchmarking . . . . .	125
<b>II</b>	<b>Aplicações, Resultados e Discussões</b>	<b>134</b>
6	Limites de Tamanho para a Estabilidade de Cargas Topológicas em Nanodiscos . . . . .	135
7	Estabilidade Térmica e Manipulação de Paredes de Domínio Aprisionadas em Impurezas . . . . .	154
8	Perspectivas Futuras e Conclusões . . . . .	170
8.1	Análise Dinâmica de Cargas Topológicas . . . . .	170
8.2	Reversão de Polaridade em Vórtices de Nanodiscos Modificados . . . . .	174
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>182</b>
	<b>APÊNDICE A Erros na integração de métodos discretos . . . . .</b>	<b>189</b>
	<b>APÊNDICE B Equações Precessionais do Micromagnetismo . . . . .</b>	<b>193</b>
	<b>APÊNDICE C Métodos Preditor-Corretores (PC) . . . . .</b>	<b>204</b>
	<b>APÊNDICE D Propriedades da Eq. LLG via Método do Ponto Médio Esférico . . . . .</b>	<b>207</b>

# 1 Introdução

Materiais magnéticos são parte do nosso cotidiano, sendo empregados nas mais diversas áreas, como medicina e eletrônica.<sup>1,2</sup> Há uma demanda crescente por dispositivos magnéticos cada vez mais eficientes e cada vez mais densos espacialmente, principalmente quanto ao armazenamento de dados digitais. Também há lacunas teóricas e fundamentais em nosso conhecimento básico sobre magnetismo na matéria, inclusive na escala típica de aplicações modernas, exigindo esforços tanto experimentais quanto teóricos na elucidação desse tema.

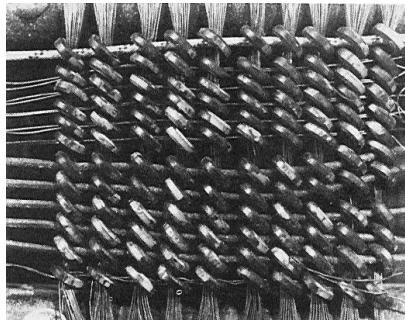
Na área de armazenamento magnético (todos os nossos discos rígidos são construídos com materiais magnetizados), exploramos um fenômeno puramente quântico, que dá origem ao alinhamento espontâneo de entes magnéticos elementares em um material, para modificar esse estado de alinhamento via algum agente externo, e assim controlar esses alinhamentos em micro regiões denominadas domínios. Esses domínios, para todos os efeitos, representam as unidades lógicas, ou *bits*, que utilizamos em nossa construção de meios de comunicação digitais.

Para termos uma ideia da importância atual não só dos dispositivos de armazenamento magnéticos mas também da necessidade de avanços em seu entendimento e sua preservação, em 2011 a capacidade de armazenamento de informação global por toda a civilização foi estimada como sendo de 295 *bilhões de gigabytes* ou 295 *exabytes*.<sup>3</sup> Essa quantia de informação se escrita em livros com tamanho padrão seria o suficiente para cobrir três vezes toda a área da China e dos Estados Unidos simultaneamente. Apesar da redundância dessas informações, dados financeiros, médicos e outras informações confidenciais, assim como cálculos relevantes para as mais diversas aplicações, são armazenados e realizados de forma exclusiva em meios de armazenamento magnético, ressaltando a sua relevância no funcionamento da sociedade.

O primeiro caso de armazenamento magnético foi realizado na IBM em 1952, utilizado numa máquina de ordenação alfabética.<sup>4</sup> O princípio de funcionamento dessa memória de núcleo magnético era muito simples: Imagine vários núcleos colocados em nós, numa estrutura similar a uma grade com fios horizontais e verticais se cruzando. Cada núcleo, nesses pontos nodais na grade, possui então dois estados estáveis, que representam bits (0 ou 1), de acordo com a passagem de corrente ou não através do nó (figura 1). Basicamente, o núcleo “alvo” da corrente pode ser trocado de 0 para 1 ou vice-versa, com as correntes verticais e horizontais que podem ser repassadas por ele. Os elétrons

itinerantes no fio em questão produzem um Campo magnético, e este é responsável pela mudança no estado do núcleo. Note, porém, que a corrente em apenas uma direção do fio é feita pra não ser “suficiente” para alterar o estado de um núcleo. Dessa forma, apenas a passagem de corrente nos eixos “verticais” da figura e “horizontais” através de um nó (de maneira simultânea!) irá ter seu estado alterado. A organização em uma rede possibilita a ativação de apenas um nó ou um conjunto destes, se escolhendo apropriadamente pontos onde abrir e fechar o circuito que compõem toda a estrutura. Agora se pode ativar uma sequência arbitrária de núcleos (uma sequência de bits), que pode ser traduzido em uma informação. Após esses núcleos, fitas magnéticas (com princípio de funcionamento similar) foram utilizadas amplamente, e hoje em dia a forma mais disseminada de armazenamento magnético é o *disco rígido*.

Figura 1 – O primeiro dispositivo de armazenamento de memória.



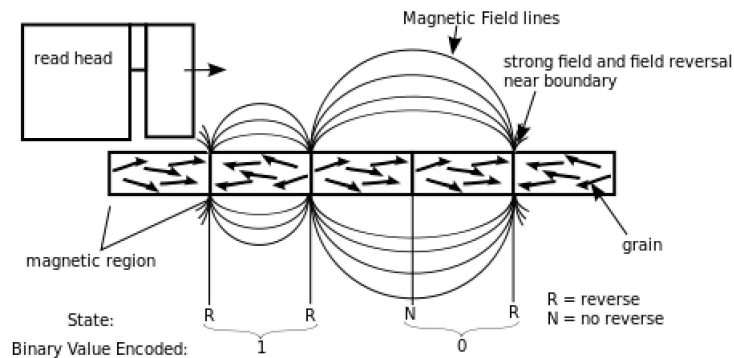
Fonte: Institute of Electrical and Electronics Engineers (2016).

Podemos ver pela figura 1 que, claramente, o armazenamento magnético ocorria em dispositivos com dimensões macroscópicas, na ordem do metro. O progresso rápido no decorrer dos anos trouxe uma queda exponencial na dimensão de tais dispositivos. Na verdade, hoje em dia materiais magnéticos típicos para aplicações tem dimensões características na ordem dos microns e nanômetros. Podemos, corriqueiramente, armazenar uma quantia de mais de  $10^9$  bits em um único centímetro quadrado.<sup>1</sup>

Esforços recentes em Magnetismo tem se concentrado em desenvolver memórias de acesso aleatório magnéticas (MRAM) similares, em princípio, ao dispositivo primitivo que demonstramos, com núcleos magnéticos. Tanto uma MRAM quanto um disco rígido no momento dependem, em seu funcionamento geral, de peças aproximadamente bidimensionais, em formato de filmes finos. Em geral as informações, ou sequências de bits, estão ligadas à orientação magnética desses filmes, que possuem a ordem de grandeza do submicron (figura 2).

As escalas de tamanho exigida em dispositivos moderno apresentam desafios para esse modelo de filmes finos. A alternativa recente mais promissora para substituir os

Figura 2 – Esquema de funcionamento de um disco rígido típico.



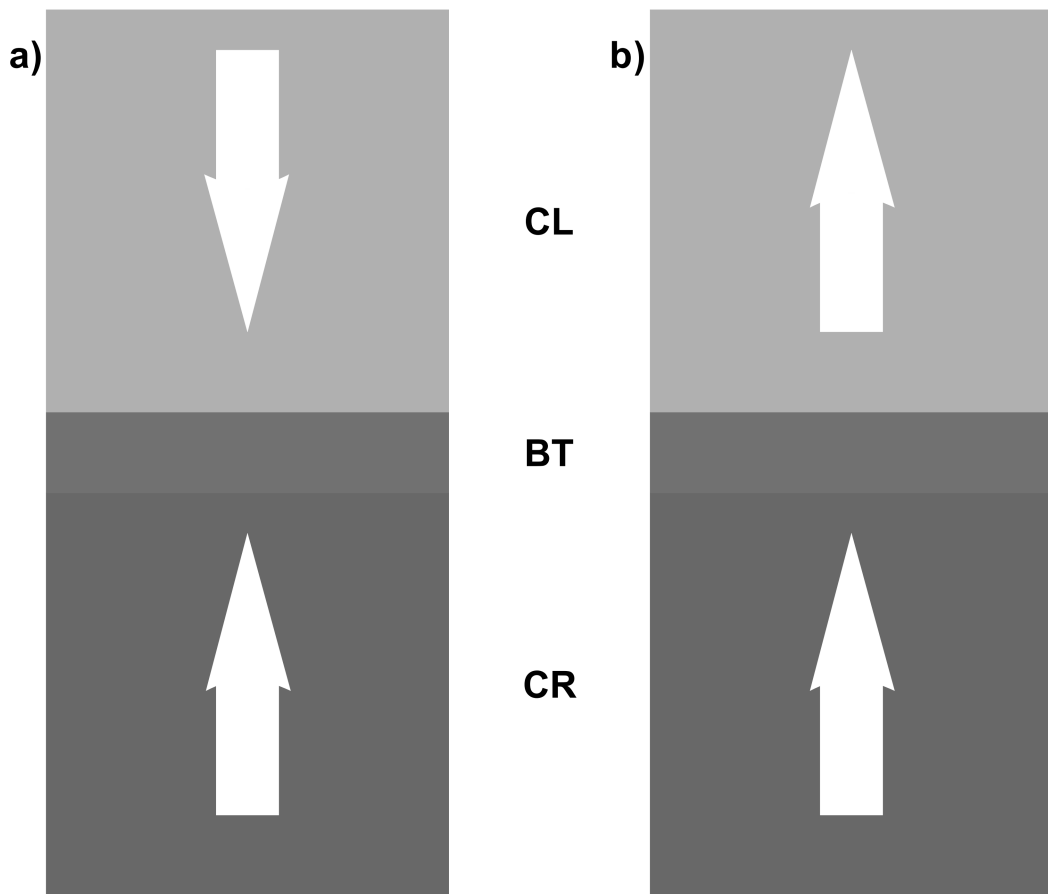
Fonte: New World Encyclopedia (2016).

Nota: Observe que, entre uma microrregião e outra onde os entes magnéticos se encontram “alinhados” precisamos inverter o Campo magnético nas bordas.

dispositivos já existentes são as chamadas *Junções de Tunelamento Magnético* (MTJ).<sup>5</sup> O funcionamento dessas memórias se baseiam em dois efeitos: um responsável pela leitura dos dados, chamado *Magnetoresistência de tunelamento*, e outro responsável pela escrita, que consiste em um torque nos entes magnéticos que pode ser induzido por densidades de correntes ou Campos externos. Uma MTJ é composta primariamente por duas camadas finas adjacentes de materiais, sendo que um tem suas direções de spin sempre fixas, chamada de *camada de referência*, e outra camada denominada *camada livre*, que pode ser alterada por perturbações externas. Ambas as camadas são separadas por algum material isolante chamado de *barreira de tunelamento* (ver fig. 3). Quando as camadas livre e de referência possuem alinhamentos de spins opostos entre si, a resistência elétrica é significativamente maior para todo o sistema, possibilitando a medida de *bits* de informação binários baseados no alinhamento ou não das camadas magnéticas, sendo esse o efeito de magnetoresistência de tunelamento. O torque que altera o estado de bit da MTJ, promovendo alinhamento ou oposição da camada livre com a referência, pode ser de vários tipos a depender da perturbação envolvida. Por exemplo, pode ser um torque de campo magnético caso usemos um campo externo, um torque de spin-transferência caso se use uma densidade de corrente elétrica, ou ainda um torque de spin-órbita caso seja usada uma densidade de corrente de spins.<sup>6</sup>

Podemos detectar as propriedades fundamentais da camada livre via Microscopia de Lorentz, baseada na travessia de um feixe de elétrons em um microscópio através de um material, e estes interagem com os entes magnéticos ao incidirem sobre ele, causando uma deflexão do feixe devido ao mecanismo da força de Lorentz.<sup>7</sup> Podemos detectar informações também via Microscopia de Força Magnética (MFM),<sup>8</sup> utilizando uma agulha magnetizada

Figura 3 – Esquema de funcionamento de uma MTJ com suas respectivas camadas livre (CL), de referência (CR) e barreira de tunelamento (BT).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: O material isolante age como BT para o efeito de magnetoresistência do conjunto. **a)** No estado desalinhado, a resistência elétrica do conjunto é altamente elevada, representando a medida de um *bit* de valor 0. **b)** Já no estado alinhado, a resistência elétrica se reduz bruscamente, correspondendo a uma medida de *bit* com valor 1.

para varrer a amostra e medir a atração e repulsão em regiões localizadas, traçando um “Relevo magnético” do material em questão.

Com a necessidade de miniaturização de MTJs, recentemente foi proposta a utilização de defeitos topológicos como skyrmions<sup>9</sup> para atuar como elementos da camada livre. Skyrmions e outras quasipartículas como vórtices magnéticos possuem uma estabilidade interessante e uma escala de tamanhos reduzida (de menos de 10 nm) que os tornam interessantes para esse propósito. Sua realização experimental porém ainda depende da superação de diversos desafios teóricos sobre a sua dinâmica e seus graus de liberdade internos.<sup>10</sup>

Tanto no caso de fitas alinhadas linearmente (figura 2), quanto no caso de vórtices

ou skyrmions, buscamos conhecer e aprimorar mecanismos de “switching” ou seja, de inversão do alinhamento dos entes magnéticos do material, via alguma perturbação externa. Essa inversão depende intrinsecamente da geometria do material, de suas propriedades microscópicas, e da maneira como introduzimos o agente externo. Portanto, depende de uma compreensão completa sobre o estado magnético do material, em todos os instantes de tempo.

Nessa tese, buscamos aprimorar o estudo desses estados magnéticos via técnicas de simulação computacional. A simulação tem se mostrado uma ferramenta valiosa e, em alguns casos, indispensável no auxílio da interpretação de dados experimentais e na consolidação, e proposição, de mecanismos que não seriam trivialmente realizados somente em um laboratório ou somente se debruçando sobre um modelo teórico.<sup>11,12</sup>

O objetivo principal desse trabalho é definir e explorar uma abordagem original, que apresente eficiência maior no cálculo com o mínimo de aproximações. Além disso, buscaremos aplicar nossa metodologia tanto em termos de validação quanto de geração de novos conhecimentos sobre materiais magnéticos em escala reduzida.

A organização da tese é feita da seguinte forma:

Nos capítulos 2 e 3, introduzimos todos os mecanismos matemáticos necessários para a compreensão do estado de Magnetização de um material, descrevendo o modelo quântico, e realizando aproximações sucessivas no intuito de obter parâmetros comparáveis a experimentos de maneira mais viável.

No capítulo 4 descrevemos nosso modelo computacional, construído completamente desde os princípios básicos. Mostramos técnicas de programação em paralelo, elucidando as razões de nossa escolha por um software proprietário, e não um pacote aberto como os que são disponibilizados para uso geral.

Finalmente, no capítulo 5 apresentamos os resultados de nossos esforços em programação, comparando com resultados teóricos e experimentais. Demonstramos que alcançamos um nível de eficiência altíssimo no estudo computacional de materiais magnéticos, pois o fizemos a partir de um modelo com o mínimo de aproximações da teoria, em particular envolvendo interações de longo alcance. Também introduzimos a proposta de um novo método de integração numérica, mais compatível do que os usados atualmente com os espaços de configuração de entes magnéticos em materiais nas escalas que estudamos, mostrando suas vantagens e sua correspondência com relação aos modelos existentes.

Nos capítulos 6,7 e 8 apresentamos aplicações e discussões sobre a metodologia original desenvolvida, com trabalhos que foram publicados em revistas internacionais e também com perspectivas futuras sobre potenciais usos da nossa ferramenta, além do

domínio de aplicação de pacotes já existentes na literatura.

**Observação:** No decorrer do trabalho que segue, usaremos a palavra “Campo” com letra maiúscula para discernir claramente que estamos tratando de Campos vetoriais bem definidos em uma estrutura algébrica de grupo, como por vezes é feito em alguns textos em Física e Matemática,<sup>13,14</sup> para não haver ambiguidades com o significado usual de “campo” (por exemplo, como uma região no espaço). Da mesma forma, iremos definir Campos específicos com letra maiúscula, por convenção, a menos quando mencionados explicitamente em sua definição com letra minúscula.



## Parte I

### Teoria e Implementações

## 2 Ferromagnetismo em Sólidos

*"Statistical laws are not necessarily used as a result of our ignorance. Statistical laws can reflect how things really are. There are matters that can only be treated statistically."*

James Clerk Maxwell

### 2.1 Campos e momentos magnéticos na matéria

A origem microscópica dos fenômenos magnéticos em um material reside na existência de momentos angulares localizados, intrínsecos ou induzidos no interior do mesmo, que interagem com Campos externos no sentido de reduzir ou aumentar o *Campo resultante* na região do material, via algum fenômeno de ordenamento. Tanto na Eletrodinâmica Clássica de Maxwell como na Mecânica Quântica, associamos esses momentos aos elétrons presentes na região da amostra de material. Denominamos coletivamente a porção de todos os momentos angulares que reagem à ação de um Campo magnético externo num material como *momento magnético*. Nosso modelo portanto, irá partir da interação entre momentos magnéticos induzidos e intrínsecos em elétrons, e Campos magnéticos externos (ou eventualmente, correntes elétricas). Mais precisamente, buscaremos definir e entender o *Campo molecular* gerado por esses momentos, e sua interação com os demais Campos atuando nos elétrons da amostra.<sup>15</sup>

Quando um Campo magnético externo  $\mathbf{B}$  é aplicado a um material qualquer, geralmente um dentre dois fenômenos de ordenamento ocorrem:

- No primeiro, os elétrons constituintes do material geram uma corrente elétrica em suas órbitas atômicas no sentido de induzir dipolos magnéticos, estes orientados de forma a produzirem um Campo magnético  $\mathbf{B}_{mat}$ . Esse Campo aponta em uma direção tal que, a intensidade do Campo total  $\mathbf{B}_{total}$ , que é a superposição do Campo externo e  $\mathbf{B}_{mat}$  no interior do material, é minimizada. A esse fenômeno damos o nome de *diamagnetismo*. Todos os materiais na natureza apresentam diamagnetismo através desse mecanismo dipolar, inclusive aqueles que costumamos considerar "não-magnéticos", por responderem de forma irrisória a Campos magnéticos externos,

como os que constituem frutas e animais. Porém, não nos utilizaremos do termo "não-magnético", pois efeitos como levitação e manipulação de objetos diamagnéticos são possíveis sob condições especiais (ainda que não sejam muito práticos).<sup>16</sup> Repare que aqui apenas momentos de dipolo *induzidos* ou *extrínsecos* contribuem para a geração do Campo  $\mathbf{B}_{mat}$ , e repare também que os momentos de dipolo podem ser induzidos pela interação tanto com o núcleo atômico quanto com  $\mathbf{B}$ .

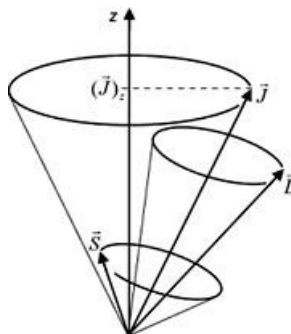
- A outra possibilidade, é que na aplicação de um Campo externo  $\mathbf{B}$ , o material apresente um Campo  $\mathbf{B}_{mat}$  não somente devido aos dipolos induzidos pelo movimento eletrônico, mas também uma contribuição devido a momentos magnéticos *intrínsecos* aos elétrons. Esses momentos intrínsecos se comportam de forma a se alinharem com o Campo magnético externo (o que minimiza a energia de interação entre ambos), portanto *umentando* o valor do Campo resultante no interior da amostra. Esse fenômeno é denominado *paramagnetismo*, caso o Campo externo e os momentos se relacionem de forma linear, ou *Ferromagnetismo*, além de outras possibilidades, quando mesmo na ausência de um Campo externo ainda é possível se observar um Campo apreciável  $\mathbf{B}_{mat}$ . Iremos descrever brevemente o mecanismo de funcionamento comum a ambos, para justificar e motivar a construção fenomenológica que iremos utilizar mais adiante.

Considere uma região  $\Omega$  do  $\mathbb{R}^3$  que contém um certo material. Mencionamos nos últimos itens que os elétrons possuem dois valores de momento angular que interagem com campos magnéticos externos: o momento angular *orbital* ou induzido, ou momento magnético de dipolo, e um momento angular intrínseco, que também é chamado de *spin*. O spin aparece naturalmente apenas no contexto da Mecânica Quântica Relativística, mas seu tratamento via Mecânica Quântica e Eletrodinâmica Clássica é possível uma vez constatada sua existência empiricamente.<sup>13,17</sup>

O momento angular total de um elétron em  $\Omega$  então leva em conta as contribuições orbital e de spin. Vamos definir  $\mathbf{L}$  como sendo o operador quântico correspondente ao momento angular orbital,  $\mathbf{S}$  como sendo o operador de spin, e  $\mathbf{J}$  o operador momento angular total eletrônico (figura 4). Iremos considerar  $\boldsymbol{\mu}$  como sendo o momento magnético localizado em um sítio atômico do material. Na prática, o momento magnético se relaciona com o momento angular através de uma relação linear que indica o grau de reação à Campos magnéticos externos, na forma de um efeito chamado *precessão giromagnética*. Essa consideração desconta os efeitos do momento angular intrínseco do núcleo atômico (ou do íon localizado no sítio num tratamento de Estado Sólido), o que corresponderia a chamada estrutura *hiperfina* do átomo. A justificativa disso se encontra na ordem de grandeza do momento magnético associado ao spin  $\mathbf{I}$  de um núcleo atômico: este é em

média 2000 vezes menor do que o acoplamento entre  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$  para um átomo de hidrogênio, e núcleos mais pesados, a menos de condições experimentais muito particulares, enfraquecem mais ainda o efeito.<sup>18,19</sup>

Figura 4 – Acoplamento entre  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{L}$ , e  $\mathbf{S}$ .



Fonte: University of Heidelberg (2016).

Assim sendo, podemos relacionar o momento magnético atômico  $\boldsymbol{\mu}$  ao momento angular total  $\mathbf{J}$  da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\mu} = (\mu_x, \mu_y, \mu_z) = \frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} = \gamma \mathbf{J} \quad (2.1)$$

Na expressão 2.1,  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida,  $\gamma$  é a razão do momento magnético eletrônico e seu momento angular, ou *razão giromagnética*,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} [A.m^2 = J.T^{-1}]$  é uma constante fundamental do elétron denominada *magnéton de Bohr* (que usaremos como unidade de momentos magnéticos), e  $g$  é o fator de Landé, que relaciona  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$ , de acordo com o teorema de Wigner-Eckart:<sup>20</sup>

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.2)$$

Os números quânticos  $J$ ,  $L$  e  $S$  podem ser obtidos no espectro de autovalores da equação de onda eletrônica, ou prontamente a partir das regras de Hund.<sup>21</sup> Tanto  $\mathbf{J}$  quanto  $\boldsymbol{\mu}$  são operadores vetoriais, possuindo 3 componentes.

Agora fica um pouco mais clara a relação de todos os momentos angulares  $\mathbf{J}_i \in \Omega$  nos sítios atômicos de um material, com as suas propriedades magnéticas: Quando temos que  $\mathbf{J}_{total} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{J}_2 \otimes \mathbf{J}_3 \otimes \dots = \mathbf{0}$ , ou seja, o momento angular total eletrônico em  $\Omega$  é o operador nulo, então o material é *diamagnético*, pois nesse caso, os únicos momentos magnéticos possíveis seriam dipolos induzidos por algum Campo magnético externo. Exemplos de elementos diamagnéticos são Cu, Ag, e Au, em que  $\mathbf{J}_{total}$  é nulo devido ao emparelhamento de spins opostos nos orbitais atômicos. Outros elementos, porém, possuem

camadas eletrônicas desemparelhadas, portanto momento angular resultante diferente de zero; estes elementos podem ser *paramagnéticos* (e.g Al, Pt, O) ou *ferromagnéticos* (e.g Fe, Ni, Co)<sup>1</sup>, como veremos a seguir. Note que a presença de camadas eletrônicas incompletas é *necessária* para que um material possa interagir com um Campo externo via seus momentos magnéticos intrínsecos em condições próximas ao equilíbrio, mas certamente não é *suficiente*. Uma liga metálica ou outro material composto pode não apresentar comportamento paramagnético ou ferromagnético ainda que seus constituintes possuam elétrons desemparelhados.

Para tratarmos do acoplamento entre o momento magnético atômico  $\boldsymbol{\mu}$  em 2.1 e um Campo externo  $\mathbf{B}$ , precisaríamos conhecer o operador Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  correspondente à medição de energia do sítio com esse momento magnético, e assim sua evolução temporal seria dada pela equação de Heisenberg da Mecânica Quântica:<sup>14</sup>

$$i\hbar \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = [\boldsymbol{\mu}, \mathbf{H}] \quad (2.3)$$

Em que  $i$  é a unidade do conjunto complexo  $\mathbb{C}$  e  $[\boldsymbol{\mu}, \mathbf{H}]$  é o comutador entre o operador vetorial momento magnético (que possui 3 componentes referentes as direções x,y,z no espaço) e o operador Hamiltoniano. Para toda a região  $\Omega$ , seria necessário solucionar  $N$  equações do tipo 2.3 para  $N$  sítios atômicos.

Um tratamento quântico porém, se torna proibitivamente complexo para a maioria dos sistemas. De um lado, não podemos medir simultaneamente todas as três componentes do operador momento magnético  $\boldsymbol{\mu}$  para cada sítio em  $\Omega$ , uma vez que elas possuem uma regra de comutação da forma:

$$[\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\mu}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \boldsymbol{\mu}_k \quad (2.4)$$

Onde  $\epsilon_{ijk}$  é o tensor totalmente antissimétrico de Levi-Civita. O princípio de incerteza de Heisenberg prevê portanto que essas componentes não podem ser medidas simultaneamente.<sup>18</sup>

Por outro lado, a equação 2.3 possui um Hamiltoniano que, pela nossa construção (onde só há interações dipolo-Campo e spin-Campo), não leva em consideração efeitos de transferências de momento - via espalhamento - entre os elétrons e a rede atômica na região  $\Omega$  (devido a eventuais quebras de simetria translacional na estrutura do material),<sup>22</sup> e nem transferências devido ao acoplamento Spin-Órbita entre  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$ , ou seja, uma energia proporcional a  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  (que causa um espalhamento diretamente nos spins, transferindo

<sup>1</sup> Algumas ligas de materiais também podem possuir outras formas de ordenamento, como antiferromagnetismo, mas aqui iremos focar no caso ferromagnético.

energia e momento para a rede em volta do sítio atômico).<sup>23,24</sup> Esses efeitos de transferência geram um *amortecimento* na precessão giromagnética entre  $\boldsymbol{\mu}$  e o Campo resultante no sítio atômico. Mesmo introduzindo o efeito Spin-Órbita no nosso formalismo, este só irá resultar em estados eletrônicos de espalhamento dentro da Mecânica Quântica Relativística, e a determinação precisa do relaxamento é um problema em aberto discutido amplamente na literatura recente.<sup>25-27</sup> De toda maneira, experimentos baseados em *Ressonância Ferromagnética* (FMR) e no chamado *Efeito Kerr Magneto-Ótico* (MOKE)<sup>2</sup> evidenciam a relevância desse efeito (i.e não podemos ignorá-lo), e sua ligação com o efeito Spin-Órbita, como nas referências.<sup>28-32</sup> Podemos nos usar dessas e demais referências experimentais para então construir e firmar um modelo *fenomenológico* que descreva suficientemente bem o mecanismo de amortecimento e ainda seja tratável para aplicações diretas, similar ao estudo de metais e semicondutores via formalismo de *Tight-Binding*, bastando delimitarmos claramente a região de validade de nossas aproximações.

A outra dificuldade em uma equação como a 2.3 é puramente computacional, pois existe mesmo caso se busque simular numericamente o mecanismo de dispositivos entre escalas nanoscópicas e mesoscópicas (tamanhos característicos entre  $10^{-9}m$  e  $10^{-6}m$ ). Uma estimativa razoável no número de momentos magnéticos em uma amostra cúbica de lado  $2\mu m$  do ferromagnético *Permalloy-79* ou Py-79 ( $Fe_{21}Ni_{79}$ ) fornece um número total de spins  $N_{spins} = 50 \cdot 10^6$ .<sup>33</sup> Tendo em vista que as equações de Heisenberg encontradas envolvem operadores quânticos complexos com interações de longo alcance, esse é um número de equações acopladas muito grande para ser tratado de maneira prática, nos limitando tanto a nível de *software* como de *hardware*. Além disso, equações em operadores vetoriais da forma 2.1, que possuem um espectro discreto de autovalores, possuem propriedades numéricas completamente diferentes de Campos vetoriais discretizados, e os métodos usuais de integração numérica, como os usados em dinâmica molecular, possuem aplicação limitada nesses casos, somando mais um fator à complexidade inerente do modelo.<sup>34</sup>

Dadas as dificuldades acima, iremos de agora em diante aproximar nossos momentos magnéticos pelo *limite clássico*: se  $\Omega \in \mathbb{R}^3$  possui em seu volume  $V$  um número suficientemente grande de possíveis estados discretos  $\mathbf{J}_{total} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{J}_2 \otimes \mathbf{J}_3 \otimes \dots$ , esperamos que a densidade de autovalores seja muito maior que o intervalo absoluto entre eles, ou

<sup>2</sup> O FMR se baseia na medição do espectro de Campos resultantes nos sítios atômicos via a aplicação de um Campo externo de alta frequência de oscilação. Já o MOKE se baseia no fato que superfícies de materiais magnéticos possuem componentes não nulos fora da diagonal em seu tensor dielétrico, mudando sua permissividade em direções diferentes, introduzindo assim uma diferença de fase na luz polarizada que incide no material. Mais detalhes nas referências.

seja:

$$\Delta J_{total} = |J_{total}^i - J_{total}^j| \ll \frac{\sum_k J_{total}^k}{V}, \forall J_{total} \in \sigma(\Omega) \quad (2.5)$$

( $\sigma(\Omega)$  é o espectro de todos os autovalores de  $J_{total}$ ). Nessa aproximação, os operadores de momento podem ser bem aproximados por vetores no espaço com 3 componentes bem definidas, pois através de toda a região  $\Omega$  e em qualquer intervalo de tempo, encontramos um quasi-contínuo de estados de momento angular. Assim podemos especificar uma condição inicial para o sistema, e em 2.3 o operador  $\boldsymbol{\mu}$  passa a ser um vetor  $\tilde{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{r}, t)$  para uma dada posição  $\mathbf{r}$  e instante  $t$ . O operador Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  passa a ser a função Hamiltoniana  $H(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$  usual da Mecânica Analítica, representando a energia das interações envolvidas no sistema. Note que antes  $\mathbf{J}_{total}$  era o produto tensorial dos operadores  $\mathbf{J}_i$  correspondentes a cada sítio atômico, cada um elemento de um espaço de Hilbert, ao passo que no limite clássico  $\mathbf{J}_{total}$  segue o princípio da superposição no  $\mathbb{R}^3$ , sendo a soma vetorial da contribuição de cada sítio atômico. Esse é o chamado *modelo clássico de Heisenberg*, que descreve o comportamento de um material de maneira atômica tratando os momentos angulares internos do ponto de vista do formalismo de Hamilton clássico.

Apesar do tratamento atômico possibilitar a abordagem de sistemas mais complexos, continuamos com um número muito grande de momentos magnéticos individuais a serem considerados (que possuem interações de longo alcance entre si), e podemos introduzir uma teoria ainda mais eficiente para o nosso caso particular do ferromagnetismo, como veremos a seguir.

## 2.2 Magnetização e Campos clássicos

Na Eletrodinâmica Clássica de Maxwell, a grandeza pertinente em fenômenos magnéticos é a *magnetização*. A magnetização clássica é definida como densidade dos momentos magnéticos em uma região  $\Lambda \in \mathbb{R}^3$  similar ao material  $\Omega$  definido acima; porém, iremos ser cuidadosos em diferenciar uma densidade de momentos magnéticos *infinitesimais* como a da Eletrodinâmica Clássica, e a densidade de momentos magnéticos finita (ver 2.5) que utilizamos na última seção para aplicar o limite clássico: a primeira nos fornece apenas uma descrição qualitativa dos momentos magnéticos na região de interesse, e não uma aproximação adequada a fenômenos gerais como o modelo de Heisenberg, pois não podemos observar detalhadamente o comportamento dos momentos angulares localizados. Essa descrição qualitativa, porém, é um bom ponto de partida para entender as interações ferromagnéticas mais adiante.

Vamos então definir a magnetização da seguinte forma: seja  $\Lambda \in \mathbb{R}^3$  uma região do espaço que possui um volume de material  $V$  preenchendo seu interior; seja  $dV$  um elemento infinitesimal de  $\Lambda$  que possua um valor infinitesimal de momento magnético  $d\mathbf{m}$ . Definimos então a magnetização do material como

$$\mathbf{M} = \frac{dm}{dV} \hat{\mathbf{m}} = \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

Em que  $\hat{\mathbf{m}}$  é o vetor unitário na direção de  $d\mathbf{m}$ .  $\mathbf{M}$  definido assim é um Campo vetorial contínuo no espaço, que se relaciona com o Campo magnético resultante em  $(\mathbf{r}, t)$  de acordo com:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad (2.7)$$

Em que  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} [N/A^2]$  é a permeabilidade do vácuo,  $\mathbf{B}$  é o Campo magnético resultante no ponto  $(\mathbf{r}, t)$  e  $\mathbf{H}$  é o chamado *Campo auxiliar*, definido via a própria expressão 2.7 e pelas equações de Maxwell. Na literatura sobre magnetismo é usual chamarmos  $\mathbf{B}$  de *Indução Magnética* e  $\mathbf{H}$  de *Campo magnético*, pois a aplicação de  $\mathbf{B}$  é que induz a formação dos dipolos em  $\Lambda$ , e o que buscamos medir é a relação entre este e a magnetização, ou seja, o próprio Campo auxiliar  $\mathbf{H}$ . Iremos usar essa nomenclatura ocasionalmente, tendo em mente que as grandezas "reais" cujo efeito medimos experimentalmente são os Campos  $\mathbf{M}$  e  $\mathbf{B}$ .

Para materiais diamagnéticos ou paramagnéticos, podemos definir uma relação *linear* entre  $\mathbf{M}$  e o Campo auxiliar  $\mathbf{H}$ , na forma:

$$\mathbf{M} = \overleftrightarrow{\chi}_m \mathbf{H} \quad (2.8)$$

Onde  $\overleftrightarrow{\chi}_m$  é um tensor denominado *susceptibilidade magnética*, que representa a resposta linear da magnetização frente a um Campo  $\mathbf{H}$  em  $\Lambda$ . Caso a resposta seja isotrópica (idêntica em todas as direções) o tensor é diagonal e  $\chi_m$  representa a constante susceptibilidade magnética do material.

Ao substituirmos 2.8 em 2.7, obtemos

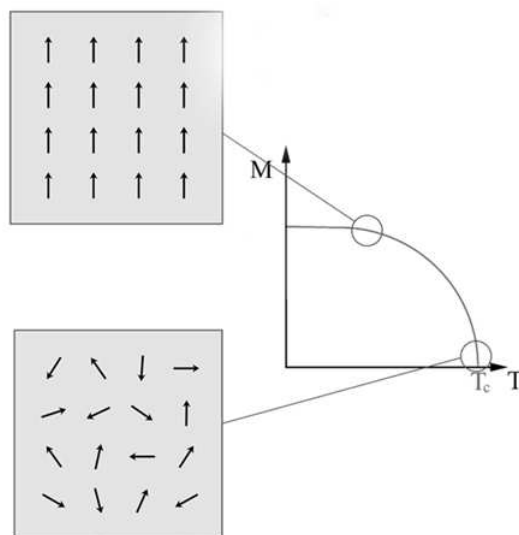
$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbb{I} + \overleftrightarrow{\chi}_m) \vec{H} = \overleftrightarrow{\mu} \mathbf{H} \quad (2.9)$$

Em que  $\mathbb{I}$  é o tensor identidade, e  $\mu_0 (\mathbb{I} + \overleftrightarrow{\chi}_m) = \overleftrightarrow{\mu}$  é a permeabilidade magnética da região  $\Lambda$ . As relações 2.8 e 2.9 deixam claro que o Campo magnético  $\mathbf{B}$  das eqs. de Maxwell em um material é afetado pela presença da magnetização, e vice-versa.



Esperamos que o alinhamento empiricamente observado dos momentos magnéticos de um material (intrínsecos ou induzidos) com um Campo externo só ocorra no caso de uma temperatura  $T = 0$ . Tanto na estatística clássica de Boltzmann quanto num formalismo quântico, a presença de uma temperatura não nula introduz flutuações aleatórias (figura 5) entre os possíveis estados de equilíbrio do sistema, e essas flutuações devem ser expressas de alguma forma na susceptibilidade e na permeabilidade magnética presente em  $\Lambda$ . Vamos estudar qualitativamente esse efeito, partindo de um único momento magnético isolado, estendendo o modelo ao caso de  $N$  momentos (essa aproximação não leva em conta eventuais correlações entre os momentos).

Figura 5 – Comportamento típico de um material em regime paramagnético com a temperatura.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A energia de interação entre um momento magnético  $\mathbf{m}$  isolado no espaço e uma Indução magnética  $\mathbf{B}$  tem a forma:<sup>35</sup>

$$\mathcal{U} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = -\|\mathbf{m}\| \|\mathbf{B}\| \cos(\theta) = -\mu_0 \|\mathbf{m}\| \|\mathbf{H}\| \cos(\theta) \quad (2.10)$$

Em que  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$  em todo o espaço ao redor do momento de dipolo isolado (expressão 2.9 no vácuo). Classicamente, a probabilidade de encontrar esse momento isolado num estado com energia  $E$  é dada por:

$$P(E) = A e^{-\beta E} = A e^{\beta \mu_0 m H \cos(\theta)} \quad (2.11)$$

Na equação 2.11,  $\|\mathbf{m}\| = m$ ,  $\|\mathbf{H}\| = H$ ,  $A \in \mathbb{R}$  e  $\beta = 1/k_b T$  é o fator de Boltzmann.

Vamos calcular o valor esperado do momento  $m$  na direção do Campo magnético, ou seja,  $\langle m \cos(\theta) \rangle$ . Usando coordenadas esféricas para representar o valor esperado, obtemos:

$$\begin{aligned} \langle m \cos(\theta) \rangle &= \frac{\int m \cos(\theta) e^{-\beta E} \sin(\theta) d\theta d\phi}{\int e^{-\beta E} \sin(\theta) d\theta d\phi} \\ &= m \left[ \operatorname{cotgh}(\beta \mu_0 m H) - \frac{1}{\beta \mu_0 m H} \right] \\ &= m \left[ \operatorname{cotgh} \left( \frac{\mu_0 m H}{k_b T} \right) - \frac{k_b T}{\mu_0 m H} \right] \end{aligned} \quad (2.12)$$

Essa é a chamada *fórmula de Langevin*.<sup>36</sup> Para o caso de  $N$  dipolos magnéticos, temos uma magnetização **média** dada simplesmente por:

$$\|\mathbf{M}\| = M = N \langle m \cos(\theta) \rangle = Nm \left[ \operatorname{cotgh} \left( \frac{\mu_0 m H}{k_b T} \right) - \frac{k_b T}{\mu_0 m H} \right] \quad (2.13)$$

Seja  $\xi = \frac{\mu_0 m H}{k_b T}$ . Para os casos em que a temperatura é muito baixa ( $T \sim 0$ ) ou o Campo aplicado é muito elevado ( $H \gg 1$ ), o valor da função de Langevin tende a 1, pois  $\xi \gg 1$  e podemos aplicar o limite para valores altos do argumento em 2.13. Nesse caso constatamos que a magnetização atinge uma *saturação*, ou seja, tende a possuir um valor absoluto constante, equivalente ao alinhamento total dos dipolos:

$$M \approx Nm \quad (2.14)$$

Para temperaturas apreciáveis e Campos pequenos, porém, temos  $\xi \ll 1$  e devemos aproximar a função de Langevin expandindo-a em torno do ponto  $\xi_0 = 0$  com a série de Taylor:

$$\begin{aligned} \operatorname{cotgh}(\xi) &= \frac{1}{\xi} + \frac{\xi}{3} + \dots \\ \implies M &\approx Nm \left( \frac{1}{\xi} + \frac{\xi}{3} - \frac{1}{\xi} \right) \\ \implies M &\approx \frac{N \xi m}{3} \\ \implies M &\approx \frac{N \mu_0 m^2}{3 k_b T} H \end{aligned} \quad (2.15)$$

Retornando a expressão 2.8, temos que:

$$\chi_m = \frac{N \mu_0 m^2}{k_b T} = \frac{C}{T} \quad (2.16)$$

Em que  $C = \frac{N\mu_0 m^2}{k_b}$  é a constante de Curie para o sistema. A expressão 2.16 é conhecida como *Lei de Curie* e demonstra a relação entre a susceptibilidade magnética de um material paramagnético e sua temperatura. Uma derivação utilizando a quantização do momento angular iria fornecer uma lei na mesma forma funcional ( $C/T$ , com uma outra constante  $C$ ) quando a temperatura não é muito baixa (pois isso iria saturar a magnetização em um único valor).

A Lei de Curie é um resultado importante pois apresenta um comportamento **empiricamente** universal entre paramagnetos e ferromagnetos. Mesmo quando a susceptibilidade não se comporta de maneira linear (como é o caso de materiais ferromagnéticos), os efeitos térmicos tendem, a partir de uma certa temperatura, a desordenar o alinhamento dos momentos completamente, para um valor fixo de Indução magnética aplicada ao sistema. Ou seja, a partir de uma certa temperatura  $T_c$  denominada *temperatura de Curie*, a maior parte dos sistemas magnéticos apresenta um comportamento diamagnético<sup>3</sup>. Essa não é uma regra geral, mas sim uma verificação experimental para grande parte dos sistemas de interesse em aplicações.<sup>37</sup>

Observe que, em nosso modelo de paramagnetismo,  $\chi_m$  é uma grandeza estritamente *positiva* e, ao lembrarmos 2.16 e 2.1, muito pequeno. Vemos que  $\chi_m \ll 1$  em geral, pois os momentos magnéticos atômicos são proporcionais a  $\mu_B$  e a susceptibilidade proporcional ao quadrado dos momentos (a derivação quântica da Lei de Curie, como pode ser mostrado, mantém esse comportamento). Um desenvolvimento similar para o caso de um dipolo induzido pela corrente  $I$  de um elétron em torno do núcleo forneceria um valor pequeno e estritamente *negativo* para um material diamagnético, como esperávamos encontrar a partir das constatações experimentais. Assim, tanto em materiais paramagnéticos como diamagnéticos, concluímos que a resposta a um Campo externo é "fraca", no sentido de gerar uma magnetização muito pequena via  $\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}$ . Em ambos os casos a ausência do Campo implica na anulação da magnetização.

Materiais ferromagnéticos como os descritos na introdução, porém, funcionam de forma profundamente diferente. Em primeiro lugar, sua susceptibilidade magnética é uma função *não linear* do Campo aplicado e da temperatura, de maneira que a resposta da magnetização ferromagnética não corresponde a uma relação trivial. Além disso, um material ferromagnético apresenta magnetização resultante mesmo quando nenhum Campo é aplicado (contanto que abaixo da temperatura  $T_c$ , como exposto acima). Para descrever o ferromagnetismo iremos efetivamente unir as abordagens clássica e quântica, integrando os fenômenos microscópicos de maneira conveniente em uma teoria de Campos definida a seguir.

<sup>3</sup> No caso dos ferromagnetos, estes tem sua magnetização anulada e passam a se comportar como paramagnéticos para uma temperatura  $T > T_c$ .

## 2.3 Micromagnetismo e interações magnéticas

A característica distinta de materiais ferromagnéticos como o cobalto, é a possibilidade apresentar magnetização  $\mathbf{M}$  apreciável mesmo na ausência de uma indução, ou seja, de forma intrínseca. Além disso, esses materiais apresentam uma resposta não linear e, em geral, mais intensa no sentido de se alinharem à Campos externos. Na prática, isso significa que os momentos magnéticos do material se encontram pelo menos aproximadamente alinhados numa direção, em um estado de saturação como na eq. 2.14.

A natureza das interações presentes em um material ferromagnético começou a ser mostrada independentemente por Heisenberg e Dirac entre 1926 e 1928.<sup>38</sup> Estes demonstraram que, na Mecânica Quântica, a introdução de uma *simetria de troca* entre partículas introduz um termo de curto alcance em suas interações eletrostáticas que não aparece num modelo clássico. Essa simetria é introduzida através do princípio da exclusão de Pauli e das propriedades das funções de onda moleculares. Fundamentalmente, a simetria de troca é uma consequência do fato que férmions e bósons são indistinguíveis entre si. Uma operação do grupo das permutações  $P_n$  que troque suas posições e spins, devido a simetria ou anti-simetria exigida pelas partículas idênticas, introduz uma interação de atração ou repulsão dependente de suas posições e momentos relativos, que aparece como um termo adicional no valor esperado da energia eletrostática. Este tipo de interação não possui nenhum análogo clássico. No caso dos férmions, a interação denominada *interação de troca*, é a responsável pelo alinhamento local dos momentos magnéticos intrínsecos, principalmente entre primeiros vizinhos atômicos. Essa interação, portanto, é o mecanismo que origina o ferromagnetismo.<sup>13</sup>

Antes de entrarmos em detalhes das interações que regem o ferromagnetismo, vamos enfatizar a validade da lei de Curie: um dos primeiros modelos para o ferromagnetismo é devido a Weiss (1907), e supõe a introdução de um Campo que ele denominou *Campo magnético molecular*  $\mathbf{H}_w$  em um sistema, não originado nas equações clássicas de Maxwell. Definindo esse Campo como  $\mathbf{H}_w = N_w \mathbf{M}$ , onde  $N_w$  é uma constante dependente do material, e adicionando o termo à expressão 2.15, obtemos:

$$M = m \left[ \operatorname{cotgh} \left( \frac{\mu_0 m (H + N_w M)}{k_b T} \right) - \frac{k_b T}{\mu_0 m (H + N_w m)} \right] \quad (2.17)$$

Essa é uma equação transcendental para  $M$  em baixas temperaturas e Campos pequenos. Porém, no limite de altas temperaturas a expressão 2.17 pode ser linearizada. Nesse limite então encontramos a chamada *Lei de Curie-Weiss* que expressa a dependência da temperatura com a susceptibilidade magnética:<sup>39</sup>

$$\chi_m \propto \frac{1}{T - T_c} \quad , \quad T_c = \frac{\mu_0 N m^2 N_w}{3k_b} \quad (2.18)$$

Essa expressão fornece a proporcionalidade entre a temperatura e a susceptibilidade magnética muito acima da temperatura  $T_c$ . Observe que, a menos das constantes, a principal diferença do modelo original (2.16) é a presença da temperatura de Curie no denominador. No limite  $T \rightarrow T_c$  o valor de  $\chi_m$  diverge, correspondendo a mudança do regime paramagnético para o ferromagnético no material. A Lei de Curie-Weiss reproduz qualitativamente um grande número de resultados experimentais,<sup>39</sup> e corresponde ao limite de altas temperaturas do modelo proposto por Heisenberg anos depois. De fato, o Campo molecular  $\mathbf{H}_w$  suposto por Weiss pode ser obtido ao considerar apenas a média das interações entre os momentos magnéticos, desprezando as correlações entre estes<sup>4</sup>. Essas correlações não influenciam muito no comportamento do sistema para valores de  $T$  distantes da região de mudança de fase  $T_c$ , porém são muito intensas e dão origem a *fenômenos críticos* para valores nessa região, e a aproximação de Weiss falha completamente, exigindo um modelo mais refinado.<sup>40</sup> De toda forma, a aproximação de Weiss é uma boa representação qualitativa de muitos fenômenos envolvendo o ferromagnetismo.

Até o momento definimos um modelo quântico que descreve detalhadamente o magnetismo de um meio material através da interação entre Campos e momentos angulares, e também uma teoria de Campos clássicos que cumpre o mesmo propósito através da magnetização e das eqs. de Maxwell. No primeiro caso precisamos da descrição detalhada para sistemas com dimensões nanoscópicas, pois nessa escala efeitos como a simetria de troca dominam sob as demais (como a indução de dipolos por exemplo). Para sistemas muito grandes, porém, a teoria clássica com um Campo contínuo de densidade de momentos magnéticos prevê fenômenos de uma maneira satisfatória e com muito mais eficiência. A maior dificuldade se encontra na escala mesoscópica, para sistemas com dezenas e centenas de microns, onde por acaso também se encontram grande parte das aplicações tecnológicas. Nesses materiais, a competição entre os efeitos de longo alcance observados macroscopicamente e aqueles que regem os comportamentos microscópicos, geram espaços de configuração altamente complexos, proibitivamente grandes para uma solução puramente quântica e suficientemente pequenos para não permitirem uma abordagem puramente clássica.

Para tratarmos de problemas de interesse nessa escala de tamanho, iremos definir e utilizar então o chamado Micromagnetismo, desenvolvido por Brown, baseado na teoria de Campos de Landau.<sup>41,42</sup> A ideia principal do modelo é integrar os fenômenos da escala

<sup>4</sup> Em Física Estatística (e nesse trabalho), definimos correlação como o primeiro momento do produto entre duas variáveis aleatórias  $X_n$  e  $X_m$ , ou seja,  $\mathcal{C} = \langle X_n X_m \rangle$ .

quântica que sejam essenciais para descrever o ferromagnetismo, como a interação de troca, através de uma descrição clássica, possibilitando também desconsiderar os detalhes de cada spin eletrônico e efeitos não-determinísticos da função de onda.

A hipótese fundamental do Micromagnetismo é a de que as interações são intensas o suficiente para causar um ordenamento paralelo de todos os momentos magnéticos até um tamanho característico  $\lambda$  muito maior do que o parâmetro de rede  $a$  de um material:

$$\boldsymbol{\mu}_i \approx \boldsymbol{\mu}_j \quad \text{para} \quad |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq \lambda \gg a \quad (2.19)$$

Em que os índices  $i, j$  representam momentos distintos e suas posições, respectivamente. Supondo que a distribuição dos momentos seja homogênea dentro do material, podemos usar a eq. 2.19 para aproximar esse ordenamento através do vetor densidade  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  definido na eq. 2.6:

$$\int_V \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \approx \sum_i \chi_V(\mathbf{r}_i) \boldsymbol{\mu}_i \quad (2.20)$$

Em que  $\chi_V$  é a função indicadora ou função característica que define a presença ou não de momentos magnéticos nas posições  $\mathbf{r}_i$ , em direções dadas por  $\boldsymbol{\mu}_i$ . Por definição, a aproximação acima é válida em volumes  $V \geq \lambda \times \lambda \times \lambda$ . A expressão 2.20 nos indica que, para uma escolha apropriada de limite inferior de volume  $\lambda^3$ , podemos tratar sistemas ferromagnéticos na escala mesoscópica como um conjunto de regiões saturadas em diferentes direções (com interfaces que variam suavemente entre si), caracterizadas por  $\chi_V$  e que são numerosas o suficiente para se comportar como uma densidade contínua  $\mathbf{M}$ , permitindo assim o tratamento diferencial dos Campos. Essas regiões características correspondem exatamente aos domínios magnéticos observados empiricamente na introdução (fig. 2), agora estabelecidos formalmente.

Devido à hipótese de uma densidade homogênea, a magnetização  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  tem um módulo idêntico em todo o volume  $V$ , podendo ser escrita como um vetor unitário  $\mathbf{m}$  na forma:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \quad , \quad \|\mathbf{m}(\mathbf{r})\| = 1 \quad \forall \mathbf{r} \quad (2.21)$$

$M_s$  é a magnetização espontânea da amostra na temperatura  $T$  e, para  $T = 0$  que é o caso mais considerado no Micromagnetismo, essa passa a ser uma constante característica do material chamada de *magnetização de saturação*. Esse nome se refere diretamente ao fato de que, no caso em que todos os domínios são paralelos entre si, a forma diferencial

$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$  apresenta alinhamento em todos os valores possíveis de  $\mathbf{r}$ , e o momento magnético resultante de toda a amostra é dado por

$$\int_V M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_V M_s \|\mathbf{m}(\mathbf{r})\| dr = M_s \int_V dr = M_s V \quad (2.22)$$

em analogia com a eq. 2.14. Iremos nos referir tanto a  $\mathbf{M}$  quanto  $\mathbf{m}$  como magnetização por simplicidade.

A partir dessa hipótese básica podemos definir uma energia livre  $\mathcal{E}(\mathbf{M}, \mathbf{r})$  para as interações no volume  $V$ , e usar métodos estáticos para encontrar estados de mínima energia, assim como métodos dinâmicos com o formalismo Lagrangiano para encontrarmos trajetórias entre diferentes configurações de equilíbrio.

Diversas extensões do modelo Micromagnético já foram desenvolvidas para se levar em consideração os efeitos relevantes para a spintrônica mencionados na introdução, como a modelagem de dinâmica estocástica com temperaturas finitas,<sup>43</sup> a presença de correntes elétricas gerando um torque de transferência de momento nos spins,<sup>6</sup> e a manipulação com Campos externos visando aplicações em memórias do tipo MRAM,<sup>44</sup> e diversos tipos de sensores.<sup>45</sup> Vamos prosseguir definindo as interações fundamentais que regem a energia de sistemas com a magnetização  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  nas seções a seguir.

### 2.3.1 Interação de Troca

Já mencionamos que a interação de troca em sólidos é o fator chave envolvido na magnetização não-nula de ferromagnetos em ausência de Campos externos. A sua origem pode ser discutida em vários níveis, e aqui iremos focar na sua forma para o caso dos momentos magnéticos eletrônicos, segundo o modelo de Heisenberg. Excelentes discussões mais gerais são encontradas na literatura.<sup>13, 14, 18, 20, 38, 40, 46</sup>

Nesse caso, a origem da interação de troca pode ser traçada na mecânica quântica, como correspondendo a um desvio do valor esperado do potencial de Coulomb em um estado de *overlap* ou sobreposição de uma função de onda de dois elétrons, sem nenhum análogo clássico. Temos que as funções de onda eletrônicas são anti-simétricas com respeito a uma troca de posições de partículas idênticas (sendo férmions). Um estado de alinhamento dos spins eletrônicos, nesse contexto, corresponde a um valor esperado menor do potencial Coulombiano, devido ao desvio na distância das funções de onda em sobreposição.

No modelo clássico de Heisenberg, para um sistema de  $N$  elétrons com spins  $\mathbf{S}_i$ , a

energia da interação de troca é dada por:

$$\mathcal{H}_{ex} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.23)$$

Na equação 2.23, a contribuição dos momentos orbitais, que também possuem momento magnético, está acoplada na chamada *integral de troca*  $J_{ij}$ . Esse valor, com unidades de energia, está relacionado ao valor esperado da Hamiltoniana em um sistema, que por sua vez depende de integrais sobre as funções de ondas eletrônicas, respeitando sua simetria de troca, e levando em consideração efeitos de overlap.

Para o hidrogênio molecular ( $H_2$ ) com uma Hamiltoniana  $\mathcal{H}$ , por exemplo, temos:<sup>13</sup>

$$J_{ij} = \int \Psi_i^*(\mathbf{r}_i) \Psi_j^*(\mathbf{r}_j) \mathcal{H}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Psi_i(\mathbf{r}_j) \Psi_j(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \quad (2.24)$$

Em que os índices  $i$  e  $j$  correspondem tanto às soluções  $\Psi_i$  e  $\Psi_j$  para os estados de singlete e triplete, quanto às posições de cada elétron participante da ligação. O cálculo de integrais de troca se torna cada vez mais complexo conforme a degenerescência dos orbitais moleculares aumenta em um sistema, se tornando um funcional de determinantes de Slater, e para a maior parte dos casos uma obtenção fenomenológica e empírica do seu valor é mais adequada.<sup>47,48</sup>

Note que no modelo de Heisenberg os orbitais eletrônicos são bem localizados no sentido de que, para a largura média da função de onda eletrônica, vale  $(\Delta r)^2 \ll L^5$ , para algum alcance característico  $L$  dos orbitais (atômicos ou moleculares). Por esse motivo, as integrais de troca  $J_{ij}$  rapidamente se anulam para distâncias afastadas da vizinhança imediata de spins próximos ( $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$ ). Isso está expresso na eq. 2.23 com o somatório em  $\langle i, j \rangle$  considerando apenas primeiros vizinhos, caracterizando a interação de troca como de curto alcance<sup>6</sup>.

Podemos estender esse termo para uma versão análoga para a densidade contínua  $\mathbf{m}$  aplicando a hipótese na eq. 2.19. Como sítios eletrônicos vizinhos variam sua direção - no máximo - de forma muito suave e com ângulos pequenos entre si, vamos assumir também que a contribuição energética infinitesimal  $\Delta E_{ex}$  entre duas fatias vizinhas de

<sup>5</sup> Tal largura média é proporcional ao segundo momento da função de onda, i.e,  $(\Delta r)^2 = \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle - \langle \mathbf{r} \rangle^2 = \int \phi^*(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - (\int \phi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r})^2$ .

<sup>6</sup> Por convenção, uma interação de longo alcance decai mais devagar que a função exponencial, i.e  $H_{longo} \propto \|\vec{r}\|^{-n} > e^{-r}$ , e uma de curto alcance decai exponencialmente, ou mais rápido, i.e  $H_{curto} \leq e^{-r}$ .



magnetização  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  e  $\mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})$  preservam a mesma forma funcional da eq. 2.23:

$$\Delta E_{ex} \propto \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

Nesses termos, a energia de troca total no modelo Micromagnético é dada primeiro somando-se todas as contribuições de fatias  $\Delta\mathbf{r}_i$  e então integrando-se a posição  $\mathbf{r}$  através do volume  $V$ . Vamos nos referir agora à eq. 2.21 onde temos  $\|\mathbf{m}(\mathbf{r})\| = 1$ , e usar a seguinte identidade vetorial:

$$(\mathbf{m}(\mathbf{r}) - \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}))^2 = 2(1 - \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})) \quad (2.26)$$

Baseados assim nas eqs. 2.26 e 2.21, podemos escrever a energia de troca total em um único sítio  $\mathbf{r}$  na forma:

$$\begin{aligned} E_{ex}(\mathbf{r}) &= - \sum_i J_i \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}_i) \\ &= - \sum_i J_i \left[ 1 - \frac{1}{2} (\mathbf{m}(\mathbf{r}) - \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}_i))^2 \right] \\ &= - \sum_i J_i \left[ 1 - \frac{1}{2} (\nabla\mathbf{m}^T \cdot \Delta\mathbf{r}_i)^2 \right] + \mathcal{O}(\Delta r_i^3) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Em que os  $J_i$  podem ser entendidos como integrais de troca efetivas entre os sítios caracterizados por  $\chi_V$  na eq. 2.20. No terceiro passo da eq. 2.27, o termo entre colchetes foi expandido em uma série de Taylor até a menor ordem não-homogênea em  $\Delta\mathbf{r}_i$ , e usamos o operador diferencial  $\nabla\mathbf{m} = \left\{ \left( \frac{\partial m_i}{\partial r_j} \right), i, j = (x, y, z) \right\}$ .

A transição final do modelo de Heisenberg para o modelo Micromagnético é dada pela integração da eq. 2.27. Para tanto, vamos considerar uma rede de spins regulares, i.e, com um espaçamento regular dos sítios  $\mathbf{r}$  que contém spins, assim como uma interação homogênea  $J_i = J \quad \forall i$  e conseqüentemente  $\Delta\mathbf{r}_i$  idênticos em todo o volume  $V$ . Vamos também desconsiderar os termos de maior ordem, apoiados na suposição de que as distâncias consideradas são apenas em vizinhanças atômicas. Chegamos assim a:

$$E_{ex} = C + \int_V \sum_{i,j,k} A_{jk} \frac{\partial m_i}{\partial r_j} \frac{\partial m_i}{\partial r_k} d\mathbf{r} \quad (2.28)$$

A matriz  $A$ , conhecida como *rigidez de troca*, indica a densidade linear da energia de troca entre sítios vizinhos ao longo da estrutura cristalina do material. O valor  $C$  aparece devido à integração do termo constante da eq. 2.27 e representa apenas uma referência de

energia que pode ser zerada. A rigidez de troca sempre pode ser diagonalizada com uma escolha adequada de sistema de coordenadas:<sup>49</sup>

$$E_{ex} = \int_V \sum_{i,j} A_j \left( \frac{\partial m_i}{\partial r'_j} \right)^2 d\mathbf{r}' \quad (2.29)$$

Por fim, vamos considerar também que o material é formado por uma rede cúbica e isotrópica, e nesse caso a rigidez de troca se reduz a um tensor diagonal  $A\mathbb{I}$ , equivalente a uma constante rigidez de troca. Terminamos com a energia da interação de troca no Micromagnetismo em sua forma usualmente encontrada na literatura:<sup>50</sup>

$$E_{ex} = \int_V A(\nabla\mathbf{m})^2 d\mathbf{r} \quad (2.30)$$

Em que  $(\nabla\mathbf{m})^2 = \sum_{i,j} \left( \frac{\partial m_i}{\partial r_j} \right)^2$  é o quadrado da norma de Frobenius do operador diferencial  $\nabla\mathbf{m}$ .

Definida assim, a energia de troca carrega de maneira implícita a hipótese do Micromagnetismo, isso é, de um regime de escalas grande o suficiente para permitir um tratamento clássico dos momentos magnéticos, mas ainda com resolução o suficiente para reter informação sobre os domínios magnéticos. Também está implícito na continuidade da norma quadrática da eq. 2.30 a transição suave da direção entre diferentes domínios. Essa expressão também carrega de maneira implícita as hipóteses do modelo de Heisenberg, ou seja, que os spins que compõe a densidade de momentos magnéticos em sítios  $\mathbf{r}$  são bem localizados.

Note porém, que a eq. 2.30 é sempre válida como primeira aproximação para sistemas mais gerais, considerando que esta representa a ordem mais baixa da expansão da energia magnética, contendo apenas os termos homogêneos. Isso fornece uma grande generalidade ao modelo, onde materiais com impurezas, anisotropias cristalinas e spins em bandas de condução podem ser descritos sob condições especiais, adicionando-se termos de não-homogeneidades.<sup>49</sup> De fato, a mesma forma funcional da eq. 2.23 pode ser generalizada para modelar o acoplamento de troca entre duas camadas de materiais magnéticos mediado pelos elétrons de condução de uma camada central diamagnética, chamada interação Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY). Esse acoplamento é usado amplamente para se criar amostras com altíssima estabilidade e coerência de domínios.<sup>51</sup>

### 2.3.2 Interação Magnetostática

Além das interações de troca que surgem da simetria intrínseca de sistemas magnéticos, a energia magnetostática é o outro dos termos que sempre está presente em materiais,

devido à interações do tipo dipolo-dipolo entre os momentos magnéticos induzidos. Esse Campo também costuma ser chamado de *desmagnetizante*, pois o mesmo tende a punir ou desfavorecer o alinhamento dos momentos magnéticos no interior do material, mas também é chamado de *anisotropia de forma*, devido ao fato de favorecer alinhamento nas direções tangentes na superfície da borda  $\partial V$  de um sistema com volume  $V$ .

A maneira usual de se obter essa contribuição de energia no Micromagnetismo é solucionando diretamente as equações de Maxwell na presença de uma magnetização  $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$  e densidade de corrente total nula  $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{B} &= \mathbf{0} \\ \nabla \times \mathbf{H}_d &= \mathbf{0} \\ \mathbf{B} &= \mu_0 (\mathbf{H}_d + \mathbf{M})\end{aligned}\tag{2.31}$$

Onde  $H_d$  é o Campo desmagnetizante que, uma vez encontrado, nos fornece a energia magnetostática total do sistema pela expressão conhecida na eletrodinâmica clássica:

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{H}_d \cdot \mathbf{M} \, d\mathbf{r}\tag{2.32}$$

A solução do sistema de equações 2.31 pode ser feita a partir do fato de que o Campo  $H_d$  é conservativo (irrotacional, em particular), e reescrevê-lo em função de um potencial escalar via  $H_d = -\nabla u$ . A partir daí, o Campo é dado pela solução da equação  $\nabla \cdot (-\nabla u + \mathbf{M}) = 0$ , que se reduz à equação de Poisson  $\nabla^2 u = \nabla \cdot \mathbf{M}$  com condições de contorno abertas, ou seja:

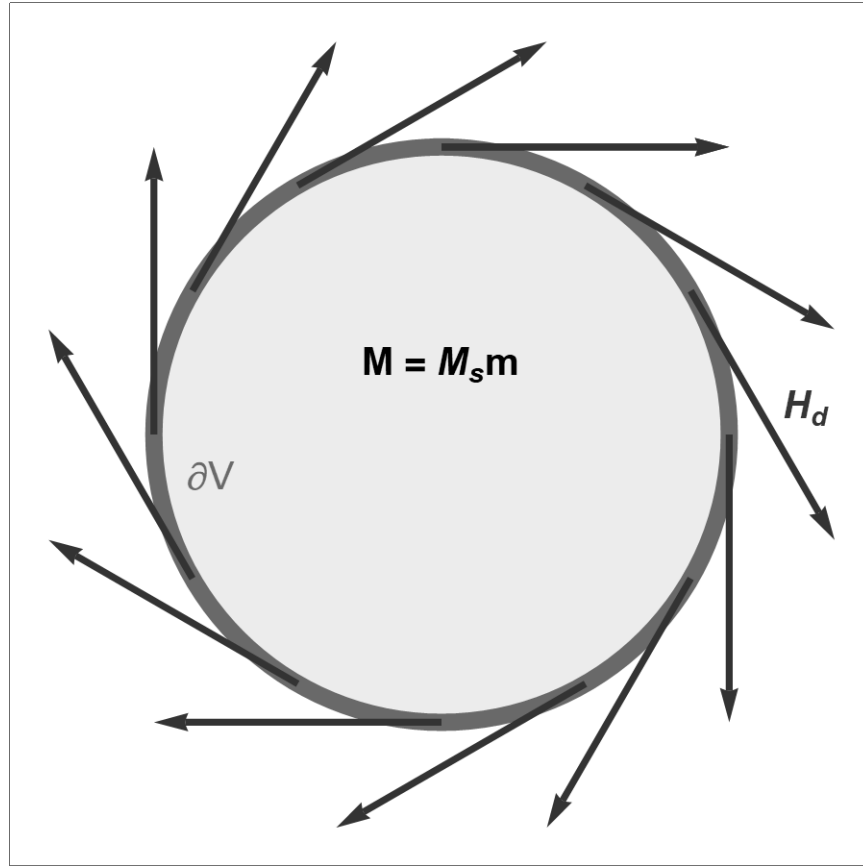
$$u(\mathbf{r}) \rightarrow \mathcal{O}\left(\frac{1}{\|\mathbf{r}\|}\right), \quad \|\mathbf{r}\| \rightarrow \infty\tag{2.33}$$

Os detalhes dessa solução são extremamente gerais e podem ser encontrados em uma variedade de textos.<sup>52</sup> O Campo  $\mathbf{H}_d$  gerado por uma amostra de magnetização  $\mathbf{M}$  é então dado por:

$$\mathbf{H}_d(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \left( \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \mathbf{M}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\tag{2.34}$$

Uma maneira prática de enxergar a relação entre a energia magnetostática e a geometria da amostra é reescrever a eq. 2.32 em torno das densidades clássicas de cargas magnéticas (dipolares), cujo termo volumétrico é dado por  $\rho = -\nabla \cdot \mathbf{M}$ , e termo de

Figura 6 – Ilustração do Campo magnetostático em uma amostra circular.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Destacam-se as direções tangentes de  $\mathbf{H}_d$  na borda  $\partial V$  do material, que possui uma magnetização dada por  $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$ .

superfície é dado por  $\sigma = \mathbf{M} \cdot \hat{n}$  para vetores  $\hat{n}$  normais à borda  $\partial V$  do volume da amostra. A energia então se torna:<sup>49</sup>

$$E_d = \frac{\mu_0}{2} \left[ \int_V \rho(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) dV + \int_{\partial V} \sigma(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) dS \right] \quad (2.35)$$

A minimização da energia magnetostática em um sistema leva a um estado desmagnetizado com o Campo efetivo localizado no *bulk* do material alinhado de maneira oposta à magnetização - o que já poderia ser visto nas eqs. de Maxwell via  $\nabla \cdot \mathbf{H}_d = -\nabla \cdot \mathbf{M}$ , e alinhado ao longo da borda em uma circulação completamente fechada caso pertença à sítios da superfície, como na fig. 6, o que minimiza também as cargas de superfície e o segundo termo da eq. 2.35. Note que nesse caso o Campo é de longo alcance, e as condições de contorno devem refletir corretamente a transição entre regiões com e sem magnetização presente.

Quando ambos os termos de energia das eqs. 2.30 e 2.32 são considerados simulta-

neamente, é justo a competição entre as tendências de alinhamento e desmagnetização que se torna responsável pelo surgimento dos domínios magnéticos em sólidos, consistindo em regiões locais de alinhamento com transições suaves entre regiões. Em amostras na escala mesoscópica isso também resulta na formação de domínios específicos como vórtices, paredes de domínio e outras estruturas com alto grau de aplicabilidade tecnológica.<sup>6,42,53</sup>

### 2.3.3 Interação Zeeman

Um corpo com magnetização finita  $\mathbf{M}$  e volume  $V$  contido em uma região com um Campo externo  $\mathbf{H}_{ext}$ , como visto nas seções anteriores, resultará em uma tendência de alinhamento dos momentos magnéticos até que fiquem paralelos ao Campo. Esse efeito, denominado efeito Zeeman, é local (age individualmente em cada sítio), e no modelo de Heisenberg a energia da interação é dada por:

$$H_{Zee} = -\mu_0 \sum_i \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{H}_{ext} \quad (2.36)$$

A extensão para o modelo Micromagnético é feita simplesmente com a correspondência dos momentos atômicos com as regiões características da eq. 2.19, resultando no termo de energia:

$$E_{zee} = -\mu_0 \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_{ext} d\mathbf{r} \quad (2.37)$$

O Campo externo  $\mathbf{H}_{ext}$  leva em consideração todas as fontes que contribuem para a indução  $\mathbf{B}$  não advindas da magnetização  $\mathbf{M}$ , que na prática são externas ao volume  $V$  em quase todos os casos.

### 2.3.4 Interações Anisotrópicas

Muitos materiais podem apresentar direções específicas ao longo das quais há um alinhamento preferível dos momentos magnéticos, em contraste com o caso da energia de troca da eq. 2.23 que pode promover alinhamento em direções arbitrárias. A causa dessas interações se encontra num acoplamento spin-órbita não isotrópico de certas estruturas cristalinas, ou em superfícies e interfaces de materiais. As direções favorecidas de alinhamento são denominadas *eixos fáceis* e a energia de interação associada é chamada *energia de anisotropia magnetocristalina*.

No caso mais simples possível, uma anisotropia uniaxial é responsável por criar um único eixo fácil através de uma amostra de material, com direção dada pelo vetor unitário

$\hat{e}$ . Esse é o caso de muitos tipos diferentes de ligas e metais como redes hexagonais de Cobalto.<sup>54</sup> Para esses tipos de sistemas, a energia de interação é dada por:

$$E_{anis} = - \int_V \left( K_{e_1} (\mathbf{m} \cdot \hat{e})^2 + K_{e_2} (\mathbf{m} \cdot \hat{e})^4 + \dots + K_{e_n} (\mathbf{m} \cdot \hat{e})^{2n} + \mathcal{O}(\mathbf{m} \cdot \hat{e}^{2n+2}) \right) d\mathbf{r} \quad (2.38)$$

Em que os valores  $K_{e_i} > 0$  são constantes de energia anisotrópica com unidades de  $[J/m^3]$ . A expressão 2.38 pode ser derivada de maneira perturbativa a partir da simetria da rede cristalina do material.<sup>55</sup> O principal requisito é que a interação dependa apenas do ângulo da magnetização com respeito ao eixo fácil, além da restrição de que a energia de equilíbrio não dependa do sentido específico ao longo do eixo  $\hat{e}$ , ou seja,  $E(\mathbf{m}) = E(-\mathbf{m})$ . Por esse motivo, no polinômio da eq. 2.38 só constam as potências pares do produto escalar.

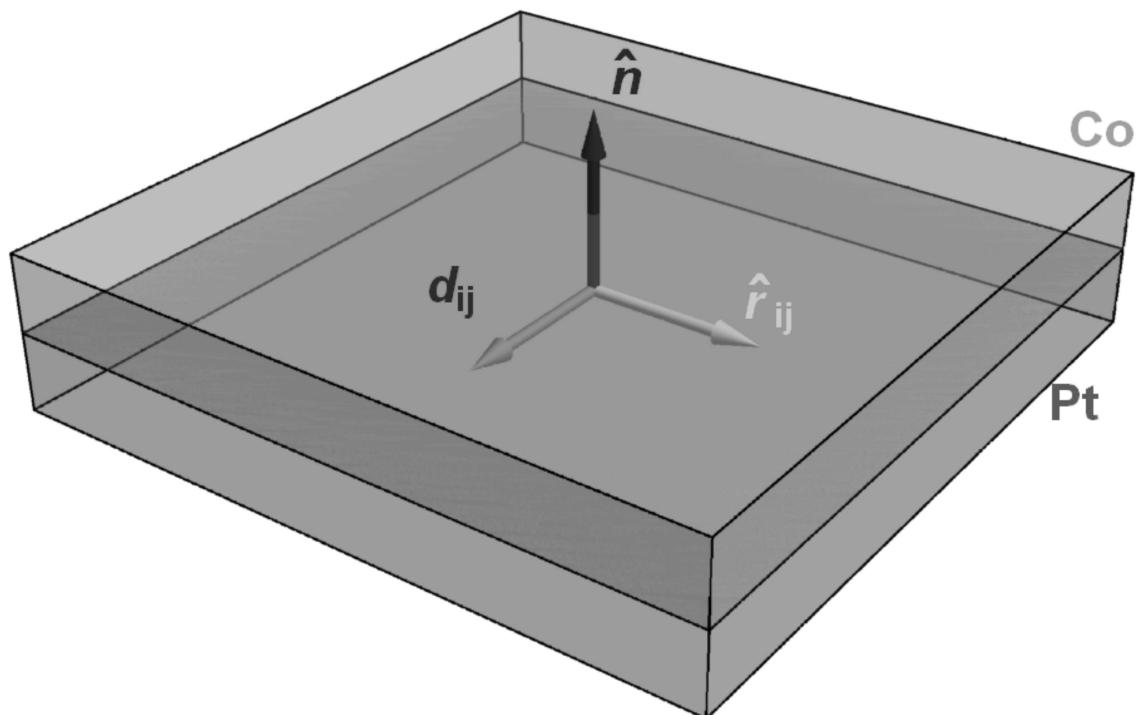
Apesar de ser possível truncarmos a expressão em qualquer ordem arbitrária, em muitas situações é mais do que o suficiente considerarmos a segunda, quarta e até sexta ordem, com diversos efeitos sendo reproduzidos fielmente até mesmo na ordem mais baixa.<sup>55</sup> Se por acaso os escalares  $K_{e_i} < 0$ , o modelo então passa a ter um *plano fácil* onde os momentos tenderão a se alinhar em conjuntos de planos perpendiculares ao eixo  $\hat{e}$ , o que corresponde, no caso limite de uma única camada atômica e valores altos de anisotropia, ao modelo *XY* de filmes finos e outras estruturas bidimensionais.

Outro caso comum de anisotropia magnetocristalina ocorre quando uma rede possui simetria cúbica. Para esse caso, temos 3 eixos fáceis mutuamente ortogonais com ângulos  $u_i = \mathbf{m} \cdot \hat{e}_i, i = (1, 2, 3)$ . Estes devem ser simétricos com respeito a uma permutação de índices, assim como não possuir uma orientação preferencial de sentido ao longo de cada um dos eixos, resultando na seguinte expansão para a energia anisotrópica cúbica:

$$E_{anis} = \int_V K_u (u_1^2 u_2^2 + u_2^2 u_3^2 + u_1^2 u_3^2) + K'_u (u_1^2 u_2^2 u_3^2) + \mathcal{O}(\sum_i u_i^4) d\mathbf{r} \quad (2.39)$$

Onde mostramos apenas os primeiros dois termos do polinômio correspondente. Em ambas as equações 2.38 e 2.39, teríamos a mesma forma funcional caso correspondessem a uma interação de interface ou superfície da estrutura, porém integrando sobre a borda equivalente  $\partial V$ .

Figura 7 – Interação DM localizada na interface entre camadas de um filme fino de CoPt.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Os vetores  $\hat{n}$ ,  $\hat{r}_{ij}$  e  $\mathbf{d}_{ij}$  são sempre mutuamente ortogonais por definição, e note que o vetor  $\mathbf{d}_{ij}$  da interação está sempre localizado no plano da interface da amostra.

### 2.3.5 Interação de Troca Antissimétrica

Em algumas situações especiais, a estrutura cristalina de um material pode induzir um acoplamento de troca entre diferentes spins que é completamente antissimétrico, em contraste com o produto escalar (simétrico) da eq. 2.23. Esse efeito, que é associado a uma quebra da simetria de inversão na direção dos momentos magnéticos, foi independentemente demonstrado por Dzyaloshinskii e Moriya<sup>56</sup> e é usualmente chamado de efeito Dzyaloshinskii-Moriya ou DM. Sua expressão atômica geral para spins localizados é:

$$H_{DM} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{d}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \quad (2.40)$$

Em que a soma  $\langle i,j \rangle$  considera apenas primeiros vizinhos, como acontece com a energia de troca regular. Os vetores  $d_{ij}$  dependem do tipo de sistema em que a interação DM foi induzida. Um caso particularmente interessante para aplicações é em sistemas com um material ferromagnético em interface com uma camada metálica pesada de acoplamento spin-órbita intenso, e.g na interface entre camadas atômicas de ligas de CoPt.

Para tais sistemas, temos que  $\mathbf{d}_{ij} = d(\hat{r}_{ij} \times \hat{n})$ , com  $d$  sendo uma constante de

acoplamento de troca,  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$  o vetor unitário apontando do sítio de spin  $i$  para o sítio  $j$ , e  $\hat{\mathbf{n}}$  o vetor unitário perpendicular ao plano da interface (fig. 7). Aqui a interação de troca induzida acontece entre dois átomos de Co, porém mediada por um átomo de Pt da camada inferior através de seu acoplamento spin-órbita intenso com o par atômico da interface.<sup>56</sup> A tendência de minimização do acoplamento DM, em competição com a tendência usual da energia de troca em alinhar spins vizinhos, é capaz de criar quasipartículas quirais, como Skyrmions, em temperatura ambiente. Como veremos, Skyrmions possuem estabilidade topológica, i.e, não podem ser suavemente transformados para o estado de equilíbrio completamente alinhado, e também podem alcançar tamanhos que chegam a menos de 10 nm, o que os tornam candidatos atraentes para aplicações tecnológicas avançadas.<sup>6,10,57</sup>

Outro tipo importante de acoplamento DM é obtido no bulk de materiais quirais que possuem quebra de simetria de inversão,<sup>58</sup> que nesse caso conseguem estabilizar redes triangulares de quasipartículas. Nesses casos, temos  $\mathbf{d}_{ij} = d\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ .

Em ambos os casos, a formulação em Campos contínuos assumindo uma densidade  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  é feita da mesma forma que a energia de troca da eq. 2.30. Isso é, vamos assumir que entre duas subregiões da amostra de volume  $V$ , a energia DM é proporcional a:

$$\Delta E_{DM} \propto \mathbf{d}(\Delta\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})) \quad (2.41)$$

Agora, podemos reescrever a energia para um sítio  $E(\mathbf{r})$  e integrar sobre o volume  $V$ . Vamos fazer isso para o caso em que  $\mathbf{d}_{ij} = d(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \times \hat{\mathbf{n}})$ , já considerando apenas os termos de menor ordem em  $\Delta\mathbf{r}$ :

$$\begin{aligned} E_{DM}(\mathbf{r}) &= \sum_i d_i [\Delta\hat{\mathbf{r}}_i \times \hat{\mathbf{n}}] \cdot [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}_i)] \\ &= \sum_i d_i \left( [\Delta\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \mathbf{m}] [\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{m} + \nabla\mathbf{m}^T \Delta\mathbf{r}_i)] - [\Delta\hat{\mathbf{r}}_i \cdot (\mathbf{m} + \nabla\mathbf{m}^T \Delta\mathbf{r}_i)] [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{m}] \right) \\ &= \sum_i d_i \left( [\Delta\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \mathbf{m}] [\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla\mathbf{m}^T \Delta\mathbf{r}_i] - [\Delta\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \nabla\mathbf{m}^T \Delta\mathbf{r}_i] [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{m}] \right) + \mathcal{O}(\Delta\mathbf{r}_i^2) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Na expressão acima, usamos a seguinte identidade vetorial no segundo passo:

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \quad (2.43)$$

Finalmente, assumindo um acoplamento isotrópico  $d_i = d$  e um espaçamento regular



$\Delta r$  entre seções de magnetização, chegamos na expressão final da energia:

$$E_{DM}^{int} = \int_{\partial V} D [\mathbf{m} \cdot \nabla (\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{n}}) - (\nabla \cdot \mathbf{m})(\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{n}})] d\mathbf{r} \quad (2.44)$$

Assim como no caso da rigidez de troca na eq. 2.30, a constante  $D$  representa uma densidade média da energia de interação levando-se em conta a estrutura da amostra, e a eq. 2.44 representa uma aproximação geral para a maior ordem homogênea de materiais magnéticos. Uma derivação completamente análoga para o caso da interação DM induzida por bulk ( $\mathbf{d}_{ij} = d\mathbf{r}_{ij}$ ) resulta na seguinte expressão de energia:

$$E_{DM}^{bulk} = \int_V D \mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{m}) d\mathbf{r} \quad (2.45)$$

Além das interações DM e de interface, outros tipos de acoplamento de troca podem ser definidos como invariantes de Lifshitz de redes cristalinas.<sup>49,56</sup>

### 2.3.6 Outras interações

Existem outras interações possíveis a serem consideradas em um sólido que irão influenciar o comportamento da magnetização. Um exemplo é o de estresse mecânico causado por mudanças induzidas por um Campo na magnetização, chamado de *magnetostricção*.<sup>59</sup> Correntes elétricas também irão influenciar a magnetização através da geração de termos adicionais no Campo de indução  $\mathbf{B}$ ,<sup>60</sup> assim como efeitos de espalhamento envolvendo a interação entre a rede da amostra e elétrons de condução.<sup>61</sup> Nesse trabalho iremos focar a implementação dos métodos de simulação nas energias já definidas até o momento, que são de relevância maior para os problemas em que tais métodos foram aplicados, mas sem nenhuma perda de generalidade, e da possibilidade de implementações em sequência de outros fenômenos.

### 2.3.7 Dinâmica da magnetização

Os termos de energia definidos nas últimas seções podem coexistir em sistemas, correspondendo em cada caso a uma energia livre para as interações magnéticas gerais de um sólido com volume  $V$ :

$$\mathcal{E} = E_{ex} + E_d + E_{zee} + E_{anis} + E_{DM} \quad (2.46)$$

Note que apenas o termo magnetostático é integrado sobre todo o espaço; porém, a magnetização é nula fora do volume da amostra ( $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ ) e portanto o domínio de  $\mathcal{E}$  está bem definido. Podemos usar essa energia para encontrar os estados de equilíbrio de um ferromagneto em escala mesoscópica, através dos mínimos da mesma. O procedimento variacional de minimização da energia através da derivada funcional  $\frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\mathbf{m}}$  é bem estabelecido e foi demonstrado por Brown,<sup>50</sup> e também é a base para implementações numéricas como métodos gradientes ou o método de Monte Carlo.

Para obtermos também uma formulação variacional dinâmica, que leva a uma evolução temporal do sistema, precisamos ainda de um passo adicional. De fato, falta adicionarmos, no procedimento usual da mecânica Lagrangeana, algum vínculo ou função que descreva a dissipação do sistema como exibido empiricamente. Isso é necessário para se modelar a perda real da energia de interação  $\mathcal{E}$  devido ao espalhamento de spins que compõem  $\mathbf{m}$  em fônons, correntes de Foucault, e outros fenômenos.<sup>57</sup> Isso é demonstrado via a adição de uma função de dissipação de Rayleigh, em uma série de textos, por exemplo, em.<sup>49</sup> A equação fenomenológica resultante que governa evolução temporal da magnetização é chamada de equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG):

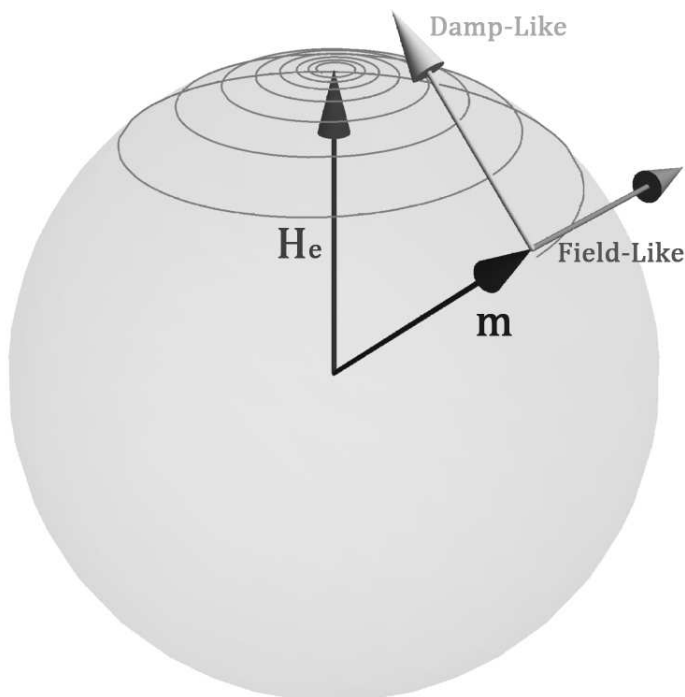
$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}}{dt} &= -\gamma\mathbf{m} \times \mathbf{H}_e + \alpha\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \\ \mathbf{H}_e &= -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\mathbf{m}} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Em que  $\gamma$  é a razão girotrópica e  $\alpha \geq 0$  é um parâmetro fenomenológico conhecido como *damping de Gilbert*, com valores típicos  $\alpha = 0.01 \dots 0.3$ .<sup>62</sup>  $\mathbf{H}_e$  é o Campo efetivo que age sobre a magnetização, derivado a partir da energia  $\mathcal{E}$  de interações internas e também do Campo externo.

Na fig. 8, podemos ver como os dois produtos vetoriais do lado direito da equação agem na forma de torque sobre a magnetização  $\mathbf{m}$ . O termo proporcional à  $\gamma$  é chamado de *field-like* ou termo de Campo, devido a causar uma precessão conservativa da magnetização ao redor do eixo definido pelo Campo efetivo  $\mathbf{H}_e$ . Já o termo proporcional ao parâmetro  $\alpha$  é chamado de *damp-like* ou termo de amortecimento, pois causa um movimento dissipativo da magnetização, na direção do Campo efetivo. A trajetória resultante é uma precessão amortecida de  $\mathbf{m}$ , com um equilíbrio final sendo alcançado em  $\mathbf{m} \parallel \mathbf{H}_e$ .

A equação LLG possui duas propriedades importantes que devemos saber para estabelecer as implementações numéricas resultantes desse trabalho. Primeiramente, é consequência direta da eq. 2.47 que a magnetização não muda sua magnitude com o tempo,

Figura 8 – Torques correspondentes a cada termo da equação LLG.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Os dois tipos de termo de torque são: um *field-like* (Campo), correspondendo à uma tendência de precessão de  $\mathbf{m}$  em torno de  $\mathbf{H}_e$ , e um torque *damp-like* (Amortecido), que leva  $\mathbf{m}$  na direção do próprio eixo de rotação definido por  $\mathbf{H}_e$ . A trajetória resultante é mostrada como uma linha sólida.

somente sua direção:

$$\|\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)\| = \|\mathbf{m}(\mathbf{r}, 0)\| \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (2.48)$$

Isso é consistente com a hipótese fundamental do Micromagnetismo da eq. 2.19 e com  $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$ .

Em segundo lugar, a energia livre  $\mathcal{E}$  só irá variar com o tempo no caso em que  $\alpha \neq 0$  ou para Campos externos que possuam dependência explícita no tempo. Caso contrário o sistema é conservativo e possui somente o movimento de torque do tipo Campo da fig. 8. No caso especial em que  $\mathbf{H}_{ext} = \mathbf{0}$  e  $\alpha > 0$ , a equação LLG apresenta a chamada *estrutura de Lyapunov*, o que significa que  $\mathbf{m}$  é solução se e somente se a energia  $\mathcal{E}$  associada for uma função monotonamente decrescente do tempo:

$$\frac{d\mathcal{E}(t)}{dt} \leq 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad \text{se } \mathbf{H}_e = \mathbf{0}, \alpha \geq 0 \quad (2.49)$$

A demonstração desses dois fatos, assim como uma descrição mais geral de equações

como a 2.47, é feita no Apêndice B.

Como a eq. 2.47 é altamente não linear, soluções analíticas são impraticáveis e limitadas. Para a maioria dos casos devemos empregar métodos numéricos. Há diversos pacotes que utilizam vários métodos diferentes, como OOMF<sup>63</sup> e MuMax3.<sup>64</sup> Um dos objetivos principais desse trabalho é definir e explorar uma abordagem original, que apresente eficiência maior no cálculo do Campo magnetostático com o mínimo de aproximações, sendo esse o processo que domina o tempo de simulação quando empregamos métodos numéricos em problemas micromagnéticos.

## 3 Topologia e Solitons Magnéticos

*"I'm afraid I can't explain myself, sir.  
Because I am not myself, you see?"*

Lewis Carroll

### 3.1 Homotopias e cargas topológicas

Topologia é uma área da matemática que é aplicada em praticamente todo o escopo da física. Apesar dos diferentes níveis de abstrações possíveis para se definir o termo, aqui trataremos topologia como o estudo das propriedades geométricas de superfícies, que podem ser deformados sem nenhum tipo de transformação descontínua, i.e, a geometria pode sofrer rotações, translações, distorções e outras deformações locais através de angulação, porém não podem ser cortados por qualquer processo que cause um salto ou buraco na geometria.

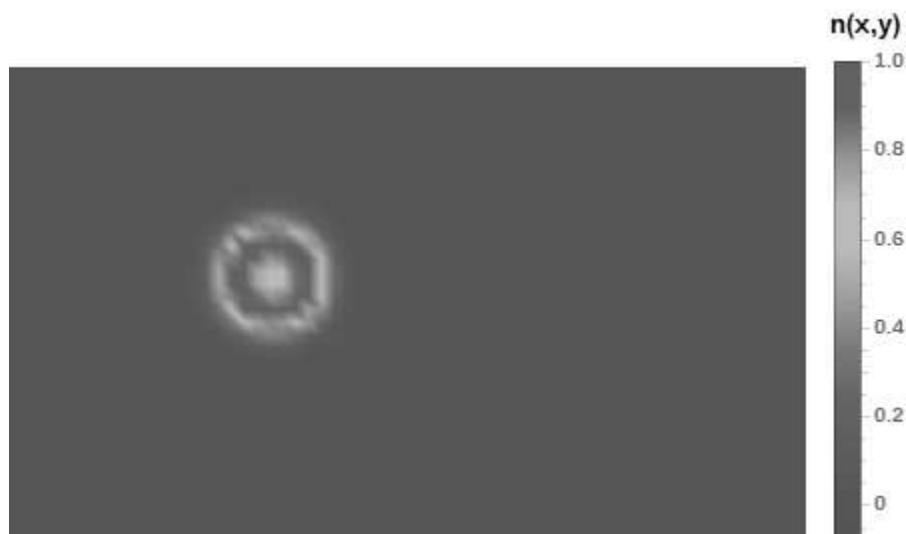
Em magnetismo, há duas propriedades topológicas fundamentais que se relacionam com a dinâmica e estática de meios materiais ferromagnéticos, que também possuem uma relação entre si. Esses são o grau  $Q \in \mathbb{Z}$  do Campo  $\mathbf{m}$  (onde aqui  $\mathbf{m}$  deve ser um mapeamento em uma superfície fechada  $S \subset \mathbb{R}^3$ ), também conhecido como *carga topológica*, e o vetor de giroacoplamento ou *densidade de carga topológica*  $\mathbf{G}$ . Usando coordenadas cartesianas  $(i, j, k)$  eles são dados por:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{m}(\mathbf{r})) \cdot d\mathbf{S} \quad (3.1)$$

$$G_{\hat{\mathbf{n}}_i} \hat{\mathbf{n}}_i = -\frac{\epsilon_{ijk}}{2} \mathbf{m} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial r_j} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial r_k} \right) \hat{\mathbf{n}}_i$$

Onde  $\hat{\mathbf{n}}_i = (\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}})$  para cada componente respectiva e as derivadas em  $r_j, r_k$  são tomadas em todas as componentes. A carga topológica, numa interpretação intuitiva e geométrica, representa o número  $Q$  de vezes em que o mapa  $\mathbf{G}(\mathbf{m})$  circula a imagem de  $\mathbf{m}$ . Apesar da definição se aplicar apenas em domínios e imagens compactos - conjuntos ao mesmo tempo fechados e limitados - em física é comum se realizar extensões de domínios e definir cargas topológicas em espaços como planos e cilindros infinitos.<sup>65</sup>

Figura 9 – Distribuição normalizada da carga topológica em um material bidimensional.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Temos  $Q = \pm 1$ , em que cada pixel da imagem tem a extensão de  $2nm^2$ . Note que apesar de ser uma distribuição com largura baixa,  $n(x, y)$  ainda é definido e possui um valor finito, ainda que muito pequeno, em todo o domínio considerado.

Cargas topológicas e vetores de giroacoplamento podem ser usados para descrever uma série de sistemas e fenômenos da matéria condensada, como superfluidos,<sup>66</sup> a estrutura eletrônica de isolantes topológicos,<sup>67</sup> supercondutividade em gases de Dirac<sup>68</sup> e semimetais de Dirac e Weyl,<sup>69</sup> e também defeitos topológicos em cristais líquidos,<sup>70</sup> antiferromagnetos e ferromagnetos.<sup>41,42</sup> Na maioria dos casos a topologia é aplicada em materiais para modelarmos *solitons*. Apesar de ser definido de formas diferentes em diferentes textos, nesse trabalho iremos tomar um soliton como sendo uma quasipartícula com estrutura localizada, especificamente sua estrutura topológica, ou seja, concentrando a densidade de carga topológica  $n(\mathbf{r}) = \|\mathbf{G}\|$  em uma região finita.<sup>65</sup>  $n(\mathbf{r})$  então é uma distribuição cujo primeiro momento representa o valor do centro de carga do soliton, e segundo momento representa a largura média do mesmo dentro do domínio de  $\mathbf{m}$ . Na figura 9 temos um exemplo de soliton em um material bidimensional.

Em materiais magnéticos, diversos solitons podem ser representados por cargas topológicas, como vórtices, skyrmions,<sup>56</sup> linhas de skyrmion,<sup>38</sup> paredes de domínio<sup>33</sup> e pontos de Bloch.<sup>71</sup> O vetor de giroacoplamento também pode ser usado para se determinar integrais de movimento de sistemas<sup>49</sup> e para representar Campos magnéticos emergentes, resultado de fenômenos coletivos globais, que se comportam localmente como magnetos de um único polo<sup>9,38</sup> (não devemos confundir singularidades desse tipo com os monopolos magnéticos que seriam partículas elementares, ou seja, não induzidos).

A propriedade marcante de um soliton que possui carga inteira  $Q \in \mathbb{Z}$  é que nesses casos a carga é um *invariante homotópico* do sistema, e essa invariância pode ser usada para se definir classes inteiras de sistemas que intuitivamente não estariam relacionados. Uma homotopia entre duas funções contínuas  $f : \mathbb{D}_1 \mapsto \mathbb{Y}_1$  e  $g : \mathbb{D}_2 \mapsto \mathbb{Y}_2$  é definida como:

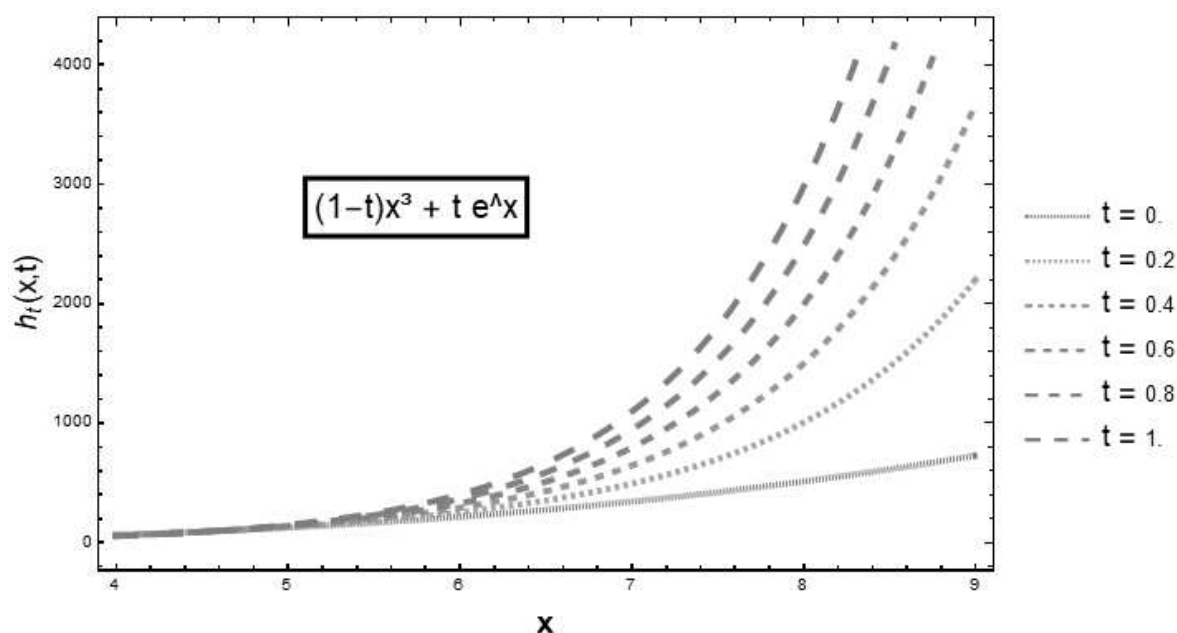
$$\begin{aligned} \mathbb{H} : (\mathbb{D}_1 \times [0, 1]) &\mapsto \mathbb{D}_2 \quad \text{tal que} \\ \mathbb{H}(\mathbf{r}, 0) = f(\mathbf{r}) \quad \text{e} \quad \mathbb{H}(\mathbf{r}, 1) = g(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{D}_1 \end{aligned} \tag{3.2}$$

O parâmetro secundário no intervalo  $[0, 1]$  da homotopia pode ser entendido tanto como "tempo" quanto como qualquer outro parâmetro ordenado - isso é, podemos imaginar uma homotopia como uma deformação contínua  $\mathbb{H}(\mathbf{r}, t)$ , do domínio  $\mathbb{D}_1$  para o domínio  $\mathbb{D}_2$ , parametrizada por  $t$ . Com a "passagem" de  $t$  podemos então visualizar a transformação contínua entre os domínios de  $f(\mathbf{r})$  e de  $g(\mathbf{r})$ . A propriedade de deformação de domínios da função  $\mathbb{H}$  admite composições de funções, no sentido em que a mesma pode ser considerada como uma família de funções  $h_t : \mathbb{D}_1 \mapsto \mathbb{D}_2$  com  $t$  variando no intervalo  $[0, 1]$  e a transição entre domínios  $(\mathbf{r}, t) \mapsto h_t(\mathbf{r})$  sendo contínua em  $(\mathbb{D}_1 \times [0, 1]) \mapsto \mathbb{D}_2$ . Uma consequência disso é que homotopias entre diferentes domínios são transitivas através de composições, isto é, se  $f_1, g_1 : A \mapsto B$  possuem uma homotopia entre si, e  $f_2, g_2 : B \mapsto C$  possuem outra homotopia entre si, temos que  $f_2 \circ f_1, g_2 \circ g_1 : A \mapsto C$  necessariamente possuem uma homotopia associada.

Homotopias formam portanto classes de equivalência entre todas as funções contínuas de um domínio para outro. Dizemos que os espaços  $\mathbb{X}$  e  $\mathbb{Y}$  são *homotopicamente equivalentes* caso existam funções  $f : \mathbb{X} \mapsto \mathbb{Y}$  e  $g : \mathbb{Y} \mapsto \mathbb{X}$  tais que  $g \circ f$  possui uma homotopia com a função identidade  $\mathbb{I}_{\mathbb{X}}$ , e  $f \circ g$  possui uma homotopia com  $\mathbb{I}_{\mathbb{Y}}$ . Essa definição nos leva exatamente para nossa primeira definição de topologia, na qual dois espaços homotopicamente equivalentes podem sempre ser transformados um no outro através de distorções contínuas - operações envolvendo mudanças de curvatura, redução ou aumento de tamanho. Alguns exemplos incluem a equivalência homotópica  $\mathbb{R}^n \simeq \{\mathbf{0}\}$ , i.e, o espaço  $n$ -dimensional pode ser transformado em um único ponto, e também  $\mathbb{R}^n - \{\mathbf{0}\} \simeq S^{n-1}$ , ou seja, o espaço  $n$ -dimensional sem a origem ou sem um único ponto pode ser transformado na  $(n - 1)$  esfera para qualquer raio da mesma.<sup>72</sup>

Na figura 10 temos um exemplo de uma homotopia  $\mathbb{H} : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$  que transforma de maneira contínua o gráfico da função  $f(x) = x^3$  na função  $g(x) = e^x$ . Esse processo é representado por uma família  $h_t(x)$  de funções do tipo  $h_t = (1 - t)x^3 + te^x$  com  $t \in [0, 1]$ , cuja composição resulta na função  $\mathbb{H}(x, t)$  que mapeia de forma completa a classe de equivalência de todas as funções contínuas "entre"  $f(x)$  e  $g(x)$ . Homotopias desse mesmo tipo também podem ser estendidas para dimensões maiores, como por exemplo na classe

Figura 10 – Alguns membros da família de funções  $h_t(x, t)$  cuja composição resulta em  $\mathbb{H}(x, t) = (1 - t)x^3 + te^x$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Note que o gráfico de forma contínua se aproxima da função  $g = e^x$ , a partir da função  $f = x^3$ , conforme o parâmetro  $t$  varia no intervalo  $[0, 1]$ .

de equivalência homotópica do toro que pode ser transformado entre diversos estados diferentes de uma esfera com asa através de uma parametrização em  $(\mathbf{r}, t)$ .<sup>73</sup>

## 3.2 Estabilidade topológica

Outra consequência importante da existência de classes de equivalência entre homotopias é que somente membros da mesma classe são acessíveis por funções que transformam espaços de maneira contínua uns nos outros. Por exemplo, o espaço  $\mathbb{R}^n$  não está na classe de equivalência da esfera  $S^{n-1}$  a menos que retiremos um ponto, e como resultado não existe nenhuma maneira de transformar entre esses espaços de maneira contínua. Do ponto de vista da topologia como definimos, esses espaços são completamente inacessíveis um ao outro.

Na última seção vimos que i) espaços e Campos só podem ser transformados/deformados de maneira contínua entre si caso pertençam a uma mesma classe de equivalência de homotopias, e ii) um Campo  $\mathbf{m}$  com carga topológica  $Q \in \mathbb{Z}$  tem essa carga conservada sob a aplicação de todas as homotopias possíveis nesse Campo.



Vamos imaginar então a seguinte situação. Sejam dois Campos  $\mathbf{m}_1(\mathbf{r})$  e  $\mathbf{m}_2(\mathbf{r})$  definidos em  $S \subset \mathbb{R}^3$ , com vetores de giroacoplamento definidos como na eq. 3.1. Esses Campos também são tais que os dois tenham cargas topológicas inteiras  $Q(\mathbf{m}_1) = Q_1$  e  $Q(\mathbf{m}_2) = Q_2$ . Temos duas possibilidades, ou  $Q_1 = Q_2$ , portanto os domínios de ambos pertencem a uma mesma classe de equivalência,  $\mathbb{D}_{\mathbf{m}_1} \simeq \mathbb{D}_{\mathbf{m}_2}$ , ou  $Q_1 \neq Q_2$ . Nesse segundo caso, podemos aplicar o chamado teorema de Hopf,<sup>74</sup> que diz que duas funções  $f$  e  $g$  definidas em variedades fechadas são equivalentes homotópicas se, e somente se, seus graus  $Q$  são iguais. Em outras palavras, para Campos  $\mathbf{m}_i(\mathbf{r})$  em superfícies fechadas - ou com seu domínio estendido, condições periódicas de contorno, etc. - estados com uma dada carga topológica podem ser deformados entre si via transformações contínuas, porém não podem ser deformados em estados com cargas topológicas diferentes.

Fisicamente, isso significa que, por exemplo, para uma configuração de magnetização  $\mathbf{m}$  com carga  $Q$  em uma superfície, essa só pode ser deformada via transformações contínuas (homotopias) em estados que possuem a mesma carga topológica. Isso nos leva ao conceito chave de *estabilidade topológica*. Dizemos que um estado físico é topologicamente estável quando o mesmo possui uma carga topológica inteira diferente daquela do estado físico fundamental, i.e com menor energia.

Isso faz com que certos estados de sistemas apresentem uma metaestabilidade robusta, no sentido em que se comportam como um estado de equilíbrio, não sendo facilmente destruídos por perturbações externas apreciáveis. Usaremos o termo estabilidade topológica e não metaestabilidade porém, pois em sistemas topologicamente estáveis até Campos externos relativamente altos (comparáveis com a diferença  $\Delta E$  entre o estado topológico considerado e o mínimo de energia) ainda preservam a estrutura.<sup>75</sup>

É importante ressaltar que, teoricamente, estados topologicamente estáveis seriam estáveis de forma absoluta - pois seria impossível transportá-los para a região do espaço de fase onde está o estado de menor energia. Porém, em sistemas reais, a presença de descontinuidades, que podem ser desde quebras de simetria de translação até a própria estrutura discreta dos materiais, impede que os estados sejam estáveis nesse sentido forte.

No entanto, em particular para sistemas magnéticos, já é demonstrado experimentalmente que estados topologicamente estáveis são de fato menos sensíveis às condições externas e se comportam de maneira similar aos estados de equilíbrio comuns.<sup>10,75</sup> No caso discreto, cargas quase inteiras, apesar de não serem completamente estabilizadas, apresentam grandes barreiras de energia para serem levadas até o estado mínimo.<sup>38,75</sup> Parte do nosso esforço então, além de implementações numéricas, consiste em estudar a carga topológica de diversos domínios magnéticos e como esses se comportam com relação aos estados de equilíbrio e/ou com relação à aplicação de uma perturbação externa.

Outra possibilidade é que já na eq. 3.1, tenhamos  $Q \in \mathbb{R}$ , e a carga não seja inteira mesmo para um domínio contínuo de  $\mathbf{m}$ . Um exemplo de Campo que se encaixa nesse caso são vórtices magnéticos<sup>76</sup> que possuem  $Q = 1/2$  e pertencem à classe de equivalência homotópica de estruturas chamadas *merons*.

Esses tipos de cargas ainda apresentam propriedades topológicas interessantes, através de sua dinâmica de criação/aniquiação e também a relação entre pares ou grupos maiores de merons. Além disso, sistemas com cargas fracionadas ainda definem classes de equivalência homotópica e ainda possuem invariantes que não a própria carga, e.g um Campo com carga topológica definido em uma variedade simplesmente conexa só pode ser transformado de maneira contínua em outros domínios também simplesmente conexos.<sup>65</sup> Porém, esses sistemas só representarão estados metaestáveis convencionais ou estados de equilíbrio globais caso sejam de fato mínimos de energia de um sistema físico.<sup>77</sup>

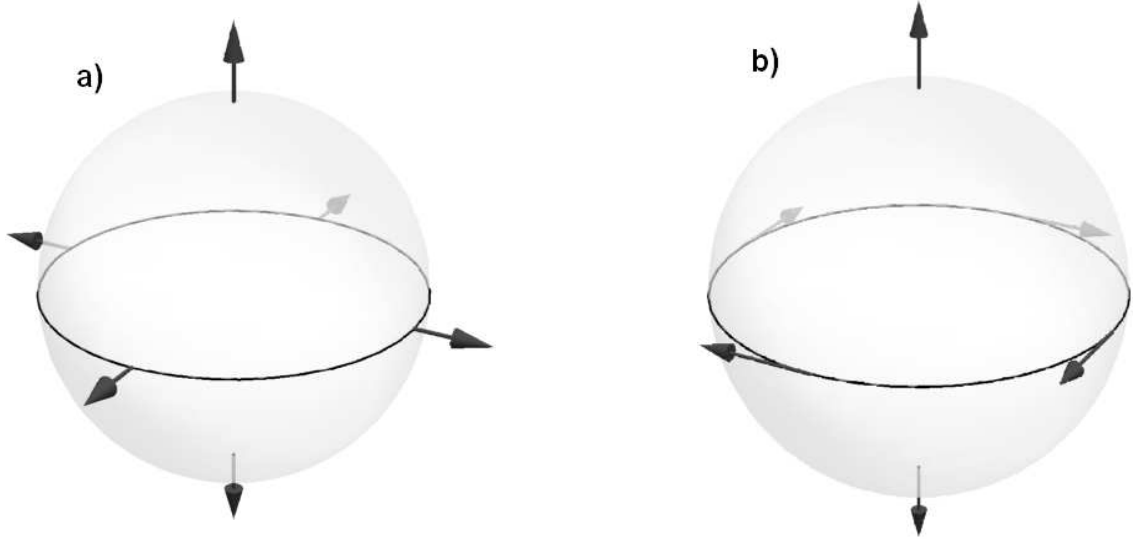
### 3.3 Conservação de Cargas Inteiras

Em sistemas reais, cargas topológicas podem ser destruídas ou modificadas para estados com cargas diferentes através de descontinuidades (defeitos, contornos e a própria rede discreta dos sólidos). Campos externos intensos o suficiente (em amplitude e duração) também são capazes de alterar cargas topológicas, fazendo estados de uma dada classe passarem por sucessivos estados homotópicos correspondendo à translação do centro de cargas. Eventualmente, esses estados podem ultrapassar a barreira de energia necessária para a carga ser “expulsa” do sistema através das quebras de simetria nos contornos.<sup>38</sup>

De fato, é demonstrado na literatura<sup>75</sup> que essa diferença de energia para transformações descontínuas entre estados com diferentes cargas, é delimitada em grande parte dos sistemas magnéticos em um intervalo bem definido  $-E_{BP} \leq \Delta E \leq E_{BP}$ , onde  $E_{BP}$  é a energia de formação de uma singularidade chamada *ponto de Bloch*. Um ponto de Bloch é um caso particular de quasipartícula localizada e com carga topológica, tal que a magnetização local no centro de carga e na vizinhança imediata tende a um valor nulo, como na figura 11.

Essas singularidades com energia  $E_{BP}$  devem corresponder a alguma classe de Campos que possuem sua energia dada em geral por  $\mathcal{E}$  na eq. 2.46 e cada um dos seus termos, em particular os de troca (eq. 2.30) e magnetostático (eq. 2.32). Vamos propor um Campo  $\mathbf{m}^B(\mathbf{r})$  que favoreça uma interpretação física do grau de  $\mathbf{m}^B$  como sendo uma

Figura 11 – Estrutura da magnetização na vizinhança imediata de um ponto de Bloch.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Observe que vários Campos  $\mathbf{m}$  diferentes resultam na mesma carga topológica com caráter de anulação da magnetização na singularidade, como por exemplo Campos do tipo a) radial e b) helicoidal.

“carga” topológica de fato:<sup>65</sup>

$$\mathbf{m}^B(\mathbf{r}) = Q\mathcal{R}_{(\alpha\beta\gamma)} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}^B)}{\|\mathbf{r} - \mathbf{R}^B\|} \quad (3.3)$$

Em que  $\mathcal{R}_{(\alpha\beta\gamma)}$  é a matriz de rotações geral no  $\mathbb{R}^3$ ,  $Q = \pm 1$  a carga topológica do Campo, e  $\mathbf{R}^B$  a posição do ponto de Bloch. Note que o Campo tem a forma que esperaríamos de uma carga pontual, sendo assim equivalente a um “monopolo” (de cargas topológicas) e bem definido apenas no sentido de distribuições. De fato, é demonstrado que na definição para a densidade de cargas topológicas  $\mathbf{G}(\mathbf{m}^B)$  da eq. 3.1, vale que:<sup>65</sup>

$$\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{m}^B) = -4\pi Q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}^B) \quad (3.4)$$

A eq. 3.4 caracteriza pontos de Bloch como fontes e sumidouros do Campo de giroacoplamento. Isso é totalmente análogo ao fato de que cargas elétricas são fontes e sumidouros do Campo elétrico  $\mathbf{E}$ . Assim sendo, da mesma maneira que no caso elétrico, se considerarmos uma superfície Gaussiana  $S$  que encobre um volume  $V$ :

$$\frac{1}{4\pi} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{m}^B) \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{4\pi} \int_V (\nabla \cdot \mathbf{G}) d\mathbf{r} = - \sum_n Q_n = -Q_{in} \quad (3.5)$$

Ou seja, a integral de superfície acima nos fornece a diferença total  $Q_{in}$  de cargas positivas e negativas contidas no interior de  $S$ .

Um Campo com a forma da eq. 3.3 foi usado por Dirac para propor uma quantização do Campo magnético  $\mathbf{B}$  através de monopolos magnéticos, em caráter dual com a carga elétrica de valor  $e$ .<sup>56</sup> Em ambos os casos, monopolos magnéticos/topológicos de cargas opostas estão sempre ligados por curvas chamadas *cordas de Dirac* ou *linhas de Skyrmion*, e para quantizar as interações magnéticas, Dirac propôs que a corda unindo um monopolo isolado no espaço até sua carga oposta se estende até o infinito.<sup>38</sup>

Dessa maneira, podemos dizer que  $Q_{in}$  expressa o número efetivo de linhas entrando ou saindo da superfície  $S$ . Em particular, a única maneira de alterar o valor de  $Q_{in}$  para uma dada  $S$  é movendo um monopolo no espaço ou trocando-o com sua carga oposta na linha de Skyrmion. Porém, em ambas as operações, o Campo  $\mathbf{m}^S(\mathbf{r}) = \{\mathbf{m}^B(\mathbf{r}) | \mathbf{r} \in S\}$ , no momento em que o monopolo atravessa a superfície, se torna descontínuo no ponto  $\mathbf{r} = \mathbf{R}^B \in S$ , anulando a validade das eqs. 3.5 e 3.4.

Com isso fornecemos uma ideia fisicamente intuitiva de que cargas topológicas  $Q \in \mathbb{Z}$  não só justificam essa nomenclatura, como também verificamos de forma heurística que não existem transformações contínuas de Campos do tipo  $\mathbf{m}^S(\mathbf{r})$  capazes de alterar a carga total  $Q_{in}$  contida em  $S$ , i.e nos levando para nossa definição de estabilidade topológica. Uma demonstração mais rigorosa de todas essas propriedades de pontos de Bloch pode ser encontrada por exemplo em.<sup>78</sup>

Na seção de aplicações veremos como pontos de Bloch de fato podem modelar transições descontínuas (com energia  $\Delta E \leq |E_{BP}|$ ) entre estados com diferentes cargas, como por exemplo inversões de polaridade em vórtices magnéticos e destruição de skyrmions em bordas de um material. Além disso, pontos de Bloch foram recentemente observados experimentalmente em condições estáveis,<sup>79</sup> e Campos com o perfil da eq. 3.3 foram medidos em materiais que apresentam o chamado efeito Hall topológico.<sup>80</sup>

## 4 Métodos Numéricos e Paralelismo em GPUs

*"If you are out to describe the truth, leave elegance to the tailor."*

Ludwig Eduard Boltzmann

### 4.1 Problemas em Domínios Discretos

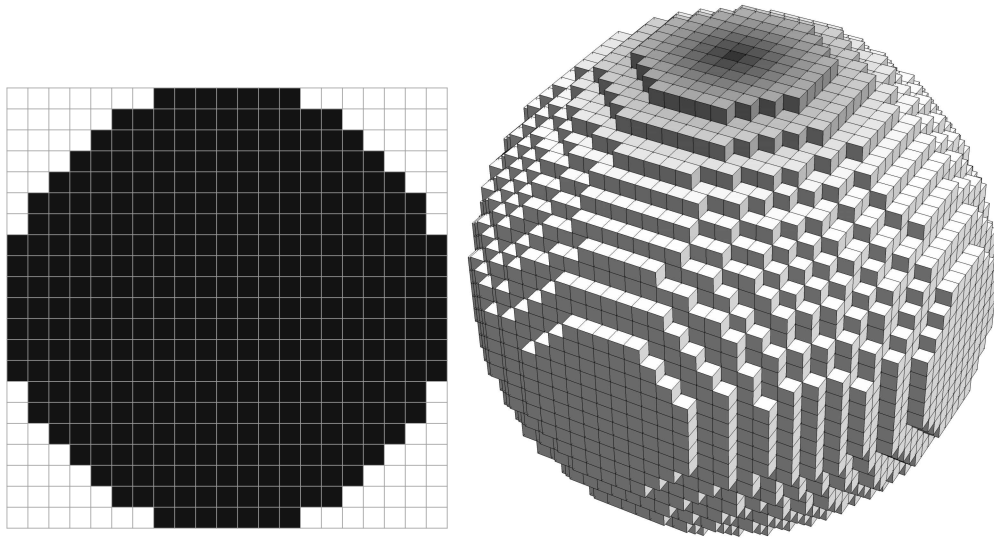
Nos capítulos 2 e 3, o micromagnetismo construído para descrever a magnetização em sólidos, assim como a topologia que descreve o aparecimento de quasipartículas nesses sistemas, são teorias de Campos contínuos no espaço  $\mathbb{R}^3$ . Em particular, o conjunto de equações de movimento não-lineares encontrados na eq. 2.47 só é solucionável de forma analítica em condições iniciais e de contorno simples. Assim sendo, vamos proceder agora com uma prescrição para discretizar no tempo e no espaço os domínios de Campos magnetização definidos anteriormente, possibilitando a aplicação de métodos numéricos.

A técnica de discretização dos domínios magnéticos que utilizaremos será o *método das diferenças finitas*.<sup>81</sup> Aqui buscamos particionar o sistema em uma grade regular de células cúbicas, como na figura 12. No caso geral o formato das células pode ser arbitrário, mas a rede cúbica trivializa a definição das interações de longo alcance que será feita a seguir. A partir de então, as equações diferenciais que regem o sistema são aproximadas em *equações em diferenças*, modificando as derivadas envolvidas em diferenças que são definidas entre células.

Os principais desafios que devem ser considerados no desenvolvimento de métodos numéricos para o nosso caso são:

- A interação de troca definida na eq. 2.30 faz com o que os sistemas apresentem um fenômeno denominado *rigidez* nas equações de movimento.<sup>82</sup> Essa rigidez consiste em uma variação temporal muito rápida do Campo devido à características intrínsecas da equação diferencial, mesmo onde aparentemente a solução é suave. Isso restringe severamente a escala de tempo dos passos temporais que podem ser implementados sem perdermos detalhes presentes em escalas menores.

Figura 12 – Grade discretizada em uma rede cúbica e regular para implementação do método das diferenças finitas em uma esfera e um círculo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

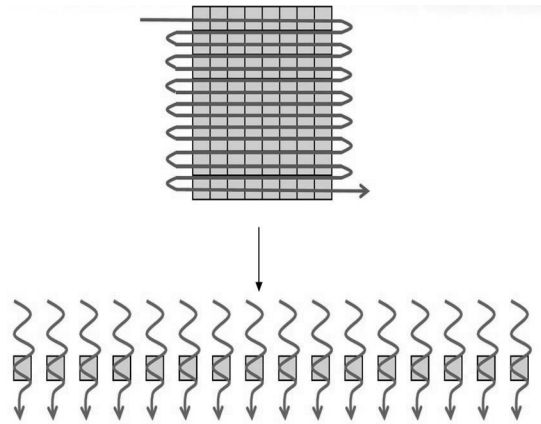
Nota: Observe que o contorno discretizado depende da escolha de formato das células da rede, aqui cúbica.

- O Campo magnetostático apresentado na eq. 2.32 é uma contribuição de longo alcance, dificultando a escolha de discretização dos domínios no espaço. Uma discretização detalhada é importante pois a competição entre os Campos de troca e magnetostático é a principal causa do surgimento de domínios magnéticos, porém isso aumenta em muito o número de operações necessárias durante uma simulação.

Existem portanto dois níveis de abstração distintos para lidar com o problema de se modelar numericamente a magnetização em um sólido. Por um lado, devemos nos atentar aos limites de aplicação e validade do modelo micromagnético que apresentamos no capítulo 2, de modo que qualquer aproximação adicional (incluindo a discretização dos domínios onde o problema está definido) deve ser apropriadamente justificada.

Do outro lado, devemos desenvolver uma implementação numérica que seja eficiente para trabalharmos com estruturas na escala mesoscópica desejada, assim como confiáveis do ponto de vista de erros de arredondamento, sem anular ou modificar demais as hipóteses que já fizemos no âmbito da teoria micromagnética. Vamos nos dedicar primeiro a esse problema de implementação computacional, e posteriormente traçar a ligação entre o aspecto puramente numérico com o problema físico em questão.

Figura 13 – Visão intuitiva do fluxo de instruções de um programa serial (acima) e um paralelo (abaixo).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Uma instrução, representada como linha em uma seta, pode ser um cálculo ou acesso de memória por exemplo, com os dados sendo processados representados por quadrados/pixels.

## 4.2 Estruturas de Dados e Execução

Vamos definir brevemente expressões que usaremos a seguir: iremos nos referir aos processadores convencionais, que lidam com operações de forma sequencial, como CPUs (*Central Processing Units*), e a processadores em paralelo, que em nosso caso funcionam via placas de vídeo da NVidia, como GPUs (*Graphical Processing Units*). Outras plataformas em paralelo, como o OpenMP (que funcionam com base em várias CPUs trabalhando em conjunto) serão eventualmente mencionadas, sem nos preocuparmos com os detalhes de seu funcionamento. Sistemas com hardware e software com funcionamento baseado no paralelismo fazem parte do campo de estudo da computação de alto desempenho (*High-performance computing - HPC*).

Em geral, sistemas computacionais paralelos são caracterizados de acordo com o fluxo de dados e/ou o fluxo de instruções a serem processados em paralelo ou em uma sequência (figura 13). Dessa forma fazemos a distinção entre quatro tipos fundamentais de processamento:<sup>34, 83</sup>

- Single Instruction Single Data (SISD) - É o modo de processamento ao qual a maioria de nós está habituado, em que dados são acessados e processados de forma completamente serial, em forma de iterações e operações recursivas, em condição de não-simultaneidade. Métodos de otimização iterativa como o método de Newton são exemplos de algoritmos baseados em SISD;

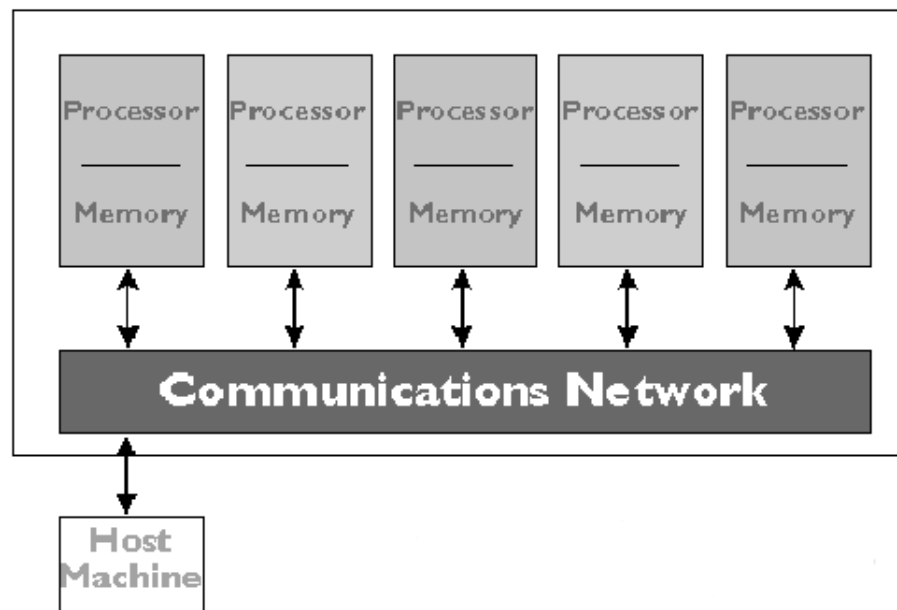
- Single Instruction Multiple Data (SIMD) - São algoritmos que recebem um conjunto de dados (e.g uma ou mais matrizes, ou coordenadas de um certo mapeamento) e realizam simultaneamente (em cada linha, coluna da matriz ou em cada coordenada) uma instrução fornecida pelo programa. O produto interno de vetores no  $\mathbb{R}^n$  é um exemplo de algoritmo trivialmente extensível para o processamento SIMD. As instruções aqui devem ser idênticas para todos os dados que estão sendo operados simultaneamente.
- Multiple Instruction Single Data (MISD) - Esses são programas cujo input corresponde a um único valor, vetor ou tensor, e múltiplas rotinas, ou múltiplas instruções, em geral independentes, devem ser executadas paralelamente sobre este. É possível verificar, por exemplo, se um dado número  $a$  é primo, realizando operações de teste individuais em cada processador disponível sobre o mesmo número. A princípio não fazemos distinção se a memória acessada é um dado que corresponde a um único endereço ou se as rotinas atuam sobre diversas cópias redundantes de  $a$ .
- Multiple Instruction Multiple Data (MIMD) - No caso de um algoritmo MIMD, cada processador pode executar instruções diferentes sobre diferentes conjuntos de dados, assim como executar partes diferentes de algum programa sobre um conjunto de dados, o que caracteriza o paralelismo. É o princípio de sistemas com multiprocessadores e clusters, assim como o dos sistemas CUDA responsáveis por processamento em clusters de placas gráficas.

Uma característica geral de processadores que executam em SIMD ou MIMD é a distinção entre assim o fazerem através da chamada memória global ou distribuída (*distributed memory*), e da memória compartilhada ou *shared*.

Em sistemas com memória distribuída, cada processador da máquina paralela possui sua própria memória local, que pode acessar e trabalhar, sendo endereçada localmente, ou seja, sem acesso direto a memória de outros processadores (como na figura 14). O paralelismo se torna possível via operações de cópia explícitas de dados entre as memórias locais de cada processador, através de uma rede global de comunicação, o que exige transmissão rápida por parte dessa rede para tornar a implementação aceitável. Um algoritmo em um computador com memória distribuída não consiste apenas de uma sequência de cálculos e acessos à memória, mas os dados também devem ser trocados em pontos apropriados dentro do programa. Essas operações de input(entrada) e output(saída) de dados devem ser especificadas de maneira explícita pelo programador, na maioria dos casos.



Figura 14 – Esquema de um processador com memória distribuída..



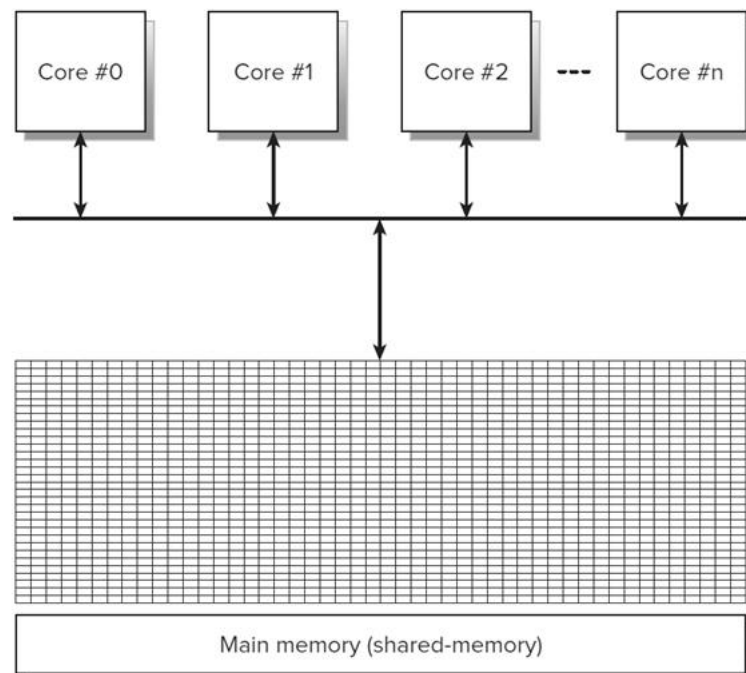
Fonte: NVidia GPU gems (2004).

Nota: Cada processador armazena dados localmente e não se comunica de forma direta com os demais.

Por outro lado, sistemas com memória tipo shared possuem uma quantidade de memória a qual diferentes processadores tem acesso para escrever e receber dados (ver figura 15). Podem ser enxergados como um único banco de memória, ou vários pequenos bancos de memória distribuídos entre grupos de processadores (mas que possuem alguma comunicação). Independente da visualização, todos esses sistemas permitem ao programador acesso simultâneo a toda a memória (pelo menos de forma virtual) a partir de endereços globais aos quais todos os processadores se associam. Dessa forma em sistemas desse tipo o limitante para a eficiência é a concorrência no acesso a estes endereços, e fica mais fácil particionar nosso modelo em etapas que podem ser executadas independentemente ao mesmo tempo.

Ainda assim, quando o número de processadores cresce muito, é preciso se levar em conta que diferentes processadores tem velocidades de acesso diferentes a diferentes partes da memória (literalmente, possuem distâncias relativas aos endereços de memória diferentes), e cada processador deve realizar aproximadamente a mesma quantidade de processamento, afim de que nenhum processador em algum momento passe muito tempo esperando pelos demais antes de passar a uma nova tarefa. Técnicas que visam distribuir a carga de trabalho se denominam de *Latency Hiding*. Além disso é necessário sincronizar acessos, para que por exemplo dois processadores não tentem escrever em algum endereço

Figura 15 – Esquema de um processador com memória compartilhada.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Todo processador, ou núcleo, acessa os mesmos dados e processa os mesmos dados que os demais, a princípio, simultaneamente.

de memória específico simultaneamente, comprometendo o funcionamento pretendido de algum algoritmo, e.g perdendo dados sobre interações entre pares de partículas devido à falta de sincronia entre processadores na hora de somar energias.

A maioria dos multiprocessadores modernos, inclusive as placas gráficas CUDA, se utilizam de sistemas híbridos, que possuem memória shared para comunicação entre grupos pequenos (ou nós) de processadores e uma memória global distribuída, formando um grande “processador de processadores” em paralelo, de maneira que os dados e a implementação não precisam ser particionados em muitos subproblemas apesar do número grande de processadores.<sup>84</sup>

Ambos os sistemas físicos de memória (hardware) são adaptados às mesmas estruturas de dados abstratas que facilitam nossa transição entre modelos matemáticos e computacionais, como árvores, grafos, listas, filas, mapeamentos e conjuntos.<sup>85</sup>

Tabela 1 – Especificações da GPU Tesla K20m.

Compute Capability	3.5
Memória Total	5120 MBytes (5 GB)
Streaming Multiprocessors (SMs)	13
Núcleos CUDA por SM	192
Total de multiprocessadores (núcleos)	2496
GPU Clock	706 MHz (0.71 GHz)
Memory Clock	2600 MHz (2.7 GHz)

Fonte: NVidia (2013).

### 4.3 CUDA: Warps, Threads, Blocks, Grids

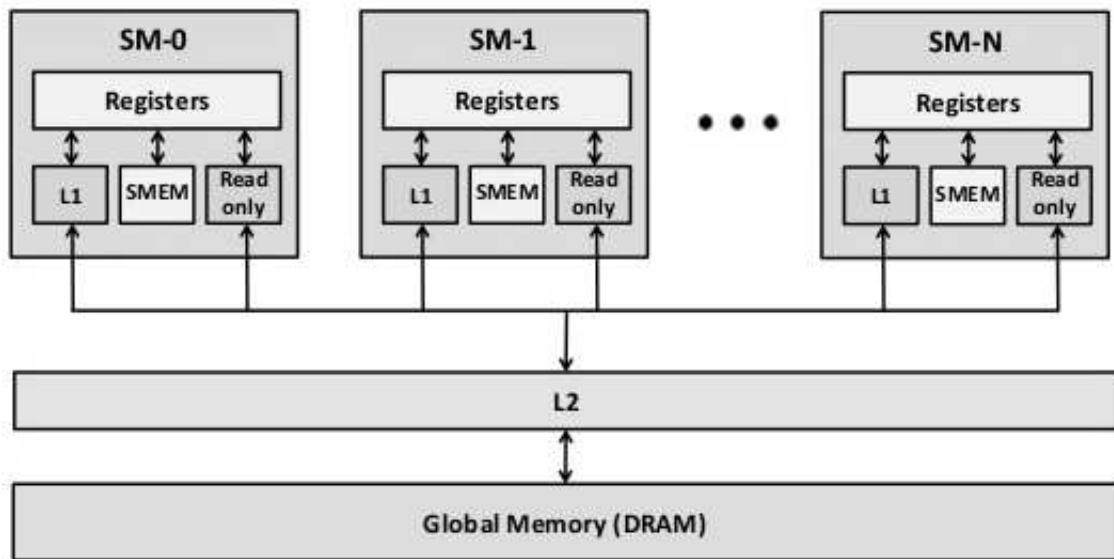
A plataforma CUDA segue uma linguagem formal baseada na linguagem de programação C (uma das mais populares entre desenvolvedores de sistemas, e a base dos sistemas operacionais Windows e Linux), tendo sido criada, difundida e atualizada regularmente pela NVIDIA.<sup>86</sup> Um conhecimento razoável da plataforma e da linguagem *C CUDA* são necessários para descrever o paralelismo em nosso software. Portanto nessa seção iremos explicitar as características mais importantes de uma GPU CUDA.

Uma GPU CUDA é composta por centenas de milhares de núcleos, e possui uma memória *DRAM* global e diversos bancos de memória menores e localizados para cada núcleo individual. Esses núcleos de processamento (que podem ser entendidos até certo ponto como os núcleos de um processador CPU convencional) se comunicam através dos denominados *Streaming Multiprocessors* (SMs), que podem se comunicar e realizar acessos na memória simultaneamente, e realizam transferências entre os núcleos. Cada placa segue uma *arquitetura*, que corresponde ao seu particular modo de organização do hardware, mas que influencia pouco o ato de programar um software. Nesse trabalho utilizamos as placas *Tesla K20m* e *Tesla K40*, que usa a arquitetura *Kepler*. Por completeza, as Tesla K20m utilizadas nesse trabalho contam com as seguintes especificações na tabela 1.

A memória é dividida (fisicamente) por regiões(ver figura 16): temos uma região *global + L2 Cache* de acesso comum a todos os SMs, e cada um destes possui uma região de memória local, com um conjunto *L1 + SMEM + Constant memory + Registers* que constiuem as memórias tipo shared definidas acima.

Em um programa em C CUDA, controlamos o acesso a essas memórias via estruturas abstratas, definidas apenas a nível do código: os chamados *threads*, *blocks* e *grids*. Podemos

Figura 16 – Divisão física da memória de uma GPU CUDA.

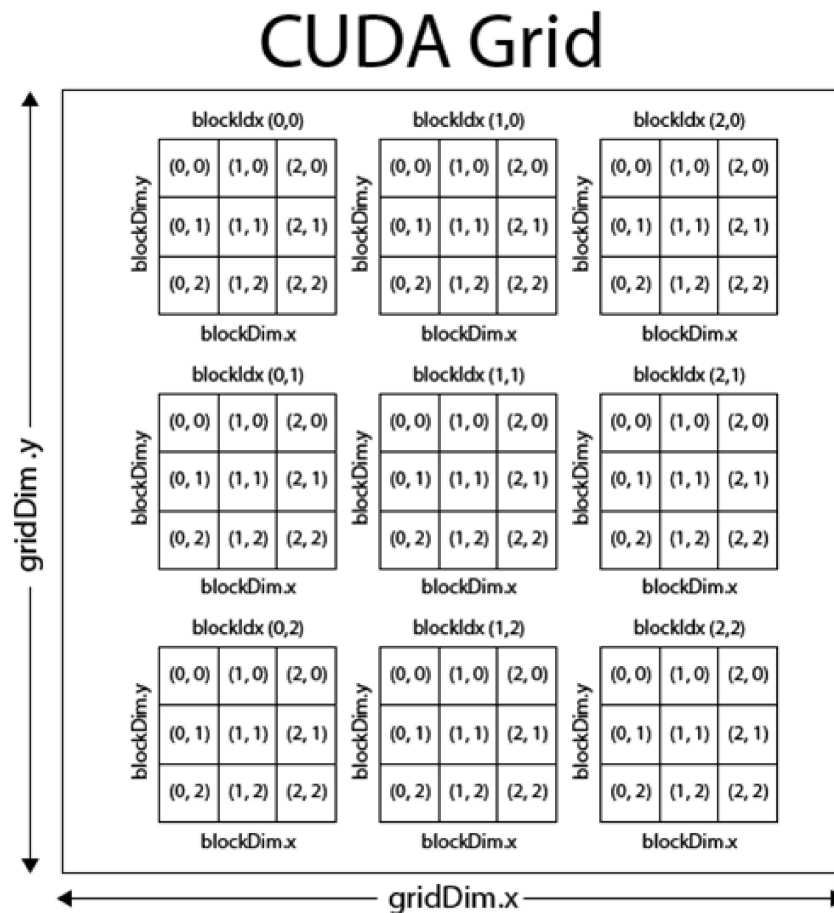


Fonte: NVidia (2010).

visualizar de maneira mais ou menos intuitiva essas estruturas imaginando-as como um tensor (figura 17): um grupo de threads compõe um block (e threads podem ser uni, bi, ou tridimensionais), e um grupo de blocks compõem um grid. Essas threads não correspondem aos endereços de memória em si (variáveis ou cálculos), mas sim a endereços de *streaming*, ou seja, cada thread é um fluxo de processamento (i.e uma sequência de linhas de código) que irá aplicar uma função sobre um conjunto de dados (estes divididos entre as diversas memórias disponíveis), o que da origem à estrutura SIMD mencionada na introdução do capítulo. Conciliar essa abstração com a memória física é responsabilidade do programador, e apresenta a possibilidade de uma otimização maior do que no caso do paralelismo convencional em clusters (via processadores CPU e OpenMPI)<sup>84,87</sup>

O fluxo da execução de um programa (i.e os threads) são ativados pelos SMs em grupos de 32, chamados *Warps*. Um Warp é a unidade fundamental de processamento em paralelo efetivo na GPU. Isso significa que, dentre todos os elementos definidos até agora, o Warp é onde, de fato, surge a diferença entre uma programação serial e a programação em paralelo. Cada Warp é executado por um SM, que aloca núcleos livres para isso, de acordo com as regiões de memória especificadas pelo programador no código. Caso não haja *divergência de threads* dentro de um Warp, este irá executar todos os 32 thread simultaneamente, alcançando de fato o paralelismo. Uma divergência de threads consiste em alguma condição (do tipo *If*, *While*, etc.) que forneça respostas diferentes para threads diferentes dentro de um Warp. Por exemplo, em um código do tipo:

Figura 17 – Divisão abstrata da memória de uma GPU CUDA, em uma matriz de threads e blocks.



Fonte: CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming (2010).

```

Input[6] = {1,10,2,12,3,13} //Todo o input sera processado simultaneamente
  if(Input[i] < 10){
    ...
  }
  else{
    ...
  }

```

Dentro de um mesmo Warp, logo na segunda condição haverá uma divergência, e então o Warp inteiro irá se *serializar* para executar os threads um por um, perdendo completamente o caráter paralelo. Podemos evitar a divergência de Warps reordenando nossos dados para que a divergência dentro de um Warp se minimize. No nosso exemplo, isso corresponderia a:

```
Input[6] = {1,10,2,12,3,13} //Reordena o Input para contornar divergencias
Input_o[6] = {1,2,3,10,12,13} //Todo o input sera processado paralelamente
    if(Input_o < 10){
        ... //Executa algum codigo pretendido
    }
    else{
        ...
    }
}
```

Nesse caso, o Warp pode ser automaticamente dividido em dois blocos, ambos completamente paralelos e em 2 SMs, ou seja, como se não houvesse nenhuma divergência de threads no código. Em outras palavras, uma divergência serializa o fluxo de um thread em relação aos anteriores, mas tenta manter um fluxo paralelo e único para os próximos, sendo o pior caso possível o de várias divergências seguidas umas das outras. Juntamente com o *Latency Hiding*, evitar a divergência de threads é uma das mais importantes técnicas de otimização em um processador GPU CUDA. Observe que, conforme as divergências passam a ser dependentes das condições iniciais de nossas simulações, e estas passam a seguir dinâmicas relativamente complexas, aumenta em muito o desafio em se “coordenar” as divergências entre threads para minimizá-las o máximo possível. Note também que, um Warp **sempre** corresponde à execução de 32 threads, então em nosso exemplo, 26 threads seriam “desperdiçados” ao serem separados para processamento sem nenhum dado ou fluxo correspondente. Este fato também deve ser levado em conta na execução do programa.

Para identificarmos um thread (que se localiza em um block, que faz parte de um grid), podemos mapear seu índice na memória do computador como o faríamos para mapear os índices  $a, b, c, \dots$  de um tensor de rank  $N$  em um único valor:

```
int n = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
```

Em que `threadIdx.x` corresponde ao endereço de uma das dimensões de um thread, `blockIdx.x` é o bloco onde este thread se localiza, e `blockDim.x` é o tamanho de um bloco. As três “direções” de um thread podem ser endereçadas da mesma maneira, i.e, `threadIdx.x`, `threadIdx.y` e `threadIdx.z`; Note que esse endereçamento é o mesmo mapeamento que usaríamos para vetorizar uma matriz de tamanho  $N \times N = (A_{ij})$ , se utilizando da equivalência entre o conjunto de índices  $\{(0, 0), (1, 0), (1, 1), \dots, (N, N)\}$  e o conjunto

$\{0, 1, 2, \dots, N^2\}$ , da seguinte forma:

$$A_n \sim A_{ij} \sim A_{i+j*N} \sim A_{j+i*N} \quad (4.1)$$

Assim, antes de passarmos ao desenvolvimento de um software específico para uma simulação micromagnética, vamos fornecer um exemplo simples de como funciona a paralelização de um programa em C CUDA, afim de explicitar algumas definições importantes. Vamos paralelizar um passo temporal em uma dinâmica molecular com o algoritmo de Verlet.<sup>88</sup> Nesse caso, possuímos um conjunto de posições (x,y,z), velocidades (vx, vy, vz) e acelerações (ax, ay, az) em um tempo  $t$ , e desejamos obter as posições para o próximo tempo  $t + \Delta t$  em função destas variáveis, usando uma aproximação simples. Em um programa sequencial escrito na linguagem C, isso é escrito de maneira intuitiva como:

```
void velocity_verlet(void){
    double dt2 = deltat * deltat;
    for(int u = inicial; u < final; u++){
        x[u] = x[u] + vx[u] * deltat + 0.5*ax[u]*dt2;
        y[u] = y[u] + vy[u] * deltat + 0.5*ay[u]*dt2;
        z[u] = z[u] + vz[u] * deltat + 0.5*az[u]*dt2;
    }
    return;
}
```

Enquanto uma rotina em paralelo para executar essa mesma função teria a forma:

```
__global__ void velocity_verlet(double *x, double *y, double *z, double *vx,
    double *vy, double *vz, int final,int inicial, double *ax, double *ay,
    double *az, double *deltat){
    int n = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
    while((n >= inicial)&&(n < final)){
        x[n] = x[n] + vx[n] * (*deltat) + 0.5*ax[n] * (*deltat) * (*deltat);
        y[n] = y[n] + vy[n] * (*deltat) + 0.5*ay[n] * (*deltat) * (*deltat);
        z[n] = z[n] + vz[n] * (*deltat) + 0.5*az[n] * (*deltat) * (*deltat);
        n+= blockDim.x * gridDim.x;
    }
}
```

Vamos listar as diferenças:

- O prefixo “global” indica que estamos definindo uma rotina que será utilizada pela GPU (mas o comando de execução, deve ser dado pela CPU); por isso o uso de ponteiros (variáveis do tipo `*a`) para declarar todas as variáveis, pois a CPU não pode se comunicar diretamente com os endereços de memória da plataforma CUDA;
- `n` é o endereço de cada thread, como definido acima;
- No lugar do loop, temos agora uma condição para os endereços de thread; isso garante que iremos executar apenas threads que se encaixam no tamanho de nosso problema em questão (nesse caso,  $N$  átomos particulares). Assim como um Warp sempre consiste de 32 threads, escolhemos *a priori* quantos blocks (e também quantos threads) um programa irá definir na memória da GPU, e todos serão utilizados nessa rotina, por isso precisamos de condições desse tipo, caso contrário acessaremos regiões não definidas da memória;
- Observe que o Verlet em si não precisou de grandes alterações; todos os respectivos endereços `n`, num caso ideal, irão ter suas posições `x`, `y`, `z` atualizadas simultaneamente, e comparado com a implementação serial original, precisaremos de uma ordem de  $O(N/P)$  operações para completar o passo temporal, sendo  $P$  o número de núcleos utilizados. Naturalmente,  $P < N$ , pois não seria útil associar mais de um thread a uma partícula nesse caso (em outros exemplos, como veremos, isso será útil no entanto);
- A última linha corresponde a condição de parada da rotina; Caso um block não tenha sido suficiente para cobrir todas as  $N$  partículas, lançamos mais um, o que é muito comum em problemas com milhões de partículas, ainda com número total potencialmente variável.

Além dessas diferenças superficiais, também devemos alterar o código principal de input/output (I/O). Enquanto no caso serial bastava uma linha para executar a rotina `velocity verlet`, agora precisamos primeiro copiar a memória que inicializamos (posições, velocidades, acelerações, etc.) da CPU para a GPU:

```
int main(){
... // Cria e define variaveis como em C regular
cudaMalloc((void**)&dev_x, size_coord);
cudaMalloc((void**)&dev_y, size_coord);
```



```

cudaMalloc((void**)&dev_z, size_coord);
... // aloca tambem ax, ay, az, vx, vy, vz da mesma forma
cudaMemcpy(dev_x, x, size_coord, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(dev_y, y, size_coord, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(dev_z, z, size_coord, cudaMemcpyHostToDevice);
... // copia tambem ax, ay, az, vx, vy, vz da mesma forma
velocity_verlet<<<block,thread>>>(dev_x, dev_y, dev_z, dev_vx, dev_vy,
    dev_vz, final, inicial, dev_ax, dev_ay, dev_az, dev_dt);
...
return 0;
}

```

Observe que, ao chamar a rotina `velocity verlet` na GPU, especificamos o número de threads e blocks que a GPU irá utilizar. Quanto à cópias entre memórias, caso precisemos dos dados “diretamente”, por exemplo para escrever um arquivo de trajetórias, devemos usar a mesma função de cópia (`cudaMemcpy`) após o passo temporal, com a última especificação invertida para `DeviceToHost` (`size coord` corresponde ao tamanho dos vetores, definido pelo usuário como entrada do programa). Como o número de threads está vinculado ao número de Warps que podemos executar simultaneamente (múltiplos de 32), mas gostaríamos de simular números arbitrários de elementos, se torna um problema não trivial otimizar a melhor conciliação entre essa abstração da memória, e aquela que de fato ocupamos com as variáveis repassadas para a GPU, e idealmente vários testes devem ser feitos para avaliar o melhor caso para cada problema. Note também que, as variáveis `dev*` que indicam as usadas na GPU, devem ser alocadas dinamicamente em todos os casos, assim como as que usaremos para escrever o output (e ficam localizados na memória fora da GPU). Isso não acontece no caso da CPU, onde podemos a princípio determinar estaticamente o tamanho do nosso problema no ato de compilação do programa.

## 4.4 Técnicas de Paralelismo

A maior parte dos pacotes disponíveis em simulação micromagnética, como o OOMF, é baseado num estilo de programação *orientado a objetos*. Isso quer dizer que todos os cálculos ocorrem no nível de conjuntos de dados que definem *classes* com relações de conjunto entre os elementos (e.g momentos magnéticos com 3 componentes, o torque atuando sob cada um, e o instante  $t_n$  onde se encontram, formam uma classe). Isso torna muito mais fácil organizar o código de maneira intuitiva para qualquer um que eventualmente o modifique, porém uma desvantagem significante é que o nível alto de abstração dificulta

otimizações mais pesadas. Em contraste, em um estilo de programação *funcional* focamos em operadores atuando sobre inúmeros conjuntos de dados simultaneamente, com foco direto na criação de outputs sem modificarmos diretamente esses conjuntos, possibilitando uma otimização em nível mais baixo de abstração (e.g atuar com uma função  $F$  sobre um vetor de momentos magnéticos obtendo energia, magnetização e torque atuando no sistema separadamente). A desvantagem dessa abordagem é o trabalho consideravelmente maior em se organizar os blocos de dados em um programa funcional, e o aumento direto do tamanho do código devido ao nível mais baixo de abstrações. Ainda assim, nesse trabalho usamos um modelo funcional para criar nosso código, para buscarmos o resultado mais eficiente possível, visando uma adaptação futura para mais acessibilidade. Pacotes como o VAMPIRE citado na introdução, que também fazem parte do Estado-da-arte no quesito da construção do software,<sup>34,89</sup> usam um modelo híbrido, abrindo mão de parte de sua capacidade de otimizar as relações entre os conjuntos de dados, em prol de ser mais acessível para a comunidade no geral.

Quando buscamos varrer um espaço de fase em busca de pontos de equilíbrio, podemos nos usar do chamado *paralelismo estatístico*, ou seja, dividimos o trabalho em uma série de cálculos completamente independentes, sendo realizados cada um em um processador diferente, variando apenas parâmetros como o Campo externo ou anisotropia entre uma simulação e outra. Esse método porém, só é aplicável a sistemas relativamente pequenos, onde é viável que todos os dados em um ponto do espaço sejam processados por apenas um processador. Para sistemas dinâmicos, e de tamanhos razoáveis, devemos nos usar de alguma outra técnica menos trivial de paralelização.

A técnica de paralelização mais comum nesse caso é a *decomposição de domínio*. Essa decomposição consiste em dividir o espaço de dados em células (que não correspondem necessariamente às células da aproximação micromagnética), cada uma contendo um número de elementos, e cada processador é responsável por processar os dados nessa célula. Idealmente podemos escalonar o sistema para ser processado em todos os núcleos de nossa GPU dessa forma, atingindo o máximo de eficiência em nossa implementação. Note que existem inúmeras maneiras de se decompor um domínio em uma equação diferencial (apesar do método mais utilizado em aplicações físicas ser o método da lista ligada<sup>82,85</sup>), e é um problema não trivial escolher a melhor decomposição possível para uma dada plataforma de programação.<sup>34,90</sup>

Em C CUDA, o fator de otimização mais importante é a região da memória sobre a qual executamos os cálculos. A memória global, em que todos os processadores tem acesso, tem latência muito grande, e devemos limitar as operações que utilizamos com conjuntos nessa região.<sup>84</sup> A latência é tão grande que é mais eficiente se fazer cópias entre a memória global e a memória *shared* individual de cada processador. Em particular, podemos utilizar

a estrutura abstrata de um block, realizando comunicação entre threads diretamente da memória shared, sem necessidade de uma consulta aos dados salvos na memória principal.

Em nosso caso então, podemos nos usar de *Latency Hiding* para realizar cópias entre as memórias logo antes de operações intensivas computacionalmente, e esperamos que idealmente os novos grupos de dados já estejam prontos ao final desse período, efetivamente criando um sistema de filas, onde movimentamos os dados em espera do processamento ao mesmo tempo em que outros já estão sendo processados. Essa é uma operação trivial em um cluster de CPUs que possui uma única região de memória, mas na GPU também devemos nos atentar à possíveis divergências de Warps durante essas operações. Apesar dos detalhes computacionais relativamente complexos, esse procedimento não passa de uma decomposição do domínio do problema em pedaços mapeados exatamente sobre a estrutura de blocks e threads da GPU.

Resumidamente, a estratégia de paralelização consiste em duas partes, uma para calcularmos as grandezas “globais” do sistema, como a energia total dada pela Hamiltoniana de Heisenberg micromagnética, e o valor esperado da Magnetização resultante em cada direção, e outra para obtermos as componentes do Campo efetivo local necessárias na integração numérica. A integração numérica em si é direta e veremos que é feita analogamente ao exemplo do velocity verlet no início do capítulo. Descreveremos a seguir cada um desses procedimentos, primeiro de forma resumida e posteriormente com detalhes da implementação:

- Para obtermos grandezas como a energia total da eq. 2.46, que constituem somas sobre todas as partições de um sistema, usaremos a técnica de *redução de soma*, ou *scan*, como é denominada na literatura de Ciência da Computação.<sup>83</sup> A ideia principal é que cada thread guarde resultados parciais de interações entre subdomínios e o Campo local. Chegando ao fim desse processo, os threads acumulam seus resultados num vetor auxiliar  $P$ , que tem a dimensão de um block. Agora, queremos que cada thread some dois dos valores em  $P$  e armazene o resultado de volta no próprio  $P$ . Como cada thread combina duas entradas em uma, completamos esse passo com metade das entradas de  $P$  com a qual começamos. Esse processo continua por no máximo  $\text{Log}_2(\text{dim}(P))$  passos até possuímos a soma de cada elemento em um único endereço de  $P$ . Como essa é uma decisão arbitrária de nossa parte, iremos sempre fixar o tamanho de um block como um número que seja potência de 2. Por exemplo, se usarmos 512 threads como o tamanho de um block, são necessárias 9 iterações desse processo apenas, para reduzir os 512 elementos parciais de  $P$  em uma única soma.
- Para obtermos os Campos efetivos locais em si, em particular os termos de precessão

giromagnética da equação LLG, iremos utilizar uma modificação do *método de N-corpos* descrito na referência,<sup>91</sup> usado comumente para simulações qualitativas de efeitos gravitacionais, e outras interações qualitativas de curto e longo alcance (especialmente em jogos eletrônicos). A vantagem desse algoritmo é que não realiza nenhuma aproximação sobre o caráter de longo alcance em si, não introduzindo cortes na interação, e também não usa um método de Campos médios para obter o resultado. Ou seja, o algoritmo converge com  $\mathcal{O}(N^2)$  interações para o valor do Campo total. Mesmo com essa ordem, mostraremos que esse cálculo acaba por ser mais eficiente do que uma aproximação menos robusta em um programa serial. Outras aproximações como o *Fast Multipole Method* (FMM)<sup>11,34,85</sup> serão benéficas para certos sistemas, mas em nossa escala de trabalho alcançamos uma excelente relação de custo computacional/benefício numérico já a partir da versão menos sofisticada.

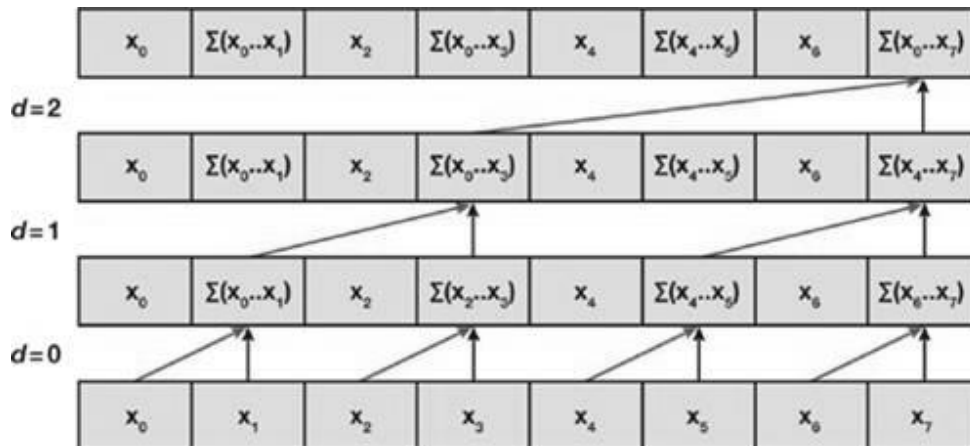
## Redução de Soma

Para obtermos, por exemplo, a energia de troca atômica (eq. 2.23) do sistema em uma dada configuração, associamos a cada thread uma sêxtupla  $(x, y, z, m_x, m_y, m_z)$  com a posição e a intensidade de cada momento magnético em nosso sistema (de  $N$  elementos), e copiamos esses dados para a memória shared (integralmente, num caso ideal, ou decompostos em um sistema de filas, em geral), e a seguir obtemos, para cada thread, as seguintes grandezas (constantes omitidas):

$$A_i = \sum_j \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (4.2)$$

Agora temos um conjunto de tamanho  $N$  com valores parciais da energia (interações de cada  $i$  com os demais  $j$ ), mas note que esse conjunto está subdividido entre os threads, e os threads só se comunicam entre si dentro de um block. Para realizar a redução de soma, devemos definir e ocupar cada thread em um block com um desses valores parciais, e então somar cada um desses termos para obtermos o resultado *por block*. Realizamos a soma por pares para nos aproveitarmos do paralelismo e obter a eficiência máxima possível para o algoritmo, como na figura 18. Para grades regulares e periódicas o mesmo método de redução poderia ser usado para se calcular o Campo magnetostático via *Fast Fourier Transform* (FFT) e somas de Ewald.<sup>85,92</sup> Porém, estamos construindo um método que seja geral o suficiente para tratar também de contornos não periódicos e com geometria curva arbitrária, e assim sendo não iremos nos usar de técnicas com FFT. A redução em um código pode ser feita da seguinte forma:

Figura 18 – Esquematização da redução de soma para um vetor de 7 posições.



Fonte: CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming (2010).

Nota: A cada iteração de operações paralelas indicadas por  $d$ , metade dos elementos considerados são somados simultaneamente e acumulados no próprio vetor em uma ordem de  $\mathcal{O}(\log_2 7)$  operações.

```

cache[threadIdx.x] = temp_;
__syncthreads();
int u = blockDim.x/2;
while(u != 0){
    if (threadIdx.x < u){
        cache[threadIdx.x] += cache[threadIdx.x + u];
    }
    __syncthreads();
    u /= 2;
}
if (threadIdx.x == 0) epot_[blockIdx.x] = cache[0];

```

A variável `temp` acima representa os valores parciais definidos na eq. 4.2. Observe que, entre o preenchimento dos threads em um block, e entre cada soma parcial em paralelo, devemos *sincronizar* todos os threads via a operação `syncthreads`. Essa operação garante que não haja concorrência no acesso entre diferentes threads a um mesmo endereço da memória, efetivamente “pulando” uma soma e subestimando o valor total da energia. Após todas as somas serem realizadas, o valor da energia parcial por block é guardado em um vetor que possui o tamanho do grid (i.e todos os blocks). Poderíamos a princípio somar todos esses valores na GPU e encontrar a energia total, mas note que usaríamos apenas um thread por block para realizar esse cálculo, e como mencionado antes, todos os

demais por Warp seriam executados sem processar nada da mesma forma. Esses threads “inutilizados” poderiam estar operando em outras rotinas como o cálculo da precessão giromagnética, simultaneamente ao cálculo da energia. Portanto, após obter o valor por block, copiamos esse vetor para a CPU e realizamos a soma final sequencialmente, com um ganho de eficiência nas demais funções do programa, o que também promove *Latency Hiding*.

Ao invés da estrutura de threads em um block como acima, poderíamos também nos usar das chamadas operações de *Warp shuffle*. Um Warp Shuffle é uma operação “atômica” com respeito à GPU, no sentido em que permite que os threads dentro de um mesmo Warp se comuniquem entre si durante a execução de um programa com latência quase nula.<sup>93</sup> A vantagem disso é que, como um Warp (sem divergência) é executado por um SM de forma completamente simultânea, não precisamos sincronizar os threads dentro de um Warp. Podemos realizar operações de Warp que sobrepõe o valor de  $n$  threads pelos seus vizinhos, em qualquer ordem desejada. De toda maneira, esses algoritmos são completamente equivalentes, ambos com a mesma ordem de  $\mathcal{O}(\log_2(N))$  operações, e uma utilização apropriada do primeiro método será praticamente tão boa quanto o segundo, mesmo com a sincronização envolvida.<sup>84</sup> Vamos exemplificar com a energia de troca na expressão 4.2, em formato “mínimo”, i.e, um código que funciona de fato e otimizado apenas para essa função:

```
//Calcula a energia da interacao de troca via memoria shared
__global__ void potential_energy(int atoms, double *x_, double *y_, double
    *z_, double *epot_, double *mx_, double *my_, double *mz_){
int n = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
__shared__ double cache[512];
double temp_ = 0.0;
while(n < atoms){
//Salvamos as variaveis da memoria global em registros de cada thread
double mx = mx_[n];
double my = my_[n];
double mz = mz_[n];
double mBx = 0.0, mBy = 0.0, mBz = 0.0;
epot_[blockIdx.x] = 0.0;
//Calculo das energias por sitio
for(int j = 0; j < atoms; j++){
mBx = mx * mx_[j];
mBy = my * my_[j];
mBz = mz * mz_[j];
```

```

temp_ += mBx + mBy + mBz;
}
n += blockDim.x * gridDim.x;
}
cache[threadIdx.x] = temp_;
__syncthreads();
int u = blockDim.x/2;
while(u != 0){
    if (threadIdx.x < u){
        cache[threadIdx.x] += cache[threadIdx.x + u];
    }
    __syncthreads();
    u /= 2;
}
if (threadIdx.x == 0) epot_[blockIdx.x] = cache[0];
}

```

```

//Calcula a energia da interacao de troca via operacoes de Warp Shuffle
__global__ void potential_energy2(int atoms, double *x_, double *y_, double
    *z_, double *epot_, double *mx_, double *my_, double *mz_, double Bx_,
    double By_, double Bz_){
int n = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
__shared__ double cache[32];
double temp_ = 0.0;
while(n < atoms){
double mBx = 0.0, mBy = 0.0, mBz = 0.0;
double mx = mx_[n];
double my = my_[n];
double mz = mz_[n];
epot_[blockIdx.x] = 0.0;
for(int j = 0; j < atoms; j++){ //Calculo das energias por sitio
mBx = mx * mx_[n];
mBy = my * my_[n];
mBz = mz * mz_[n];
temp_ += mBx + mBy + mBz;
}
n += blockDim.x * gridDim.x;
}
}

```

```

int laneid = threadIdx.x \% warpSize;
int warpid = threadIdx.x / warpSize;
int u;
for(u = warpSize/2; u > 0; u /= 2){
    temp_+= shfl_down(temp_, u);
}
//Repare que nao precisamos de sincronia acima
if(laneid == 0) cache[warpid] = temp_;
__syncthreads();
temp_ = (threadIdx.x < blockDim.x / warpSize) ? cache[laneid] : 0;
if(warpid == 0){
for(u = warpSize/2; u > 0; u /= 2){
    temp_+= shfl_down(temp_, u);
}
}
if (threadIdx.x == 0) epot_[blockIdx.x] = temp_;
}

```

## Método de N-Corpos

Podemos pensar no método de N-Corpos como calcular cada parcela das interações de longo alcance, de cada momento magnético, em uma matriz  $N \times N$  envolvendo todas as interações entre pares. Então o Campo resultante  $\mathbf{H}_i$  no sítio  $i$  é obtido como soma de todas as entradas em uma linha  $i$  dessa matriz. Como podemos a princípio obter cada elemento da matriz independentemente, temos uma ordem de  $\mathcal{O}(N^2)$  operações a serem paralelizadas. Observe porém, que uma paralelização completa desse processo iria exigir uma *memória* ocupada proporcional também à  $\mathcal{O}(N^2)$ , assim limitando nosso processamento em paralelo pela ocupação proibitiva da memória.

O pacote VAMPIRE, por exemplo, mesmo empregando uma aproximação nas interações de longo alcance, ainda consegue alcançar níveis de ocupação da memória proporcionais a 30GB nos casos de estruturas maiores ( $\sim 10^6$  momentos), ao alcançar o paralelismo diretamente através do armazenamento de cada interação de pares na memória.<sup>89</sup> De maneira geral, uma tática possível para se aliviar o tempo de processamento de um problema é transformando-o num problema equivalente que seja intenso no sentido de armazenamento de dados para verificações posteriores. Assim podemos escolher entre soluções “*time intensive*” que exigem taxas de processamento excessivas ou “*memory intensive*” que exigem taxas de armazenamento excessivas mas possibilitam a checagem



rápida de resultados parciais pré-estabelecidos. Nossa implementação não irá sacrificar nenhum lado e assim minimizar igualmente tanto a intensidade de processamento de dados quanto o armazenamento, buscando chegar ao custo-benefício ideal e portanto bem adaptado para a solução de problemas gerais, em todos os tamanhos de domínios espaciais e escalas temporais.

Portanto, iremos serializar parte das operações, afim de reutilizar parcialmente os dados, e atingir a performance máxima não só com relação às unidades aritméticas como também reduzindo a alta taxa de memória necessária. Seja um *tile* dado por uma submatriz  $p \times p$  de nosso problema original. Com  $2p$  sêxtuplas de um sítio atômico  $(x, y, z, m_x, m_y, m_z)$ , podemos então calcular todas as  $p^2$  interações entre pares no tile (sendo que, caso tenhamos alguma simetria entre as interações,  $p$  delas podem ser usadas novamente). Para acelerar os cálculos, as sêxtuplas referentes a um tile podem ser armazenadas na memória shared. O efeito dessas interações em um tile contribui com o Campo efetivo de longo alcance de  $p$  corpos diferentes.

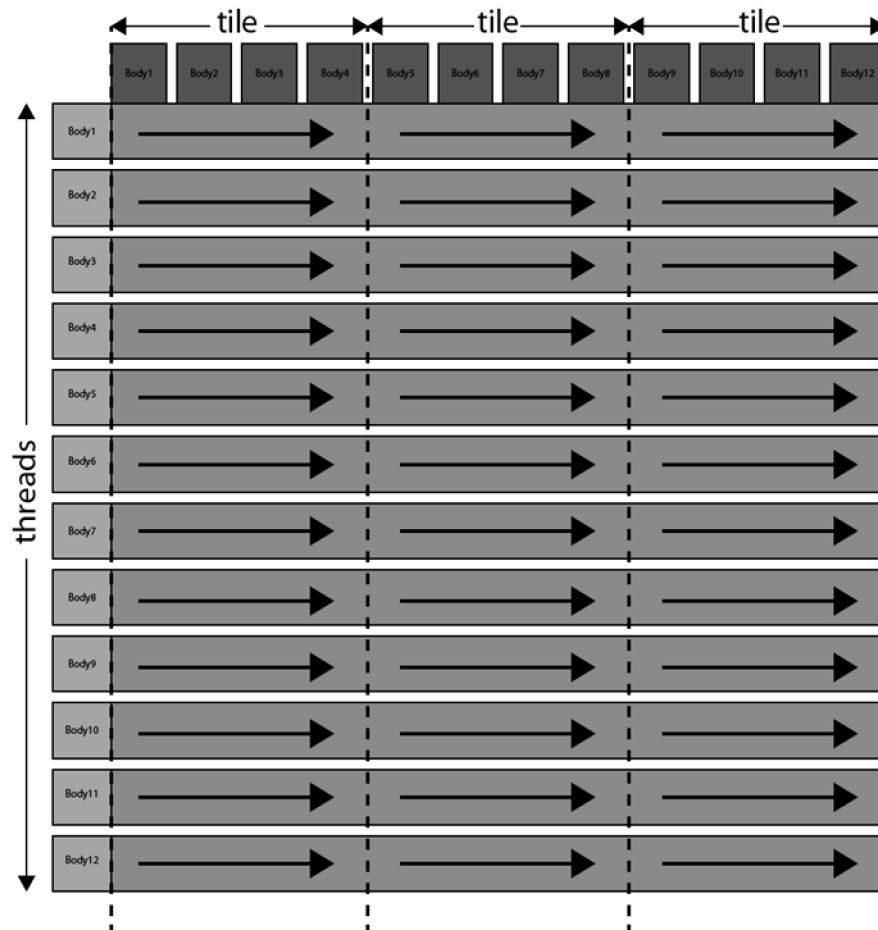
Uma maneira de se reutilizar os dados de maneira apropriada é ordenar os cálculos em um tile de maneira que suas colunas sejam avaliadas sequencialmente (i.e em um thread) e suas linhas sejam calculadas em paralelo (em threads diferentes), chegando ao esquema matricial da figura 19.

Assim sendo, seguimos o seguinte protocolo para calcular os termos de Campo efetivo:

- Primeiro, calculamos as interações entre pares  $i$ , e  $j$  em um tile, sendo que os índices “ $i$ ” são calculados em paralelo, e os índices “ $j$ ” são calculados serialmente para cada  $i$ .
- Após isso, calculamos o resultado de um tile, atualizando o valor da intensidade de Campo magnetostático como resultado da interação de um corpo com  $p$  outros. Carregamos  $p$  descrições de sítios micromagnéticos da memória global da GPU para a memória shared que cada thread possui. Cada thread em um block então avalia  $p$  interações sucessivas, e isso gera os resultados do tile. Carregamos o próximo tile, e repetimos o processo.

O grau de paralelismo do nosso método é dado pelo número de linhas em um tile, e este deve ser grande o suficiente para que um número grande de Warps possam ser alternados entre os SMs, novamente promovendo *Latency Hiding* durante o cálculo das interações. A reutilização de dados, por sua vez, é dada pelo número de colunas, e esse parâmetro também governa a taxa de transferência de memória entre global e shared. Em geral, um tile determina também nossa ocupação das memórias shared de cada núcleo

Figura 19 – Esquematização do método de N-Corpos.



Fonte: NVidia GPU gems (2004).

Nota: Todas as linhas são executadas em paralelo, com uma sincronização entre Tiles. As colunas representam os passos serializados em que reutilizamos os dados.

(que são muito menores em capacidade do que a global). Entre cada cópia de um novo tile para a memória shared, devemos sincronizar as operações para não perder nenhuma contribuição de pares em nossos cálculos.

Para avaliarmos as interações através de todo o grid, basta alocarmos os blocks de acordo com a memória disponível fisicamente. Como há  $p$  threads por block e um thread por sítio de momento magnético, o número de threads por blocks necessário para calcular as interações em todos os  $N$  corpos é  $N/p$ , definindo um grid que possui esse tamanho. O resultado é um total de  $N/P$  threads, cada uma realizando independentemente  $N$  operações, totalizando a complexidade computacional de  $\mathcal{O}\left(\frac{N^2}{P}\right)$  operações, onde  $P$  é o número de threads totais ativos em uma etapa de Tile da matriz na fig. 19.

Uma otimização possível a esse modelo original, em problemas com um número muito pequeno de partículas, seria aumentar o número de threads associados a um único

momento magnético, pois para  $N$  muito pequeno teríamos pouca proporção de todos os threads disponíveis sendo utilizados. Observe que, como os threads serão executados de toda forma, um número não múltiplo de  $p$  de momentos magnéticos, i.e.  $(N/p)$  não inteiro irá apresentar problemas de acessos proibidos de memória, e devemos lidar com essas regiões de excesso subtraindo essa contribuição fantasma de nossos cálculos.

## 4.5 Lista de Vizinhos

Como nossos momentos magnéticos são bem localizados em sítios atômicos, podemos conhecer a priori todas as relações de primeiros vizinhos entre cada momento, assim construindo uma lista de vizinhos para obter as interações de troca. A lista, similar ao que se faz em dinâmica molecular,<sup>82,94</sup> consiste em uma matriz esparsa  $N \times M$ , onde  $N$  é o número de sítios e  $M$  é o número de vizinhos relativos a cada sítio, de acordo com algum critério de distância. Podemos eliminar os elementos nulo e vetorizar a matriz para que tenha a seguinte forma:

$$A_{nm} = \{A_{11}, A_{12}, A_{13}, \dots, A_{21}, A_{22}, A_{23}, \dots, A_{N1}, A_{N2}, A_{N3}, \dots\} \quad (4.3)$$

Em que o primeiro índice representa o sítio, e o segundo os vizinhos deste. Com apenas um outro vetor auxiliar (chamado *threshold*, no que segue), indicando o início de cada troca de índice de sítio, podemos alcançar o paralelismo trivialmente. A lista pode ser construída no início do programa - inclusive serialmente, pois no caso micromagnético não precisamos refazê-la - e consultada sempre que desejarmos obter as interações de troca no sistema. Segue um exemplo de código funcional para obtê-la, assim como um código paralelo simples para utilizá-la no cálculo da energia de troca em um sistema:

```
//Constroi uma lista de primeiros vizinhos, facilmente extensivel ao caso
  geral de K vizinhos
void reallocable_list(void){
int sum = 0, sum2 = 0;
int s = 0, w = 0;
double x2 = 0, y2 = 0, z2 = 0, rij2 = 0;
  for(s = 0; s < N; s++){
    threshold[s] = sum2;
    for(w = 0; w < N; w++){
      if(w != s){
        x2 = x[s] - x[w];
```

```

    y2 = y[s] - y[w];
    z2 = z[s] - z[w];
    rij2 = sqrt(x2*x2 + y2*y2 + z2*z2);
    if(rij2 <= parametro_de_rede){
        sum++;
        sum2++;
        new_viz = (int*) realloc (viz, sizeof(int)*sum2);
        if(new_viz != NULL){
            viz = new_viz;
            viz[sum2 - 1] = w;
        }
        else{
            puts("Error allocating new memory block");
            exit (1);
        }
    }
    rij2 = 0.0;
}
}
n_viz[s] = sum;
sum = 0;
}
size_t size_list = sum2 * sizeof(int);
cudaMalloc((void*)&dev_viz, size_list);
cudaMemcpy(dev_viz, viz, size_list, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(dev_nviz, n_viz, N*sizeof(int), cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(dev_threshold, threshold, N*sizeof(int), cudaMemcpyHostToDevice);
printf("\nSize of neighbor list:\%d \n", sum2);
}
//Utiliza a lista de primeiros vizinhos para obter a energia de troca em um
sistema
__global__ void potential_energy(int atoms, double *x_, double *y_, double
    *z_, double *epot_,int *viz_, int *n_viz_, double *mx_, double *my_,
    double *mz_, int *threshold){
int n = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
double temp_ = 0.0;
__shared__ double cache[512]; //o tamanho dos blocks nesse exemplo foi
    escolhido 512 threads!
while(n < atoms){
int j1 = 0, w = 0;

```

```

double mxx_ = 0.0;
double myy_ = 0.0;
double mzz_ = 0.0;
double mx = mx_[n];
double my = my_[n];
double mz = mz_[n];
epot_[blockIdx.x] = 0.0;
int w_ = n_viz_[n];
int offset = threshold[n];
    for(w = 0; w < w_; w++){
        j1 = viz_[offset + w];
        mxx_ = mx * mx_[j1];
        myy_ = my * my_[j1];
        mzz_ = mz * mz_[j1];
        temp_ += mxx_ + myy_ + mzz_;
    }
n += blockDim.x * gridDim.x;
}
cache[threadIdx.x] = temp_;
__syncthreads();
int u = blockDim.x/2;
while(u != 0){
    if (threadIdx.x < u){
        cache[threadIdx.x] += cache[threadIdx.x + u];
    }
    __syncthreads();
    u /= 2;
}
if (threadIdx.x == 0) epot_[blockIdx.x] = cache[0];
}

```

Podemos também realizar a mesma construção para as interações magnetostáticas de longo alcance: armazenando todas as  $\frac{N(N-1)}{2}$  distâncias entre sítios envolvidas no sistema, diminuindo em muito o número de cálculos redundantes em uma dada simulação. Observe porém, que isso requer uma ordem de  $\mathcal{O}(N^2)$  elementos de memória para serem armazenados, e as memórias shared da GPU em geral não possuem essa capacidade. Mesmo que usemos a própria memória da CPU (o que é possível na maioria dos clusters), os tempos de transferência de memória iriam sobrecarregar todos os threads e teríamos efetivamente uma lentidão maior do que calculando as distâncias novamente em cada

passo. Os pacotes citados nesse trabalho, quando não tratam o caráter de longo alcance com truncamentos, utilizam esse sistema de lista para as interações de longo alcance via o método de *replicação de dados*, ou seja, associando todas as informações do sistema para cada processador.<sup>95</sup> Isso anula um dos propósitos de nosso paralelismo (simular problemas em larga escala) pois, não estando mais limitados pelo tempo de duração dos cálculos, agora estaríamos limitados ao tamanho da memória de nossa plataforma. Portanto, nesse trabalho utilizamos uma lista apenas de primeiros vizinhos, e calculamos integralmente as interações anisotrópicas em todos os passos, assim otimizando o problema tanto em intensidade de processamento quanto de memória.

## 4.6 Discretização Espacial de Domínios Magnéticos

A ligação entre a teoria micromagnética apresentada nesse trabalho e qualquer implementação numérica em potencial que se baseie na física da magnetização, é realizada através da comparação da escala de distâncias entre pontos da grade da fig. 12 e o tamanho característico dos domínios magnéticos da eq. 2.20. Essa comparação por sua vez é feita através da interação de troca, pois nas menores escalas a tendência de alinhamento induzida pela mesma sempre prevalece sobre os demais termos da energia  $\mathcal{E}$  definida na eq. 2.46. Na prática gostaríamos que nossa grade discreta possuía resolução o suficiente para distinguir as regiões de transição entre domínios, pois nessa escala é onde ocorrem os fenômenos relativos à formação de cargas topológicas e também aos efeitos relacionados aos Campos externos utilizados em aplicações.

O tamanho médio dos domínios magnéticos é então sempre dado por uma razão entre a densidade linear da interação de troca (a rigidez de troca  $A$ ) e a densidade de energia do Campo mais intenso no sistema capaz de promover não-homogeneidades, punindo o alinhamento a partir de dadas distâncias, na forma:

$$\lambda \sim \sqrt{\frac{A}{K_{eff}}} \quad (4.4)$$

Em que  $K_{eff}$  é a densidade de energia do termo de Campo não-homogêneo mais intenso presente no sistema.

Por exemplo, no caso de materiais com baixa espessura (e.g filmes finos, nanofios), que também possuem uma anisotropia magnetocristalina muito fraca (eq. 2.38), a transição entre os domínios se dá por uma rotação suave no plano da superfície dos próprios domínios - pois isso minimiza a criação de cargas magnéticas superficiais (eq. 2.35) que aumentariam a energia magnetostática do sistema. Nesses casos, o comprimento médio dos domínios,

chamado de *comprimento de troca*, equivale a:

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

Ou seja, em intervalos típicos de distância  $\lambda_{ex}$ , a mediação entre a interação de troca e o campo desmagnetizante passa a permitir uma transição entre domínios magnéticos com diferentes direções e funções indicadoras  $\chi_V$ . Analogamente, a eq. 4.5 expressa que a magnetização sofre uma rotação média uniforme e suave de  $\pi\lambda_{ex}$  quando transita totalmente entre dois domínios diferentes. Paredes de domínio onde o caráter magnetostático domina seus comprimentos médios são denominadas paredes do tipo *Nèel*.<sup>96</sup>

Já no caso de uma anisotropia cristalina intensa de eixo fácil ou plano fácil, de maneira que os momentos magnéticos se alinhem perpendiculares ao plano onde estão os domínios, a formação de cargas superficiais faz com que a rotação entre domínios aconteça também perpendicularmente, criando as chamadas paredes do tipo *Bloch*. A rotação de  $\pi\delta_{ex}$  equivalente nesse caso é dada através do chamado *parâmetro de Bloch*:

$$\delta_{ex} = \sqrt{\frac{A}{\mathcal{K}}} \quad (4.6)$$

$$\mathcal{K} = \frac{1}{N} \sum_i^N K_{e_i}$$

Em que os  $K_{e_i}$  são as densidades de energia da expansão polinomial para as anisotropias cristalinas, definidas nas eqs. 2.38 e 2.39. Note que sistemas com paredes de Bloch também possuem um comprimento de troca, porém a intensidade maior da anisotropia nesses sistemas faz com que  $\delta_{ex} < \lambda_{ex}$ , o que significa que a quebra de homogeneidade é dominada pela anisotropia em detrimento do Campo magnetostático. Também seria possível definirmos um comprimento característico de domínios mediados pela interação de Dzyaloshinskii-Moryia da eq. 2.44, mas para a maioria dos sistemas essa interação é bem menos intensa do que as demais e o comprimento resultante é maior do que os de Bloch e de troca.<sup>56</sup> Assim sendo, em nossas simulações devemos sempre tomar os tamanhos da grade de diferenças finitas como  $a_0 < (\lambda_{ex}, \delta_{ex})$  a fim de obtermos resolução apropriada dos domínios magnéticos.

Além dos comprimentos característicos, o outro fator restritivo para o tamanho das células de trabalho é a adaptação da geometria original do sólido que desejamos estudar. Nos remetendo novamente à figura 12, podemos ver que certas características da curvatura das estruturas originais (um círculo e uma esfera) não são reproduzidos pela versão discretizada. Porém, conforme  $a_0 \rightarrow 0$ , esses desvios também diminuem e a estrutura discretizada se aproxima cada vez mais da curvatura real.

Para células cúbicas por exemplo, sólidos retangulares são bem adaptados para a geometria por definição. Já no caso esférico, as seções transversais circulares de uma esfera de raio  $r$  podem ser sucessivamente aproximadas em uma rede quadrada por octágonos se tomando os pontos que melhor simulam alguma característica do círculo, e.g o perímetro, a área, a curvatura, etc., ou se tomando pontos que correspondam a uma rede quadrada que esteja circunscrita dentro do círculo ou tal que o círculo esteja circunscrito dentro da rede. A escolha depende do nosso interesse em particular, e o método exemplificado, assim como vários outros podem ser encontrados em referências como.<sup>97</sup>

Nesse trabalho sempre modelamos as bordas considerando a rede cúbica discreta que melhor se encaixa nas medidas de comprimentos de arco do sólido original, e.g seja uma esfera de raio  $R$ , e pontos  $(x, y, z)$  ordenados em uma rede cúbica via  $n(x, y, z)$  ( $a_0 = |n(x, y, z) - n(x', y', z')|$ , para coordenadas  $(x', y', z')$  dos primeiros vizinhos de  $(x, y, z)$ ). A borda discretizada dessa estrutura será dada por:

$$\partial V_{discr} = \left\{ \min \left( \|n_i(x, y, z)\|, \|n_j(x', y', z')\| \right) \mid \|n\| - R \leq a_0 \right\} \quad (4.7)$$

para  $i = (0, 1, \dots, N_1), j = (0, 1, \dots, N_2)$

Onde o bulk foi gerado de maneira que  $\|n\| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R$ . Ou seja, a primeira porção da esfera discreta gerada está circunscrita na original. Na eq. 4.7,  $N_1$  é o total de células de superfície da primeira porção gerada, e  $N_2$  o total respectivo de primeiros vizinhos para cada  $i$ , resultando em bordas como na seção transversal da fig. 20.

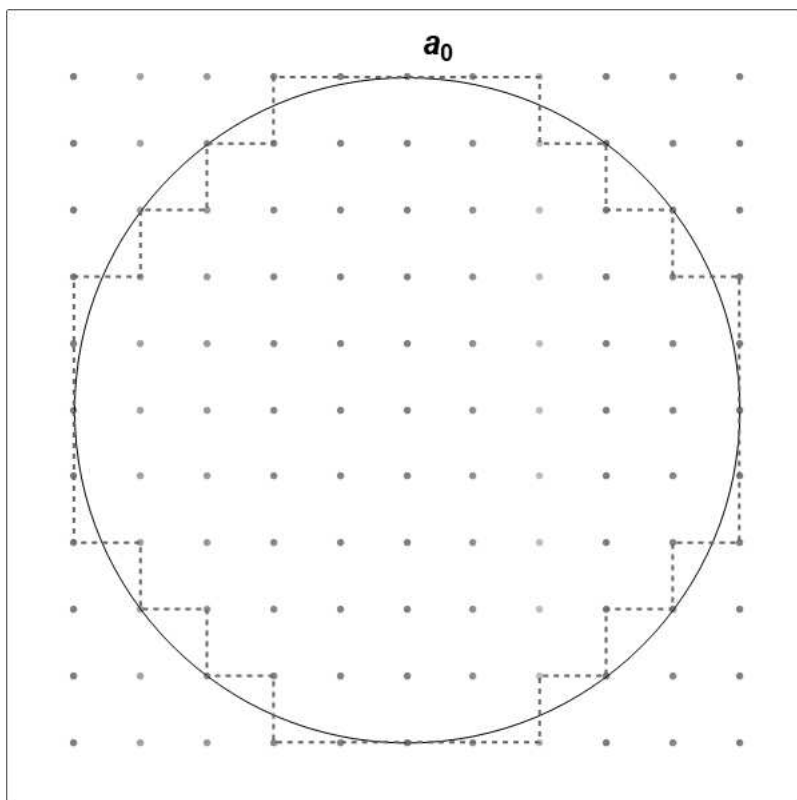
Em geral, Buscamos pontos próximos da superfície original pretendida no sentido em que:

$$|(n(x', y', z') - \mathcal{L}(x, y, z))| \leq \epsilon \in \mathbb{R} \quad (4.8)$$

Em que  $\mathcal{L}(x, y, z)$  agora são as coordenadas de uma superfície geral no espaço - que não necessariamente coincidem com as da grade discreta  $n$ , que por sua vez inclui um bulk circunscrito em  $\mathcal{L}$  e os primeiros vizinhos do mesmo. Então escolhemos os menores valores dentre esses pontos, comparando sítios do sólido discreto circunscrito no original, com seus vizinhos mais próximos, resultando numa generalização da eq. 4.7 em que  $\|n\| \rightarrow \mathcal{L}$ . Idealmente gostaríamos de escolher  $a_0$  tal que possamos escolher  $\epsilon \ll 1$ . No entanto, também queremos  $a_0$  grande o suficiente para não perdermos a vantagem numérica em se tratar os domínios usando a teoria micromagnética. Caso  $a_0$  seja grande, devemos aumentar nossa proposta de  $\epsilon$  proporcionalmente para que nenhuma porção da curvatura real fique sem nenhum ponto  $n(x, y, z)$  que cumpra a eq. 4.8.



Figura 20 – Seção transversal da esfera e discretização.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Em linha sólida a seção contínua, com a versão discretizada com borda  $\partial V_{discr}$  em linhas rachadas, e pontos da rede cúbica explicitados. Note que a esfera correspondente ao bulk (i.e onde consideramos apenas os pontos circunscritos no círculo) não seria uma aproximação tão boa da curvatura pretendida, e por isso consideramos também adicionar os primeiros vizinhos desse bulk que estejam mais próximos do círculo.

Em estruturas com bordas retangulares é seguro assumirmos  $\epsilon \approx (\lambda_{ex}, \delta_{ex})$ , mas para grande parte das curvaturas um valor menor é necessário para obtermos resolução apropriada da curvatura na borda  $\partial V_{discr}$ , o que é importante para modelarmos corretamente os efeitos quirais induzidos em superfícies ferromagnéticas. Estimativas para  $\epsilon$  dependem principalmente da formação de cargas magnéticas superficiais como na energia desmagnetizante da eq. 2.35, de maneira que sistemas com momentos magnéticos fortemente acoplados nos planos tangentes da própria superfície implicam em  $\epsilon$  mais próximo dos comprimentos característicos  $\lambda$ .<sup>98</sup>

Uma interpretação intuitiva disso pode ser vista na definição para o comprimento característico  $\lambda$ : caso não haja nenhuma anisotropia normal à superfície, o Campo induzido pela curvatura local será relativamente pequeno, pois as direções de alinhamento irão coincidir no geral com as direções que minimizam a carga superficial  $\sigma = \mathbf{M} \cdot \hat{n}$ . No caso de uma anisotropia normal intensa porém, o Campo efetivo não-homogêneo será maior

para os pontos na superfície, fazendo com que domínios magnéticos na borda de um sólido curvo sofram transições mistas entre seguir a curvatura e seguir o bulk, resultando em escalas menores do que no bulk apesar de serem o mesmo material.<sup>65,99</sup> Esse aumento de Campos não-homogêneos devido à curvatura pode ser aproveitado para aplicações, como por exemplo técnicas de *magnetic patterning*.<sup>98</sup>

Portanto, de maneira heurística, podemos esperar de uma mesma superfície  $\mathcal{L}$ , que para sistemas com anisotropia intensa e normal à superfície da borda seja necessário propor  $\epsilon < (\lambda_{ex}, \delta_{ex})$  e conseqüentemente um  $a_0$  mais baixo do que a transição esperada entre domínios num plano, enquanto em sistemas com caráter magnetostático mais intenso seja razoável assumirmos  $\epsilon \approx (\lambda_{ex}, \delta_{ex})$ .

## 4.7 Discretização Temporal da Dinâmica Micromagnética

A discretização da evolução temporal de um sistema magnético equivale a aplicar um método que permita a integração sucessiva da equação LLG em 2.47. Isso depende diretamente da maneira como decidimos aproximar as derivadas da eq. LLG (tanto temporais como de Campo efetivo). Podemos decompor o intervalo total de duração de uma simulação,  $[0, t_{end}] \subset \mathbb{R}$ , visando solucionar a eq. LLG em  $l$  subintervalos de tamanho  $\Delta t_i$  (que podem ou não serem do mesmo tamanho), tais que  $t_{end} = \sum_{i=1}^l \Delta t_i$ . A partir disso, a magnetização discreta  $\mathbf{m}(\mathbf{r}_k, t_i)$  só é definida em pontos específicos  $\mathbf{r}_k$  da nossa grade de diferenças finitas, escolhidos com distâncias  $a_0$  como na seção anterior, e para instantes de medição específicos  $t_i$ .

Nesses casos o operador diferencial  $d/dt$  da eq. LLG em 2.47 não pode ser definido da forma usual e devemos substituí-lo por algum operador em diferenças adequado, que use somente os pontos existentes na nossa grade. Na forma explícita da eq. LLG (mostrada no apêndice B) a equação LLG pode ser reescrita como um problema de valor inicial:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{dt} &= \mathbf{f}(\mathbf{m}) \\ \mathbf{m}(\mathbf{r}, 0) &= \mathbf{m}_0 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Onde  $\mathbf{f}(\mathbf{m})$  é o termo de torque que atua sobre a magnetização e  $\mathbf{m}_0$  a condição inicial do sistema. Esse operador diferencial para t contínuo pode ser aproximado no ponto

da grade  $t_n$  pelo *operador diferença*:<sup>34,85</sup>

$$\left[ \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right]_n := \frac{\mathbf{m}(t_{n+1}) - \mathbf{m}(t_n)}{\Delta t_n} \quad (4.10)$$

Simplemente se omitindo o limite na definição da derivada. Aqui,  $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$  é o próximo ponto da grade ao lado direito de  $t_n$ . Uma expansão de Taylor da função  $\mathbf{m}$  no ponto  $t_{n+1}$ , dada por:

$$\mathbf{m}(t_n + \Delta t_n) = \mathbf{m}(t_n) + \Delta t_n \frac{d\mathbf{m}}{dt}(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t_n^2) \quad (4.11)$$

Implica em um "erro de discretização" de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t_n)^1$  para aproximação da primeira derivada. Portanto, se o tamanho do passo temporal  $\Delta t_n$  for reduzido pela metade, pode-se esperar que o "erro" causado pela discretização também será reduzido pela metade.<sup>11</sup> De maneira alternativa, podemos aproximar o operador diferencial da eq. 4.9 no ponto da grade  $t_n$  pelo *operador diferença central*:

$$\left[ \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right]_n^{central} := \frac{\mathbf{m}(t_{n+1}) - \mathbf{m}(t_{n-1})}{2\Delta t_n} \quad (4.12)$$

A expansão de Taylor até segunda ordem nos pontos  $t_{n+1}$  e  $t_{n-1}$  para esse caso fornece um erro de discretização de  $\mathcal{O}(\Delta t_n^2)$  para a primeira derivada da função  $\mathbf{x}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(t_n + \Delta t_n) &= \mathbf{m}(t_n) + \Delta t_n \frac{d\mathbf{m}}{dt}(t_n) + \frac{1}{2} \Delta t_n^2 \frac{d^2\mathbf{m}}{dt^2}(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t_n^3) \\ \mathbf{m}(t_n - \Delta t_n) &= \mathbf{m}(t_n) - \Delta t_n \frac{d\mathbf{m}}{dt}(t_n) + \frac{1}{2} \Delta t_n^2 \frac{d^2\mathbf{m}}{dt^2}(t_n) - \mathcal{O}(\Delta t_n^3) \\ \Rightarrow \left[ \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right]_n^{central} &= \frac{2\Delta t_n \frac{d\mathbf{m}}{dt}(t_n) + 2\mathcal{O}(\Delta t_n^3)}{2\Delta t_n} \\ &= \frac{d\mathbf{m}}{dt}(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t_n^2) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Diferenças para derivadas de ordem maior podem ser obtidas se tomando mais termos na expansão de Taylor para  $\mathbf{m}$ , enquanto aproximações de ordem maior em  $\Delta t_n$  sem alterar a ordem da derivada podem ser obtidos se tomando mais pontos da grade de evolução temporal. Uma análise geral de métodos para erros locais e globais de aproximações em diferenças finitas podem ser encontrados no apêndice A. A aplicação do

<sup>1</sup> A relação  $f(N) = \mathcal{O}(N^n)$  significa que, para uma função  $f$ , o valor  $f(N)/N^n$  é limitado para  $N \rightarrow \infty$ .

operador diferença mais básico da eq. 4.10 na eq. 4.9 por exemplo, resulta no chamado método de Euler explícito:

$$\begin{aligned}\mathbf{m}(t_{n+1}) &= \mathbf{m}(t_n) + \Delta t_n \mathbf{f}(\mathbf{m}(t_n)) \\ t_n &= t_0, \dots, t_{end} \\ \mathbf{m}(t_0) &= \mathbf{m}_0\end{aligned}\tag{4.14}$$

Em que  $\mathbf{f}(\mathbf{m})$  é avaliado também na grade espacial discretizada escolhida conforme a seção anterior, com as derivadas dos Campos associados à eq. 2.46 calculadas de maneira análoga. O método de Euler explícito faz parte da classe de métodos explícitos de *Runge-Kutta* ou RK,<sup>82</sup> onde aqui "explícito" se refere ao fato de que as variáveis num tempo  $t_{n+1}$  dependem apenas daquelas em tempos  $t_{n < n+1}$ , em contraste com os métodos implícitos onde há dependências temporais no próprio instante seguinte onde desejamos aproximar as equações de precessão.

Seja  $\mathbf{m}(t_n) = \mathbf{m}_n$  e o torque da eq. LLG dado por  $\mathbf{f}(t, \mathbf{m})$ . No geral, métodos RK são dados pela expressão:

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_{n+1} &= \mathbf{m}_n + \Delta t_n \sum_j \beta_j \mathbf{k}_j \\ \mathbf{k}_j &= \mathbf{f}\left(t_n + \delta_j \Delta t_n, \mathbf{m}_n + \Delta t_n \left(\sum_{k < j} \gamma_{jk} \mathbf{k}_k\right)\right)\end{aligned}\tag{4.15}$$

Onde os coeficientes  $\beta_j, \gamma_{jk}, \delta_j$  definem a ordem do método.<sup>82</sup> os resultados parciais  $\mathbf{k}$  são computados em sequência a partir de  $k = 0$ , e a condição  $k < j$  no somatório é o que caracteriza esses métodos como explícitos. Métodos RK são opções populares devido à sua simplicidade e caráter direto de implementação, no entanto não são a escolha ideal para a eq. LLG.

Para observarmos isso, vamos tomar o método de Euler na eq. LLG explícita (RK com  $\beta_0 = 1, \delta_0 = 0$ ):

$$\mathbf{m}_{n+1} = \mathbf{m}_n + \Delta t_n \mathbf{m}_n \times \left( -\frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \mathbf{H}_e(\mathbf{m}_n) + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \mathbf{m}_n \times \mathbf{H}_e(\mathbf{m}_n) \right)\tag{4.16}$$

Vamos verificar a propriedade fundamental de preservação da norma da magnetização, da eq. 2.48, como feito para o caso contínuo no apêndice B, tomando a norma

quadrática da equação anterior:

$$|\mathbf{m}_{n+1}|^2 = |\mathbf{m}_n|^2 + \Delta t_n^2 \left| \mathbf{m}_n \times \left( -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} \mathbf{H}_e(\mathbf{m}_n) + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \mathbf{m}_n \times \mathbf{H}_e(\mathbf{m}_n) \right) \right|^2 \quad (4.17)$$

$$\Rightarrow \mathbf{m}_{n+1} \geq \mathbf{m}_n$$

Como podemos ver, a condição de preservação da norma  $|\mathbf{m}_{n+1}| = |\mathbf{m}_n|$  só é válida para o caso estático  $d\mathbf{m}/dt = 0$ . A eq. 4.17 também continua válida para qualquer método RK de ordem arbitrária.<sup>100</sup> Portanto, é comum em implementações de pacotes de simulação micromagnética se forçar a preservação da magnetização através de uma renormalização após cada passo temporal  $t_n$ :

$$\mathbf{m}_{n+1} \rightarrow \frac{\mathbf{m}_{n+1}}{|\mathbf{m}_{n+1}|} \quad (4.18)$$

Note que a aparente preservação da norma quando introduzimos a eq. 4.18 como passo complementar só reduz a violação da condição original sem eliminá-la, e ainda por cima introduzem não-linearidades na equação LLG que não fazem parte do modelo contínuo, alterando assim o espaço de configuração ao qual a grade de diferenças finitas corresponde.<sup>85,92</sup> Ainda há a dificuldade em que devemos recalcular o torque  $\mathbf{f}$  um número  $k$  de vezes por passo, a depender da ordem  $k$  do método escolhida, o que significa  $k$  cálculos da interação magnetostática de longo alcance.

Uma maneira de amenizar esses problemas é se introduzindo um passo  $\Delta t_n$  que varie com o erro de integração, tal que o mesmo seja fixado abaixo de um valor pequeno o suficiente para não exagerar a quebra da norma na eq. 4.17. Caso o erro ultrapasse o nosso mínimo estipulado, o passo temporal é refeito com um  $\Delta t_n$  menor e estimado de acordo com as derivadas de ordem maior do que a ordem usada para a aplicação do método RK em si.<sup>88</sup> Essa diminuição do passo temporal também é meramente paliativa, além de aumentar o custo computacional em se obter medidas em tempos mais longos.

O outro problema no uso de métodos explícitos é que equações como a LLG possuem uma estrutura *numericamente instável*.<sup>85</sup> Em equações diferenciais com termos que possuem ordens de grandeza muito distintas nas variáveis independentes (e.g na LLG, temos  $\gamma \gg \alpha$  e  $|E_{ex}| \gg |E_d|$ ), métodos explícitos falham em convergir para uma solução a menos que os passos de integração sejam extremamente pequenos, e equações com essa característica são denominadas *rígidas*.<sup>82,85</sup>

Equações ríguas podem ser solucionadas de forma mais eficiente através de métodos implícitos, i.e que incluem a avaliação do torque  $\mathbf{f}$  no próprio passo  $t_{n+1}$  na integração. A estabilidade absoluta desses integradores é bem conhecida na matemática aplicada,<sup>11,85,90</sup>

no sentido em que passos  $\Delta t_n$  significativamente maiores ainda irão convergir corretamente para a solução (no entanto, veremos em breve que  $\Delta t_n$  ainda é limitado pela grade espacial). Um exemplo de método implícito é o método do ponto médio:

$$\mathbf{m}_{n+1} = \mathbf{m}_n + \Delta t_n \mathbf{f}\left(t_n + \frac{\Delta t_n}{2}, \frac{1}{2}(\mathbf{m}_n + \mathbf{m}_{n+1})\right) \quad (4.19)$$

Métodos numéricos desse tipo devem ser solucionados a partir de alguma técnica iterativa ou transcendental (método de Newton, aproximação do ponto fixo, etc.). Essa iteração, por exemplo numa solução direta da eq. 4.19, introduz um novo índice no problema. Vamos propor uma solução iterativa para a eq. 4.19:

$$\mathbf{m}_{n+1,k+1} = \mathbf{m}_n + \Delta t_n \mathbf{f}\left(t_n + \frac{\Delta t_n}{2}, \frac{1}{2}(\mathbf{m}_n + \mathbf{m}_{n+1,k})\right) \quad (4.20)$$

Onde o torque  $\mathbf{f}$  é avaliado usando a  $k$ -ésima aproximação de  $\mathbf{m}_{n+1}$ . Note que isso é diferente de adaptar  $\Delta t_n$  dentro de uma faixa de erro pois este não muda durante a iteração, e note também que o valor de  $\mathbf{m}_n$  do passo “real” anterior é preservado durante todo o processo.

Devido à estabilidade garantida pelo método implícito, a iteração vai convergir para qualquer proposta inicial de  $\mathbf{m}_{n+1,0}$ . Se usando o erro absoluto  $\epsilon_{abs}$  e o erro relativo  $\epsilon_{rel}$ , um critério usual de convergência é dado por:<sup>94</sup>

$$|\mathbf{m}_{n+1,k+1} - \mathbf{m}_{n+1,k}| < \epsilon_{abs} + \epsilon_{rel} \cdot |\mathbf{m}_{n+1,k}| \quad (4.21)$$

Infelizmente, estimar os erros associados com a solução exata é uma análise limitada e, mesmo quando isso é possível, não existe maneira de se determinar quantas iterações são necessárias para convergência. Usualmente escolhemos dentre duas opções, 1) definir um  $\epsilon_a$  novo para substituir a parte direita da eq. 4.21, estimando a partir da média dos termos anteriores em  $k$  e seu desvio, ou 2) usar um número fixo de iterações, buscando um chute inicial apropriado para que isso seja possível.

Para a opção 2), um meio computacionalmente barato e extremamente eficiente de se obter um chute inicial adequado para a iteração em cada passo temporal, é se usar um método explícito para encontrar  $\mathbf{m}_{n+1,0}$  e prosseguir com a iteração usando o método implícito da eq. 4.20. Um integrador que se usa de um passo explícito inicial (chamado preditor) para ser introduzido na solução iterativa de um integrador implícito (chamado corretor), é denominado *integrador preditor-corretor* ou PC.

No exemplo da regra do ponto médio, podemos iniciar um passo com o método de Euler, que apesar de instável, é usado apenas como chute inicial para o método PC:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{n+1,0} &= \mathbf{m}_n + \Delta t_n \mathbf{f}(t_n, \mathbf{m}_n) \\ \mathbf{m}_{n+1,k>0} &= \mathbf{m}_n + \Delta t_n \mathbf{f}\left(t_n + \frac{\Delta t_n}{2}, \frac{1}{2}(\mathbf{m}_n + \mathbf{m}_{n+1,0 < k' < k})\right) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Dependendo da escolha do nosso método preditor, o passo continua limitado em  $\Delta t$ , e uma possibilidade é utilizar um método de ordem maior, o que pode ser eficiente mesmo se sabendo que o erro local total ainda estará limitado pela ordem do corretor (mas esse será mais estável quanto ao tamanho do passo permitido, ver apêndice A). Um dos principais resultados do nosso trabalho será demonstrar um integrador PC que seja mais adequado para simular as propriedades da eq. LLG, principalmente a preservação da norma da magnetização  $\mathbf{m}$ , que mesmo na eq. 4.22 ainda necessitaria de um passo adicional de renormalização após a iteração.

## 4.8 A Condição de Courant-Friedrichs-Lewy

Em 1928, Courant, Friedrichs e Lewy demonstraram uma relação geral entre intervalos espaciais e temporais na implementação de um método de integração em uma grade discreta. Para entendermos o problema, imagine uma onda se propagando no espaço, onde só temos acessos a medições em intervalos discretos de tempo e a pontos específicos de uma grade espacial. Com essas restrições, uma medição da amplitude da onda só será bem sucedida se a duração da medida for menor do que o tempo em que a onda passa por dois pontos adjacentes na grade espacial. Consequentemente, se a distância entre pontos da grade espacial é reduzida, também o intervalo temporal de medições deve ser diminuído de acordo.

Vamos fazer uma derivação simples para o caso da equação linear de convecção em uma dimensão da função  $u(x, t)$ :<sup>101</sup>

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (4.23)$$

Em que  $v$  é a magnitude da velocidade de propagação. Por se tratar da convecção de uma grandeza numa direção específica, vamos aproximar as derivadas nas grades temporal e espacial com o método de Euler. Sejam os pares de índice  $(i, n)$  correspondentes aos

pontos  $(x_i, t_n)$  das grades discretas que compõem a função  $u_i^n$ , e sejam todos os pontos separados igualmente por  $(\Delta x, \Delta t)$ . Temos então:

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{v}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_i^n) &= 0 \\ u_i^{n+1} &= u_i^n + v \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i+1}^n) \end{aligned} \quad (4.24)$$

A quantia  $C = v \frac{\Delta t}{\Delta x}$  é chamada de *número de Courant* e sua forma específica (mas não seu significado) varia de acordo com o método, sendo a da eq. 4.24 referente ao método de Euler em ambas as grades. Em palavras, o número de Courant é uma grandeza adimensional que expressa a quantia de informação que se propaga (com velocidade característica  $v$ ) através de uma célula computacional (com extensão  $\Delta x$ ) durante um passo temporal (de duração  $\Delta t$ ).<sup>94,101</sup>

No caso acima, se  $C > 1$ , teríamos uma propagação da informação - que na equação de difusão equivale a  $\Delta u_{i,i+1}^n$  - através de mais do que uma única célula  $\Delta x$  em cada passo temporal  $\Delta t$ . Isso significa que a integração temporal da eq. 4.24 não possuiria resolução temporal o suficiente para registrar as interações locais entre pontos adjacentes da grade espacial, logo a solução apresentada não representará a física do problema na melhor das hipóteses, e irá simplesmente divergir no pior caso.

O número de Courant máximo  $C_{max}$  para que um método de integração numérica seja convergente, no sentido de que o domínio numérico da simulação contenha todo o domínio físico do problema, é o que determina a condição CFL. Na equação LLG em três dimensões, ela é dada por:<sup>102</sup>

$$C = \Delta t \sum_{i=1}^3 \frac{v_{r_i}}{\Delta r_i} \leq C_{max} \quad (4.25)$$

Em que  $C_{max} \approx 1$  para métodos RK, e ilimitado para métodos implícitos (no entanto tais métodos continuam limitados por um número indeterminável de iterações).<sup>101</sup> As velocidades características  $v_{r_i}$  de propagação de informação da eq. LLG em cada direção são uma função de  $(\alpha, \beta, \gamma)$  de acordo com a presença ou não de correntes externas e amortecimento apreciável (apêndice B). Na prática porém, o maior coeficiente para a maior parte dos problemas é sempre a razão giromagnética  $\gamma \sim 10^{11} (Ts)^{-1}$ . Considerando essa ordem de grandeza como taxa de propagação, e um tamanho de rede discretizada de  $\sim 5nm$ , estaríamos limitados por passos temporais de no máximo  $10^{-10}s$  para a maior parte dos integradores comumente utilizados. É importante observar que a condição CFL é *necessária* para estabilidade, mas não suficiente, de maneira que outras restrições podem



impor vínculos ainda mais severos sobre o tamanho do passo temporal. De toda forma essa é uma boa partida para escolha de parâmetros de simulação.

De maneira contraintuitiva, uma forma de se aumentar a estabilidade de um método segundo a eq. 4.25 e ainda permitir passos temporais eficientes para simulações longas, é aumentando  $\Delta \mathbf{r}$  e, portanto, diminuindo a resolução das regiões de transição entre domínios magnéticos. Como também estamos restritos dentro de parâmetros fisicamente relevantes na escolha da grade espacial, essa relação custo-benefício se torna um problema de otimização para o par  $(\Delta t, \Delta \mathbf{r})$ . Imediatamente podemos apontar que escolher uma rede uniforme tanto no espaço quanto no tempo, i.e  $\Delta t_n = \Delta t, \Delta \mathbf{r}_i = \Delta \mathbf{r} \quad \forall (n, i)$ , já facilita na prevenção de falhas locais na resolução dos domínios magnéticos com relação a propagação da sua evolução temporal para os demais pontos da grade.

Essa análise é importante, por exemplo, na simulação da dinâmica de skyrmions, onde fenômenos de interação de cargas topológicas com descontinuidades acontecem em escalas ultrarrápidas de  $\Delta t < 10^{-12}s$ , enquanto fenômenos de transporte de cargas topológicas através de superfícies suaves se passam em escalas tipicamente muito mais longas, de  $\Delta t \sim 10^{-9}s$ . Portanto devemos ter em mente não só o sistema de interesse, mas também o tipo de fenômeno que desejamos simular e suas escalas de propagação de informação.

## 5 Micromagnetismo Implementado em Paralelo

*"A method is more important than a discovery, since the right method will lead to new and even more important discoveries."*

Lev Davidovich Landau

Nesse capítulo iremos apresentar o esforço central dessa tese, isso é, a formulação de uma metodologia original, mais computacionalmente vantajosa do que as disponíveis, e especialmente também com alto grau de generalidade para a simulação de estruturas magnéticas em escala mesoscópica, através do micromagnetismo.

### 5.1 A Hamiltoniana Micromagnética

A energia do modelo micromagnético na formulação integral da eq. 2.46 possui mínimos definidos a partir do vínculo de preservação da norma do Campo  $\mathbf{m}$ :

$$\min(\mathcal{E}(\mathbf{m})) \quad | \quad \|\mathbf{m}(\mathbf{r})\| = 1 \quad (5.1)$$

Como  $\mathbf{m}$  é diferenciável em todo o espaço, os mínimos irão coincidir com os pontos onde o funcional  $\delta\mathcal{E} = 0$ , definido através de:<sup>49</sup>

$$\delta\mathcal{E} = \int_V \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\mathbf{m}} \cdot \nu_0 d\mathbf{r} + \int_{\partial V} \mathbf{C}(\mathbf{m}) \cdot \nu d\mathbf{S} \quad \forall \quad (\nu, \nu_0) \in (V, V^0) \quad (5.2)$$

Em que  $V^0$  é o espaço das funções de teste  $\nu_0$ , que se anulam na borda  $\partial V$  do volume da amostra com magnetização  $\mathbf{m}$ , e  $V$  o análogo para funções de teste definidas apenas na borda,  $\nu$ . O termo  $\mathbf{C}(\mathbf{m})$  representa condições de contorno que dependem do termo da energia  $\mathcal{E}$  considerado. A presença dessa integral de contorno mostra que, em geral, o conhecimento da derivada funcional de  $\mathcal{E}$  não é suficiente para solucionar o problema de minimização da energia dada pela eq. 2.46. Também é mostrado por Brown,<sup>42</sup> que a mesma integral de contorno aparece na formulação dinâmica que leva à eq. LLG em 2.47.

O tratamento contínuo do contorno, assim como do vínculo micromagnético da eq. 5.1, pode ser feito via multiplicadores de Lagrange ( $\lambda, \mu$ ) para o volume e a borda da amostra, respectivamente, através do funcional dado por:

$$\mathcal{E}_L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = \mathcal{E}(\mathbf{m}) + \int_V \lambda(\mathbf{r}) \cdot (\|\mathbf{m}\|^2 - 1) d\mathbf{r} + \int_{\partial V} \mu(\mathbf{r}) \cdot (\|\mathbf{m}\|^2 - 1) d\mathbf{S} \quad (5.3)$$

Tomando agora funções de teste ( $\nu_0, \nu$ ) como antes e fazendo a variação  $\delta\mathcal{E}_L = 0$ , encontramos as seguintes condições de minimização da energia:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} \times \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\mathbf{m}} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{m} \times \mathbf{C} &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.4)$$

A primeira condição, como esperado pelo equilíbrio, é válida somente no caso estacionário de alinhamento do Campo local efetivo com a própria magnetização. Já a segunda condição, referente ao contorno do material, deve ser válida para todos os tempos mesmo fora do equilíbrio.<sup>42</sup>

Na implementação numérica como descrita no capítulo anterior, devemos ser capazes de discretizar as contribuições do Campo local efetivo assim como as condições de contorno de maneira similar às derivadas temporais da equação LLG. Vamos exemplificar derivando o Campo efetivo local para a energia de troca  $E_{ex}$  da eq. 2.30:

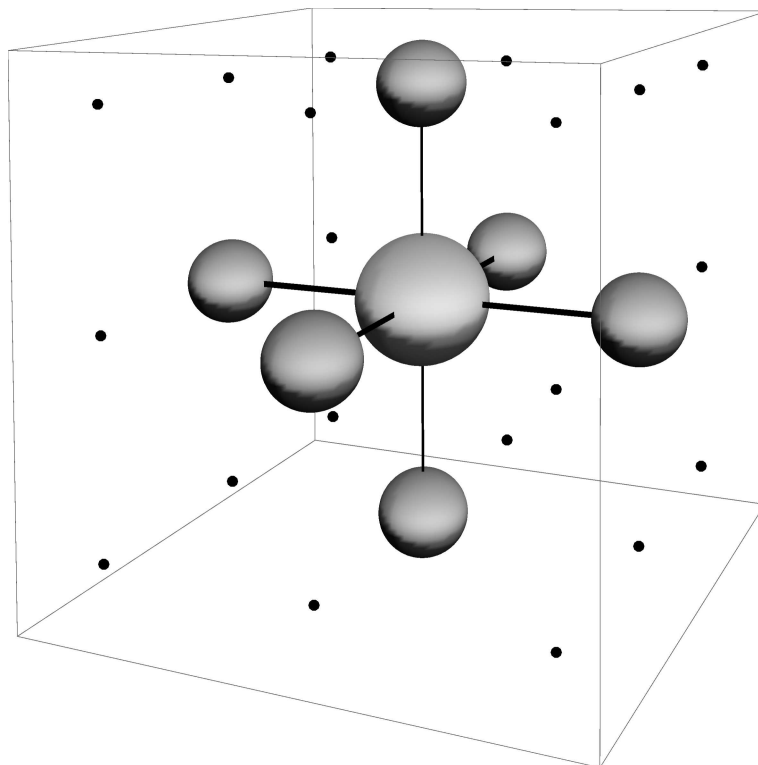
$$\begin{aligned} \delta E_{ex} &= \frac{d}{d\epsilon} \left( \int_V A [\nabla(\mathbf{m} + \epsilon\nu_0)]^2 d\mathbf{r} \right) \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \int_V (-2\nabla \cdot (A\nabla\mathbf{m})) \cdot \nu_0 d\mathbf{r} + \int_{\partial V} \left( 2A \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial n} \right) \cdot \nu dS \end{aligned} \quad (5.5)$$

Em que  $\mathbf{n}$  é a direção normal à borda  $\partial V$ . A partir dessa expressão podemos identificar a componente (ainda não adimensional) do Campo efetivo local, assim como o termo de contorno, em comparação direta com a eq. 5.2:

$$\begin{aligned} \frac{\delta E_{ex}}{\delta\mathbf{m}} &= -2\nabla \cdot (A\nabla\mathbf{m}) = -2A\nabla^2\mathbf{m} \\ \mathbf{C} &= 2A \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial n} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Onde assumimos  $A$  constante. Tanto para implementações numéricas visando a minimização da energia via a eq. 5.4 quanto para a dinâmica da magnetização da eq. 2.47,

Figura 21 – Stencil de 7 pontos usando os primeiros vizinhos de sítio em uma rede cúbica discreta.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Observe que o uso de dois vizinhos por direção fornece o mesmo grau de aproximação de uma diferença central.

precisamos discretizar as derivadas espaciais relacionadas à expressão 5.6 (assim como nas demais contribuições de energia), usando algum operador diferença como os definidos nas eqs. 4.10 e 4.12, porém estendidos para as 3 dimensões espaciais.

Vamos supor que discretizamos o espaço em uma rede cúbica como mostrado no último capítulo, com espaçamento regular  $a_0$ , volume de célula  $a_0^3$ , e com momento magnético  $\mathbf{m}_i$  definido no ponto central de cada célula. Para o caso do termo de Campo efetivo local, o método mais usado na maioria dos pacotes disponíveis é o *stencil* com 7 pontos, referentes a um sítio de momento magnético  $\mathbf{m}_i$  e seus seis primeiros vizinhos, como na fig. 21. Utilizando diferenças simples na segunda derivada com respeito a cada sítio adjacente  $\mathbf{m}_j$ ,  $j = \pm x, \pm y, \pm z$ , obtemos uma discretização do Laplaciano somando todos os termos:

$$\nabla^2 \mathbf{m}(\mathbf{r}_i) \approx \frac{\mathbf{m}_{+x} + \mathbf{m}_{-x} + \mathbf{m}_{+y} + \mathbf{m}_{-y} + \mathbf{m}_{+z} + \mathbf{m}_{-z} - 6\mathbf{m}_i}{a_0^2} \quad (5.7)$$

Essa aproximação é da ordem de  $\mathcal{O}(a_0^2)$ , tendo assim um erro equivalente a uma

diferença central em todas as direções ortogonais do espaço. Em contraste, para momentos magnéticos da borda, precisamos discretizar de acordo com a condição de contorno dada pela eq. 5.4, lembrando que a mesma deve ser válida para todos os tempos. Considerando o termo de troca temos a seguinte relação:

$$\mathbf{m} \times 2A \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad \forall t \iff \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad \forall t \quad (5.8)$$

Em que usamos o fato de que as derivadas espaciais da magnetização são sempre ortogonais à mesma devido ao vínculo de preservação da norma (Apêndice B), e assim sendo a eq. 5.8 só é nula no caso em que a derivada em si for anulada.

Agora não podemos aproximar a derivada por um stencil devido à quebra de simetria de translação da estrutura. Também não possuímos informação o suficiente sobre pontos na direção  $\mathbf{n}$  para calcular a derivada direcional de nenhuma outra maneira adequadamente, pois a estrutura é limitada aos pontos da grade de diferenças finitas definidos pela eq. 4.8.

A solução desse problema na maioria dos pacotes é feita através da definição de células virtuais externamente adjacentes à borda efetiva  $\partial V_{discr}$  da rede cúbica. O valor da magnetização  $\mathbf{m}_i^v$  em cada sítio virtual é obtido a partir das próprias condições de contorno. No exemplo da eq. 5.8, podemos usar uma derivada central com relação à célula virtual definida e o vizinho do sítio  $\mathbf{m}_i$  oposto no mesmo eixo dado por  $\mathbf{m}_j$ :

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} \approx \frac{\mathbf{m}_i^v - \mathbf{m}_j}{2a_0} = 0 \implies \mathbf{m}_i^v = \mathbf{m}_j \quad (5.9)$$

Uma vez estabelecidos os valores de células virtuais  $\mathbf{m}_i^v$ , podemos aproximar as derivadas nos pontos  $\mathbf{m}_i$  referentes ao contorno com o mesmo stencil da eq. 5.7 sem nenhum outro tipo de tratamento especial. Apesar de empregada com muita frequência, com sucesso em sistemas onde o comportamento da magnetização no contorno não é o foco da análise, podemos enumerar a seguir dois problemas da abordagem da eq. 5.9.

Primeiramente, quando múltiplos termos de energia são combinados na eq. 2.46, as respectivas contribuições para o Campo de contorno  $\mathbf{C}$  devem ser adicionadas na condição  $\mathbf{m} \times \mathbf{C} = 0$ . Isso pode tornar a determinação da magnetização de células virtuais não trivial, inclusive adicionando valores de magnetização virtuais resultantes de equações não lineares em nossa grade discreta, prejudicando também a acurácia da integração numérica como mostrado no capítulo anterior. Quando adicionamos o termo de energia do Campo de Dzyaloshinskii-Moriya por exemplo (eq. 2.44), chegamos a uma condição de contorno

Figura 22 – Esquema de células virtuais para implementação das condições de contorno da eq. 5.2.

m{1, 4}	m{2, 4}	m{3, 4}	m{4, 4}
m{1, 3}	m{2, 3}	m{3, 3}	m{4, 3}
m{1, 2}	m{2, 2}	m{3, 2}	m{4, 2}
m{1, 1}	m{2, 1}	m{3, 1}	m{4, 1}

m{1, 4}	m{2, 4}	m{3, 4}	m{4, 4}
m{1, 3}	m{2, 3}	m{3, 3}	m{4, 3}
m{1, 2}	m{2, 2}	m{3, 2}	m{4, 2}
m{1, 1}	m{2, 1}	m{3, 1}	m{4, 1}

Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: No primeiro caso (esquerda), as células virtuais (mais claras) são tomadas pela vizinhança de sítios da grade de diferenças finitas, possuindo apenas um sítio vizinho. No caso de uma curvatura que não segue a geometria da grade (direita), algumas células virtuais são vizinhança local de mais de um sítio na grade.

que depende também da direção perpendicular à interface entre materiais  $\mathbf{n}'$ :<sup>61</sup>

$$2A \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} - D(\mathbf{n}' \times \mathbf{n}) \times \mathbf{m} = 0 \quad (5.10)$$

O outro problema, mais crítico, tem a ver com as propriedades da grade de diferenças finitas em si. Note que em expressões como 5.10 e 5.9 a magnetização das células virtuais irá depender da vizinhança imediata da magnetização nos sítios de borda. Em particular, gostaríamos que o “contorno virtual” resultado da aplicação de células virtuais ao redor de toda a rede discreta, fosse definido de forma unívoca e se referisse à vizinhança da magnetização na borda sem ter o seu valor aproximado alterado dependendo da direção na qual a derivada é tomada. É possível que esse seja o caso porém, quando simulamos estruturas com alguma curvatura não retangular como na fig. 20.

Para uma curvatura assim, em geral teremos células virtuais que possuem borda com mais de um ponto efetivo da grade de diferenças, e que devem se referir à diferentes direções de interação. Na fig. 22 podemos ver o contraste entre células virtuais que se referem a um único sítio da borda ou a mais de um simultaneamente. No caso contínuo essa diferença não é surpreendente, pois pontos distintos do contorno  $\partial V$  naturalmente irão possuir vizinhanças infinitesimais separadas no espaço. É no caso discreto porém em que a região localmente relacionada à borda pode se estender a mais de um ponto da grade.

Nada garante que o sistema composto pela condição de contorno aplicada em ambas as células vizinhas ao sítio virtual terá uma única solução. No entanto, nossa hipótese micromagnética exige que o Campo local interno à célula seja uniforme e que o momento magnético resultante possua um valor e direção bem definidos. Assim sendo, o método de células virtuais de contorno é mais adequado para geometrias de célula que se encaixam exatamente na geometria global do volume  $V$  do material a ser simulado, não possuindo generalidade apreciável quanto ao tipo de estruturas que podemos considerar.

Para a metodologia específica de diferenças finitas, podemos solucionar ambos os problemas, substituindo a expressão 2.46 para a energia por uma Hamiltoniana inteiramente derivada no espaço discreto  $\mathbb{D}(\mathbb{R}^3)$  de pontos espaçados regularmente em distâncias  $a_0$ , mas que seja equivalente à discretização do modelo micromagnético construído até agora.

Normalmente seria necessário uma reformulação completa do modelo em termos da mecânica analítica discreta, usando o princípio variacional discreto demonstrado por Marsden.<sup>100</sup> No entanto, podemos nos usar do fato de que o micromagnetismo já possui uma relação direta com um modelo discreto, i.e o modelo de Heisenberg da eq. 2.23. Uma expressão similar ao modelo de Heisenberg para os  $\mathbf{m}_i$  da grade discreta já terá as condições de contorno naturalmente assimiladas ao modelo, como veremos a seguir.

Seja  $\{\mathbf{m}(\mathbf{r}_i) | i \in \mathbb{N}\}$  o conjunto de magnetizações definidos ponto a ponto na grade de diferenças finitas com distâncias  $a_0$  como na fig. 12. Cada índice  $i$  define no espaço uma célula com volume  $a_0^3$  cujos centros são as posições  $\mathbf{r}_i$  onde se localizam os momentos magnéticos. Todos os Campos internos aos volumes das células (troca, magnetostático, Zeeman, anisotropias, etc.) são considerados uniformes dentro de cada volume. Com essa hipótese, vamos tomar um modelo para a interação entre cada célula com a mesma forma funcional da eq. 2.23, com a consideração adicional de que  $J_{ij} = J_c \quad \forall(i, j)$ :

$$H_{ex}^c = -J_c \sum_{\langle j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \quad (5.11)$$

Em que  $J_c$  é a integral de troca efetiva entre vizinhos, que são sítios de Campo em uma grade discreta e não atômicos. Para que a equação 5.11 tenha validade, devemos mostrar que existe um valor de  $J_c$  para o qual ela é equivalente a alguma discretização da eq. 2.30. Primeiramente, vamos observar que o quadrado da norma de Frobenius no termo de troca pode ser escrito como (demonstrado em<sup>100</sup>):

$$(\nabla \mathbf{m})^2 = \text{Tr} [(\nabla \mathbf{m})^\dagger (\nabla \mathbf{m})] = |\nabla m^x|^2 + |\nabla m^y|^2 + |\nabla m^z|^2 \quad (5.12)$$

Sem perda de generalidade, vamos considerar um ponto da grade na origem  $\mathbf{m}(\mathbf{0}) = \mathbf{m}_i$  com vizinhos  $\mathbf{m}(\pm a_0 \hat{\mathbf{i}}) = \mathbf{m}_{\pm x}$ ,  $\mathbf{m}(\pm a_0 \hat{\mathbf{j}}) = \mathbf{m}_{\pm y}$ ,  $\mathbf{m}(\pm a_0 \hat{\mathbf{k}}) = \mathbf{m}_{\pm z}$ . Para essa

célula, a energia de troca pode ser aproximada por diferenças simples (de ordem mais baixa) com respeito aos seus vizinhos. Note que, como  $\sqrt{|\partial_i m^i|^2} = \pm \partial_i m^i$ , vamos considerar diferenças em ambas as direções propositalmente e somá-las à energia:

$$\begin{aligned}
E_{ex}^c &\approx Aa_0^3 \left( \left| \frac{\mathbf{m}_{+x} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 + \left| \frac{\mathbf{m}_{-x} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 \right. \\
&\quad + \left| \frac{\mathbf{m}_{+y} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 + \left| \frac{\mathbf{m}_{-y} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 \\
&\quad \left. + \left| \frac{\mathbf{m}_{+z} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 + \left| \frac{\mathbf{m}_{-z} - \mathbf{m}_i}{a_0} \right|^2 \right) \\
&= Aa_0 \left( |\mathbf{m}_{+x}|^2 + |\mathbf{m}_{-x}|^2 + |\mathbf{m}_{+y}|^2 + |\mathbf{m}_{-y}|^2 + |\mathbf{m}_{+z}|^2 + |\mathbf{m}_{-z}|^2 + 6|\mathbf{m}_i|^2 \right. \\
&\quad \left. - 2\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_{+x} + \mathbf{m}_{-x} + \mathbf{m}_{+y} + \mathbf{m}_{-y} + \mathbf{m}_{+z} + \mathbf{m}_{-z}) \right) \\
&= Aa_0 \left( 12 - 2\mathbf{m}_i \cdot \sum_{\langle j \rangle} \mathbf{m}_j \right) \\
&= 2Aa_0 \left( 6 - \sum_{\langle j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \right)
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Aqui, usamos que  $|\mathbf{a} - \mathbf{b}|^2 = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 - 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ , o fato de que  $|\mathbf{m}_i|^2 = 1 \quad \forall i$ , e também a uniformidade dos Campos no interior da célula para que a integral seja simplesmente a multiplicação pelo volume  $a_0^3$ .

Escrita assim, a expressão final da eq. 5.13 tem exatamente a forma funcional da energia de troca  $H_{ex}^c$ , a menos de um termo constante de referência que pode ser tomado como nulo. Em comparação direta das eqs. 5.11 e 5.13 então, chegamos em  $J_c = 2Aa_0$  como o valor da interação de troca entre células que torna válida a Hamiltoniana micromagnética. O erro dessa aproximação é equivalente ao stencil de 7 pontos da figura 21 sendo de  $\mathcal{O}(a_0^2)$ , pois como notado no capítulo anterior, obtemos aproximações de grau maior para uma derivada de uma certa ordem tomando-se mais pontos da vizinhança em torno de onde a derivada é considerada.

A energia total de uma grade de diferenças nesse modelo será dada por:

$$H_{ex} = -\frac{J_c}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \tag{5.14}$$

Em que a energia deve ser dividida por 2 pois agora todos os pares de vizinhos serão considerados duas vezes por uma troca dos índices  $i \rightarrow j$ . Agora podemos estabelecer a vantagem na implementação desse método. Seja a equação LLG discretizada no espaço,



para cada sítio  $i$ , dada por:

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\gamma\mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i + \alpha\mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} \quad (5.15)$$

Como  $H_{ex}$  é uma Hamiltoniana discreta escrita como um somatório, o Campo efetivo local tem a forma mais simples de uma indução magnética  $\mathbf{B}_i$ , que também deve ser uniforme dentro do volume da célula.  $\mathbf{B}_i$  é uma indução em um sentido formal, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} H_{ex}^c &= U_i = -\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_i \\ \iff \mathbf{B}_i &= J_c \sum_{\langle j \rangle} \mathbf{m}_j \\ \implies \mathbf{B}_i &= -\frac{\partial H_{ex}}{\partial \mathbf{m}_i} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Em outras palavras, o Campo local efetivo atuando sob uma célula micromagnética é uma derivada direcional simples da Hamiltoniana, sem a necessidade da derivada funcional tomando espaços de função de teste como na eq. 2.46. Em particular, note que a integral efetiva  $J_c = 2a_0A$  já tem unidades de energia, onde antes a expressão contínua para o Campo local de troca carregava apenas a rigidez  $A$  com unidades de densidade de energia, indicando o caráter de distribuições de  $E_{ex}$ . Agora nossa condição de contorno também está implícita no modelo, uma vez que naturalmente não há vizinhos que contribuem com a variação local do Campo nas direções  $\mathbf{n}$  perpendiculares à borda. O sistema, para todos os efeitos, é modelado como um conjunto de momentos magnéticos que interagem com interações efetivas que são similares às atômicas em formulação, mas reescaladas de acordo com as hipóteses do micromagnetismo. Precisamos agora derivar a forma das interações para os demais Campos locais apresentados.

Para o caso magnetostático, no modelo clássico de Heisenberg, os mediadores interagentes são os momentos magnéticos  $\boldsymbol{\mu}$  da eq. 2.1. Como demonstrado tanto no eletromagnetismo de Maxwell como na mecânica quântica,<sup>15,16</sup> esses momentos se comportam como dipolos em torno dos sítios atômicos e seu Campo efetivo local tem a forma:

$$\mathbf{B}_{dip}(\mathbf{r}_i) = \sum_j \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ 3(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} - \boldsymbol{\mu}_j \right] \quad (5.17)$$

Na eq. 5.17 todos os  $j \neq i$  devem ser considerados devido ao caráter de longo alcance. Para derivarmos uma expressão equivalente para o Campo local (e uniforme) numa célula micromagnética de lado  $a_0$ , devemos levar em conta que os  $\boldsymbol{\mu}_i$  não coincidem exatamente com a direção dos operadores de spin  $\mathbf{S}_i$  da interação de troca, e nem são

unitários, com um módulo específico em unidades de magneton de Bohr de acordo com  $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{J}$ .

O momento magnético total em uma única célula é dado pela eq. 2.22, pois vale a hipótese micromagnética de alinhamento dentro do volume  $a_0^3$ , de modo que  $\mathbf{M}_i = M_s V \mathbf{m}_i = a_0^3 M_s \mathbf{m}_i$ . Dessa forma, vamos propor uma Hamiltoniana na forma:

$$\begin{aligned} H_{dip} &= - \sum_i U_i = - \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_{dip}^i \\ &= \frac{1}{2} \frac{\mu_0 M_s^2 a_0^6}{4\pi} \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{r_{ij}^3} [\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})] \\ &= D_c \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{r_{ij}^3} [\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})] \end{aligned} \quad (5.18)$$

Na eq. 5.18 dividimos novamente a energia total por um fator 2 para contabilizar a repetição de todas as interações de pares possíveis no somatório duplo. Note que não existe conflito entre a representação do momento magnético das células possuir tanto a contribuição de troca (que vem dos spins) quanto a contribuição magnetostática (que vem de momentos induzidos), pois nossa definição de momento magnético se refere à todas as partes de momento angular do sistema que reagem a uma indução magnética externa; porém, a coincidência de direções  $\mathbf{m}_i$  para as duas energias só é válida graças à própria hipótese da eq. 2.19, i.e, somente dentro do volume de cada célula o momento magnético *por célula* tem uma única (e uniforme) direção (e módulo).

A eq. 5.18 equivale ao primeiro termo não-nulo da expansão de multipolos do Campo  $\nabla \times \mathbf{A}$ ,<sup>15</sup> sendo  $\mathbf{A}$  o potencial vetor, e o Campo referente à energia contínua da eq. 2.32. A validade dessa aproximação depende apenas das hipóteses do micromagnetismo,<sup>103</sup> diferentemente de implementações que usam transformadas de Fourier (FFT) e funcionam exclusivamente em redes regulares e são exatas apenas em contornos periódicos,<sup>92</sup> ou dos chamados *Fast Multipole Methods* (FMM) que oferecem um custo benefício entre performance e acurácia.<sup>16</sup> As condições de contorno também estão implícitas no modelo, sendo o primeiro termo minimizado no bulk (quando  $\mathbf{m}_i$  e  $\mathbf{m}_j$  estão antiparalelos) e o segundo termo é favorecido na borda, i.e, de alinhamento de ambos os vetores  $\mathbf{m}_i$  e  $\mathbf{m}_j$  com a direção que os une. Essa direção, para momentos próximos nas bordas, se aproxima das direções tangentes a  $\partial V_{discr}$  conforme  $a_0$  diminui, e assim se aproxima da condição de contorno original da eq. 2.34.

A energia de anisotropia magnetocristalina micromagnética é calculada localmente com a informação apenas do Campo  $\mathbf{m}$  e eixos fáceis de alinhamento  $\hat{e}_i$ . Para a ordem mais baixa do polinômio da eq. 2.38 e  $K_{\hat{e}_1} = K_i = K \quad \forall i, \hat{e}_1 = \hat{e}$ , a energia total em uma única

célula ( $E_{anis}^c$ ), pode ser estendida diretamente para uma Hamiltoniana micromagnética:

$$\begin{aligned}
E_{anis}^c &\approx -K a_0^3 (\mathbf{m}_i \cdot \hat{e})^2 \\
\implies H_{anis} &= -K a_0^3 \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \hat{e})^2 \\
&= -K_c \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \hat{e})^2
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Onde o Campo local efetivo correspondente é dado por  $\mathbf{B}_{anis}(\mathbf{r}_i) = 2K_c \hat{e}$ . Outras ordens de aproximação e outras geometrias para a energia anisotrópica são obtidas de maneira completamente análoga.

O termo da interação Zeeman com o Campo externo também age somente sobre o próprio sítio de magnetização e portanto é uma correspondência direta e imediata com a sua energia micromagnética na eq. 2.36. Basta observarmos, porém, que o Campo interage com a magnetização  $\mathbf{M}$ , similarmente ao caso dipolar, não dependendo apenas da direção de magnetização  $\mathbf{m}$ :

$$\begin{aligned}
E_{zee}^c &\approx -a_0^3 (\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}_{ext}^c) \\
\implies H_{zee} &= -\mu_0 a_0^3 M_s^2 \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}_i)) \\
H_{zee} &= -Z_c \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}_i)) \\
\mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}_i) &= \frac{1}{\mu_0 M_s} \mathbf{B}_{ext}^c
\end{aligned} \tag{5.20}$$

A validade da Hamiltoniana de Zeeman depende da uniformidade do Campo magnético externo dentro da célula micromagnética. Essa condição, na verdade, é um caso particular da condição CFL na eq. 4.25. Em outras palavras, para a eq. 5.20 ser uma boa aproximação, o Campo externo  $\mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r})$  deve se propagar com uma velocidade  $\mathbf{v}_\lambda$  de maneira que não sofra flutuações apreciáveis no caminho médio  $\langle \mathbf{r} \rangle = v_\lambda \Delta t \leq a_0$ .

Por último, a energia da interação Dzyaloshinskii-Moryia da eq. 2.40 pode ser descrita de maneira análoga ao Campo de troca. Ela ocorre também entre primeiros vizinhos e podemos usar o stencil de 7 pontos da fig. 21, com as derivadas de primeira ordem aproximadas com diferenças simples. Ambos os casos de bulk e superfície advém da mesma forma funcional atômica com a diferença apenas do vetor  $\mathbf{d}_{ij}$ , e como este não depende das derivadas e nem do próprio Campo  $\mathbf{m}$ , o tratamento de bulk e superfície fornece também a mesma aproximação para a constante  $D_c$ . Para o caso do bulk então

temos:

$$\begin{aligned}
E_{DM}^c &\approx Da_0^3 \mathbf{m}_i \cdot \sum_j \sum_{l,m,n} \left( \epsilon_{lmn} \hat{\mathbf{n}}_l \frac{\mathbf{m}_j^m - \mathbf{m}_i^n}{a_0} \right) \\
\implies H_{DM} &= Da_0^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{r}_{ij} \cdot (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j)
\end{aligned} \tag{5.21}$$

para  $(l, m, n) = (x, y, z)$  no rotacional da eq. 2.45. Assim temos que  $D_c = Da_0^2$  é a constante de interação entre células, e dois casos equivalentes  $\mathbf{D}_c^{bulk} = D_c \hat{r}_{ij}$ ,  $\mathbf{D}_c^{int} = D_c(\hat{r}_{ij} \times \hat{\mathbf{n}})$ . Como o produto vetorial é antissimétrico, não é necessário retirarmos vizinhos contados duplamente, pois as contribuições não são idênticas na troca  $i \rightarrow j$ .

Finalmente, temos uma formulação micromagnética completa em termos de uma Hamiltoniana efetiva entre células de uma grade discreta, equivalente às aproximações em diferenças finitas definidas no capítulo anterior. Nosso problema se reduz em modelar o seguinte sistema geral:

$$\begin{aligned}
H(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_N) &: (S^2)^N \mapsto (S^2)^N \subset (\mathbb{R}^3)^N \\
H &= H_{ex} + H_{dip} + H_{anis} + H_{zee} + H_{DM} \\
\mathbf{B}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{m}_i} \\
\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} &= -\gamma(\mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i) + \alpha \left( \mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} \right)
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Onde podemos focar tanto na minimização da energia  $H(\mathbf{m}_i(\mathbf{r}_i))$  quanto na transição dinâmica entre diferentes estados de equilíbrio, através da equação LLG.

## 5.2 O Método do Ponto Médio Esférico

Já vimos na eq. 4.17 que integradores explícitos como a classe de métodos RK falham em preservar incondicionalmente tanto as propriedades originais da equação LLG quanto a estabilidade da simulação de acordo com a condição CFL. Uma escolha melhor é um integrador implícito como o método do ponto médio da eq. 4.19. Mais do que isso, é interessante usarmos um método *simplético* (classe em que se encontra o método do ponto médio para certos espaços). Um método é simplético quando a solução numérica da equação em diferenças corresponde à solução perturbativa de uma Hamiltoniana discreta (ver apêndice A). Nesses casos os únicos erros apreciáveis introduzidos são o *drift* numérico da energia que é sempre um polinômio no passo temporal  $\Delta t$ , e então somos capazes de

capturar padrões periódicos em tempos longos com mais precisão. Usando-se métodos não-simpléticos, perderíamos a garantia global de trajetórias bem comportadas no espaço de fase dos momentos magnéticos.

De fato, o método do ponto médio em específico é um excelente candidato à solução do problema geral da eq. 5.22. Ele possui uma série de propriedades interessantes:<sup>92</sup>

- Ele é definido exatamente da mesma forma para *qualquer* Hamiltoniana  $H$ ;
- Todo invariante quadrático no sistema contínuo original também é invariante na discretização pela regra do ponto médio (e.g a norma  $\|\mathbf{m}\|$ );
- é equivariante com respeito a todas as transformações lineares no espaço de fase, i.e o método independe da escolha do sistema de coordenadas e não é alterado com o uso de coordenadas não-canônicas;
- Preserva todas as simetrias e classes de equivalência do espaço de fase, e.g classes de homotopia do problema contínuo também serão “equivalentes” (até segunda ordem - a ordem do integrador) em sua versão discretizada;
- É incondicionalmente estável em sistemas lineares como vimos antes, o que garante soluções robustas também no caso não-linear;
- O método é auto-adjunto sob  $t \rightarrow -t$  e preserva todas as simetrias de reversão temporal;
- É simplético em todas as Hamiltonianas canônicas (que possuem uma transformação para a forma das equações de Hamilton).

Devido a essas propriedades, o método do ponto médio é considerado na literatura de análise numérica o análogo “natural” para o caso discreto dos Campos contínuos definidos em espaços vetoriais simpléticos.<sup>100</sup> Por isso o método é amplamente usado na simulação de sistemas não-lineares como fluidos.<sup>85</sup>

Note porém, que todas as propriedades desse integrador só são válidas estritamente para Campos definidos no  $\mathbb{R}^{3N}$  ou subconjuntos do mesmo e para Hamiltonianas canônicas. No caso magnético, tanto os Campos de spin  $\mathbf{S}$  quanto a magnetização de sítio discreta ( $\mathbf{m}_i$ ) são definidos na esfera  $(S^2)^N$  (Apêndice B), que não é um espaço vetorial regular e ainda não possui nenhuma classe de equivalência que inclua os domínios onde o método do ponto médio é simplético. Para esses Campos, o integrador da eq. 4.19 mantém apenas algumas propriedades: invariância por rotação e reflexão, preservação da norma na esfera, e independência de coordenadas.

Em 2014, Modin et al.<sup>104</sup> propuseram um integrador simplético para todas as Hamiltonianas lineares (mas não-canônicas) definidas no  $S^2$ , denominado *método do ponto médio esférico*. Esse integrador possui todas as propriedades da regra do ponto médio “clássica” para o caso de espaços de fase não triviais, incluindo independência de coordenadas. Em particular, vamos focar no caso de sistemas de spin clássicos, que possuem a seguinte forma:

$$\frac{d\mathbf{s}_i}{dt} = \mathbf{s}_i \times \underbrace{\nabla_{\mathbf{s}_i} H(\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N)}_{\mathbf{f}_i(\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N)} \quad (5.23)$$

Em que os  $\mathbf{s}_i$  são definidos no  $\mathbb{R}^3$  de maneira que  $\|\mathbf{s}_i\| = 1$ , e a Hamiltoniana  $H$  é definida em  $(\mathbf{S}^2)^N$  e estendida ao  $(\mathbb{R}^3)^N$ . Alguns sistemas que se comportam de acordo com a eq. 5.23 incluem a dinâmica de cadeias de spins do modelo de Heisenberg clássico,<sup>38</sup> versões conservativas da equação de Landau-Lifshitz (Apêndice B) e vórtices infinitesimais na esfera.<sup>65</sup> Sistemas com um único elemento (que podem ser usado como funções geradoras para os sistemas mais complexos) também seguem o modelo da eq. 5.23, como o pião simétrico e rígido,<sup>105</sup> e o movimento de uma partícula de fluido via advecção na superfície de uma esfera.<sup>106</sup> Note que a equação LLG representa uma *perturbação* não linear e não trivial do sistema de spins clássico, devido ao termo de damping que descreve o amortecimento da precessão conservativa.

Seja os índices  $(i, n)$  correspondentes aos eixos de coordenada espacial e temporal, respectivamente. O método é definido da seguinte maneira para o caso de sistemas de spin:

$$\frac{\mathbf{s}_{i,n+1} - \mathbf{s}_{i,n}}{\Delta t} = \mathbf{f}_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) \quad (5.24)$$

$$\mathbf{u}_i := \frac{\mathbf{s}_{i,n} + \mathbf{s}_{i,n+1}}{\|\mathbf{s}_{i,n} + \mathbf{s}_{i,n+1}\|}$$

Métodos simpléticos podem ser desenvolvidos de duas maneiras. Para métodos explícitos, construímos integradores em um dado espaço de fase via *métodos de separação*, que consistem em dividir a Hamiltoniana em partes mais simples, considerando que cada parte possui um fluxo de Campo independente. O método de Verlet<sup>88</sup> é um exemplo de método simplético explícito. Já métodos simpléticos implícitos como a regra do ponto médio esférico e o método do ponto médio clássico, são construídos tipicamente através de funções geradoras que correspondam a um mapeamento do espaço de fase que seja simplético (i.e, que preserve áreas e/ou volumes no espaço de fase).<sup>104</sup>

No caso da regra do ponto médio clássica, o mapeamento associado ao integrador, de maneira que o mesmo seja simplético, é um caso particular da chamada função geradora

de Poincaré:<sup>101</sup>

$$\mathcal{F}(\mathbf{s}_n, \mathbf{s}_{n+1}) = \nabla G\left(\frac{\mathbf{s}_n + \mathbf{s}_{n+1}}{2}\right) = (\mathbf{s}_{n+1} - \mathbf{s}_n) \quad (5.25)$$

Em que  $G$  é a função geratriz geral que, para a regra do ponto médio clássica, devemos escolher como sendo o produto entre o passo temporal e a Hamiltoniana. A observação importante a se fazer é que o método do ponto médio esférico na eq. 5.24 é equivalente ao método do ponto médio clássico que usa o seguinte Campo vetorial:

$$\mathbf{g}_i(\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N) := \mathbf{f}_i\left(\frac{\mathbf{s}_1}{\|\mathbf{s}_1\|}, \dots, \frac{\mathbf{s}_N}{\|\mathbf{s}_N\|}\right) \quad (5.26)$$

Dessa maneira, muitas das propriedades demonstradas na literatura para o método clássico se aplicam imediatamente ao método esférico, como a preservação da norma dos spins, a independência de coordenadas, ser auto-adjunto, preservar todas as simetrias lineares e também possuir integrais de movimento na forma  $\mathbf{s}_i^T \mathbf{A} \mathbf{s}_i$ . A propriedade simplética no entanto, não segue imediatamente. A demonstração desse fato é feita a partir do chamado mapeamento de Hopf, e pode ser encontrada em referências como a.<sup>74</sup>

Vamos ilustrar a funcionalidade do método para o caso do rotor rígido (pião simétrico), cuja Hamiltoniana tem a forma:

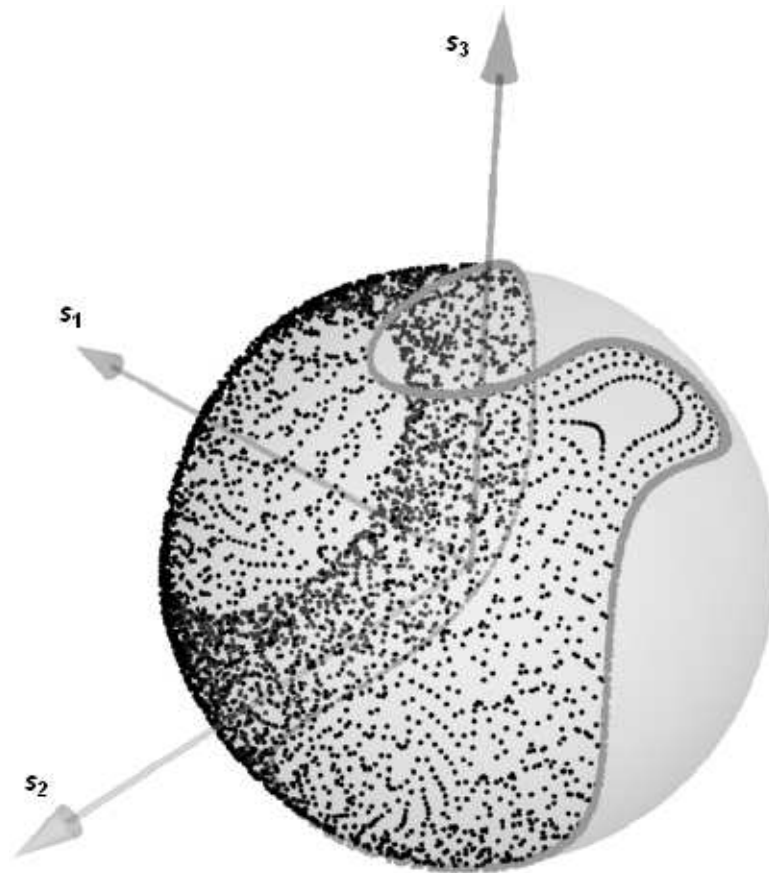
$$H(\mathbf{s}) = \sum_{j=1}^3 \frac{s_j^2}{2I_j}, \quad I_j > 0, \quad j = (x, y, z) \quad (5.27)$$

Esse sistema é importante pois possui várias simetrias em comum com sistemas de spins mais gerais.<sup>85</sup> O método do ponto médio esférico aplicado nesse sistema possui as características que o tornam integrável de forma exata, sendo essas: 1) a energia  $H$  é conservada de maneira exata devido ao fato de ser uma forma quadrática, similarmente à energia de troca das eqs. 2.30 e 5.14 - com todos os três em cada caso com termos de energia pertencentes a  $S^2 \otimes S^2$ ; 2) A norma de  $\mathbf{s}$  é uma integral de movimento do método e portanto  $\|\mathbf{s}(t)\| = 1\forall t$ ; e 3) O método é simplético então possui uma trajetória exata no espaço de fase para todos os tempos. Com essas características, o sistema dinâmico  $\mathbf{s}_n \mapsto \mathbf{s}_{n+1}$  é completamente integrável, de maneira similar a alguns métodos em dinâmica molecular como RATTLE<sup>85</sup> e Moser-Veselov.<sup>82,85</sup>

Além de ser exato para o pião simétrico, podemos destacar a utilidade do integrador através de uma perturbação não linear da eq. 5.27, dada por:

$$H(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{1}{I_j} \left( s_j^2 + \frac{2}{3} s_j^3 \right), \quad (I_1, I_2, I_3) = (1, 2, 4) \quad (5.28)$$

Figura 23 – Comparação entre os métodos do ponto médio esférico (linha sólida) e clássico (pontos).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Observe que a órbita encontrada é periódica para o caso esférico, que é simplético, mas não para o caso clássico, apesar de ambos serem estáveis para qualquer passo temporal.

Para esse sistema já é conhecido que todas as órbitas são periódicas ou singulares (com um único ponto).<sup>104</sup> Podemos considerar as soluções da eq. 5.23 com essa Hamiltoniana não linear, utilizando os métodos do ponto médio esférico e clássico nas eqs. 5.24 e 4.19 respectivamente, em comparação. Em ambos os casos vamos usar o método iterativo de solução de integradores implícitos como na eq. 4.20, com  $\mathbf{s}_{n+1,0} = \mathbf{s}_n$ ,  $\Delta t = 0.5$  e critério de parada  $\|\mathbf{s}_{n+1,k+1} - \mathbf{s}_{n+1,k}\| < 10^{-5}$ .

Para uma condição inicial  $\mathbf{s}_0 = (0.0, 0.73, -0.69)$ , a trajetória no espaço de fase em 2000 passos temporais tem a forma exibida na fig. 23. O método do ponto médio esférico (representado pela linha sólida) reproduz corretamente a órbita periódica das componentes de  $\mathbf{s}$ . O método clássico porém, mesmo com um critério de iteração extremamente restrito de  $10^{-5}$ , não é capaz de reproduzir a periodicidade. Integradores explícitos falhariam com mais intensidade ainda pois nem apresentariam a condição de preservação da norma, exigindo passos temporais tão pequenos que o custo computacional superaria o de se usar



repetidas iterações no cálculo de  $\mathbf{f}(\mathbf{s})$  por passo.

A grande vantagem de um método simplético para o espaço de fase da Hamiltoniana é exatamente a estabilidade para simulações em longos tempos e em problemas rígidos onde diferentes escalas de tempo devem ser consideradas, como no caso da equação LLG.

Devemos observar, como mencionado antes, que a eq. LLG discreta (em 5.22) não se encaixa estritamente na forma apropriada para implementação do método esférico, i.e a precessão de spins clássicos da eq. 5.23. Mesmo se considerada como uma perturbação não linear do sistema de spins clássicos, o termo de damping possui uma derivada temporal das magnetizações que se associa ao torque de maneira não trivial (num produto vetorial), complicando a análise do sistema. No entanto, a eq. LLG pertence a uma classe mais geral que também inclui sistemas de spin clássicos, denominados *sistemas de Nambu*. A forma particular que inclui a discretização da eq. LLG e sistemas clássicos de spin é dada por:

$$\frac{d\mathbf{s}_i}{dt} = \mathcal{L}(C_i(\mathbf{s}_i), \nabla_i H(\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N)) \quad (5.29)$$

Em que  $\mathcal{L}$  é um operador diferencial dos spins e da Hamiltoniana, e  $C_i$  são formas homogêneas lineares ou quadráticas. O método do ponto médio esférico é simplético para tais sistemas,<sup>104</sup> em alguns casos com diferentes definições possíveis para o ponto médio na variedade onde se define  $H$ , mas devemos ainda validar as propriedades da eq. LLG com o integrador na forma encontrada na eq. 5.24. Essas demonstrações são feitas no apêndice D.

Também para a Hamiltoniana da eq. LLG em 5.22, é interessante modificarmos o método iterativo na solução da integração implícita, pois o custo computacional se tornaria muito alto ao passo que o número de momentos magnéticos no sistema aumenta.

Há várias formas de solucionar o sistema não linear que resulta na implementação de um integrador implícito. Nosso objetivo em particular é aplicar o seguinte método implícito:

$$\mathbf{m}_{i,n+1} = \mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \mathbf{f}_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) \quad (5.30)$$

Com os  $\mathbf{u}_i$  definidos de acordo com a eq. 5.24 e  $\mathbf{f}_i$  o torque da eq. LLG em 5.22. Note que esse não corresponde ao método esférico original mostrado em,<sup>104</sup> pois a eq. LLG é uma extensão não trivial dos sistemas de spin clássicos, devido ao termo de damping e a possibilidade de outras interações que sejam formas quadráticas mais gerais em  $\mathbf{m}$ . Nossa eq. 5.30 então é um integrador modificado que devemos validar quanto à solução de problemas micromagnéticos, o que como dito anteriormente é feito no apêndice D.

Uma abordagem seria melhorar o processo iterativo da eq. 4.20 usando o método

de Newton.<sup>94,101</sup> O procedimento consiste em transformar a equação acima no seguinte sistema:

$$\mathbf{F}(\mathbf{m}_{i,n+1}) = 0 = \mathbf{m}_{i,n+1} - (\mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \mathbf{f}_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)) \quad (5.31)$$

O método de Newton introduz um índice  $k$  similarmente à interação de ponto fixo, porém usando também a variação de  $\mathbf{F}$ , de acordo com:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{i,n+1}^0 &= \mathbf{m}_{i,n} \\ \mathbf{m}_{i,n+1}^{k+1} &= \mathbf{m}_{i,n+1}^k - \frac{\mathbf{F}(\mathbf{m}_{i,n+1}^k)}{\mathbf{F}'(\mathbf{m}_{i,n+1}^k)}, \quad k \geq 1 \end{aligned} \quad (5.32)$$

As derivadas temporais do termo de amortecimento da equação LLG também devem ser escritas em diferenças finitas, ou também podemos usar a forma explícita da equação (apêndice B). Esse é um sistema de  $3N$  iterações para cada componente  $(x, y, z)$  de cada célula micromagnética  $i$ . Cada rodada de iteração sobre todo o conjunto de  $N$  células exige um novo cálculo dos Campos efetivos locais, e como cada célula pode ter uma convergência diferente, podemos eleger um critério de parada tal que todas as células possuam um erro máximo dado por:

$$\text{Err}_{\max} = \max \left( \|\mathbf{m}_{i,n+1}^{k+1} - \mathbf{m}_{i,n+1}^k\| \right)_i < \epsilon \quad (5.33)$$

Apesar da convergência quadrática típica do método de Newton, algumas limitações também dificultam a implementação da eq. 5.32. Primeiramente, o erro  $\text{Err}_{\max}$  de tolerância para estabelecer a convergência de um passo deve ser muito pequeno em geral, correspondendo a aproximarmos  $\mathbf{F}$  de um ponto crítico. Valores de tolerância típicos para o método do ponto médio clássico por exemplo chegam a  $\text{Err}_{\max} \approx 10^{-13}$ ,<sup>92</sup> o que pode resultar em um número grande de iterações para um único passo temporal.

Outra dificuldade de implementar o método é a obtenção de  $\mathbf{F}'(\mathbf{m}_{i,n+1}^k)$  em cada iteração de cada passo temporal. Devemos tomar cuidado para que aproximações em diferenças finitas da derivada não introduzam erros muito grandes no quociente da eq. 5.32, caso uma expressão analítica não esteja disponível ou seja trivial de se obter. Uma aproximação de ordem baixa (que use só os pontos  $(i, n + 1, k)$ ) pode acabar exigindo uma tolerância  $\text{Err}_{\max}$  que elimine toda a vantagem computacional do método, especialmente em casos onde  $\mathbf{F}'$  tende a zero.

### 5.3 Método Preditor-Corretor Esférico

Como visto no exemplo do método do ponto médio clássico da eq. 4.22, uma boa maneira de implementar um integrador implícito é através de um método Preditor-Corretor (PC) que use um integrador explícito como passo inicial da iteração, ou ainda que use um número fixo de iterações.

Vamos prosseguir definindo um método PC que soluciona o problema micromagnético com uma boa preservação de suas propriedades. primeiramente, devemos observar que com o método corretor sendo o método do ponto médio esférico, diferentes preditores devem necessariamente convergir na mesma solução final dado um número desconhecido de iterações. Com isso, buscamos a possibilidade de estabelecer um número mais ou menos fixo de iterações por passo através de um preditor escolhido adequadamente, com algum critério adequado para medir prontamente durante uma simulação caso um ajuste seja necessário nesse número de passos.

Vamos portanto definir dois tipos de preditor para usarmos durante a solução dos problemas resolvidos a partir desse ponto. Nosso primeiro preditor usa o integrador de Euler:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{i,n+1}^0 &= \mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \mathbf{f}_i(\mathbf{m}_{1,n}, \dots, \mathbf{m}_{N,n}) \\ \mathbf{m}_{i,n+1}^{k+1} &= \mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \mathbf{f}_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) \\ \mathbf{u}_i &= \frac{\mathbf{m}_{i,n+1}^k + \mathbf{m}_{i,n}}{\|\mathbf{m}_{i,n+1}^k + \mathbf{m}_{i,n}\|}, \quad k \geq 1 \end{aligned} \quad (5.34)$$

O segundo método utiliza como preditor o integrador de Adams de ordem 3:<sup>82</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{i,n+1}^0 &= \mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \left( \frac{23}{12} \mathbf{f}_i((\mathbf{m}_{i,n})_i) - \frac{16}{12} \mathbf{f}_i((\mathbf{m}_{i,n-1})_i) + \frac{5}{12} \mathbf{f}_i((\mathbf{m}_{i,n-2})_i) \right) \\ \mathbf{m}_{i,n+1}^{k+1} &= \mathbf{m}_{i,n} + \Delta t \mathbf{f}_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) \\ \mathbf{u}_i &= \frac{\mathbf{m}_{i,n+1}^k + \mathbf{m}_{i,n}}{\|\mathbf{m}_{i,n+1}^k + \mathbf{m}_{i,n}\|}, \quad k \geq 1 \end{aligned} \quad (5.35)$$

Onde note que usamos também os torques da eq. LLG em dois passos anteriores. A derivação desse preditor é efetuada de acordo com a maneira mais usual de se obter métodos PC (feita no apêndice C), em contraste com o caso dos métodos de ponto médio onde estamos derivando um integrador PC a partir de um método implícito.

É importante enfatizar sobre as eqs. 5.34 e 5.35 que elas são a priori completamente equivalentes. Já vimos que ao construir um método implícito dessa maneira a convergência

irá acontecer, ainda que para um número não especificado de passos. O objetivo de se testar diferentes preditores é o de buscar uma obtenção mais rápida da convergência e assim diminuir anomalias advindas de erros computacionais de arredondamento, e também aumentando a eficiência do método.

O método esférico cumpre com exatidão as propriedades de conservação da norma das magnetizações e a estrutura de Lyapunov da eq. LLG (apêndice D). A própria equação LLG em 2.47 pode nos fornecer então critérios adequados para a convergência da dinâmica como um todo para um estado de equilíbrio, assim como para apontar erros na estabilidade da integração durante a dinâmica.

### 5.3.1 Convergência ao Equilíbrio

A convergência de um sistema com condições iniciais  $\mathbf{m}_{i,0}$  para um estado de equilíbrio pode ser dada por exemplo a partir de um critério que use o torque da eq. LLG, escolhendo-se um parâmetro  $\epsilon_f$  de comparação para considerarmos que o sistema chegou ao equilíbrio quando o maior torque  $\|\mathbf{f}_i\|$  no sistema é menor do que  $\epsilon_f$ . Ou seja:

$$\max\left(\frac{\|\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}\|}{\Delta t}\right)\Big|_{i=1,\dots,N} < \epsilon_f, \quad n = 0, \dots \quad (5.36)$$

No entanto, devemos observar também que em certos casos o uso do critério na eq. 5.36 pode não ser desejável para a análise de alguns problemas. Em alguns casos por exemplo as energias entre dois estados de equilíbrio são muito próximas e o sistema chega ao equilíbrio final apenas depois de um longo tempo de simulação,<sup>102,104,107</sup> com variações muito baixas (porém não negligenciáveis do torque). Isso pode acontecer inclusive em aplicações pertinentes aos estudos sobre cargas topológicas, pois em tais sistemas vários estados de equilíbrio e quase equilíbrio são ligados por transições lentas como descrito anteriormente. Essas podem não ser detectáveis pelo critério da eq. 5.36, exigindo valores muito baixos de  $\epsilon_f$  que podem dificultar a convergência desnecessariamente em outros casos, sendo não trivial avaliar um critério adequado a priori.

Como aplicações em micromagnetismo tratam com frequência da simulação de dispositivos ou de conceitos de dispositivos spintrônicos, podemos também ao invés de um critério de convergência, se basear num tempo fixo de simulações, que corresponda ao intervalo típico de duração do fenômeno que desejamos estudar para o sistema específico que temos em mente. Esse intervalo pode ser inferido experimentalmente, analiticamente ou construído a partir de simulações prévias de maneira heurística.

Em aplicações com osciladores por exemplo, experimentos com movimento girotrópico de quasipartículas magnéticas são realizados com medidas numa escala típica de

$10^{-9}s$ ,<sup>108</sup> enquanto fenômenos de transição entre diferentes estados topológicos são ultra rápidos em uma escala menor do que  $10^{-12}s$ , podendo chegar a  $10^{-15}s$ .<sup>75</sup> Tendo em mente as escalas de tempo pretendidas para se observar fenômenos distintos, podemos inclusive buscar por eliminação os parâmetros de material e tamanhos de sistemas que apresentem tais fenômenos dentro de uma faixa de intervalos de tempo viáveis experimentalmente. Idealmente, uma união entre os critérios de tempo fixo e da eq. 5.36 pode ser usada para prever e identificar não só estados de equilíbrio, como também barreiras de energia e transições para estados fora do equilíbrio via aplicação de Campos externos e correntes.

### 5.3.2 Estabilidade de Passos Temporais

Além de um critério de convergência para discernir estados de equilíbrio numa simulação, também podemos utilizar as propriedades físicas da eq. LLG para avaliar a estabilidade da simulação, i.e o desvio entre dois passos temporais da solução real.

Na eq. de balanço da energia  $\mathcal{E}$ , temos a seguinte lei de conservação para Campos externos constantes (apêndice D):

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = -\alpha \left| \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right|^2 \quad (5.37)$$

Que numa transição para a Hamiltoniana discretizada (também já no tempo) da eq. 5.22, se torna:

$$\frac{H(\mathbf{m}_{1,n+1}, \dots, \mathbf{m}_{N,n+1}) - H(\mathbf{m}_{1,n}, \dots, \mathbf{m}_{N,n})}{\Delta t} = -\alpha \sum_i \left| \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \right|^2 \quad (5.38)$$

Na expressão acima podemos isolar o parâmetro de damping. Na realidade  $\alpha$  é um parâmetro de cada material, constante para baixas temperaturas e Campos externos razoáveis em comparação à energia de troca. No entanto, em implementações numéricas, o valor de  $\alpha$  na eq. 5.38 varia de acordo com os valores (aproximados) das derivadas envolvidas. Durante a simulação, obtemos a partir de cada passo temporal um valor  $\hat{\alpha}_n$ , gerando ao longo de todo o processo uma sequência dada por:

$$(\hat{\alpha})_n = -\frac{\Delta t (H(\mathbf{m}_{1,n+1}, \dots, \mathbf{m}_{N,n+1}) - H(\mathbf{m}_{1,n}, \dots, \mathbf{m}_{N,n}))}{\sum_i |\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}|^2} \quad (5.39)$$

Assim, o desvio  $\|\hat{\alpha}_n - \hat{\alpha}_0\| = \epsilon_\alpha$  entre o damping por passo e o damping inicial indicam o nível de instabilidade devido ao processo de iteração numérica usada no integrador. Em particular, a sequência irá apresentar comportamento oscilatório em torno de  $\alpha$ ,<sup>92</sup> com

valores negativos representando perda total da estabilidade em um dado passo, no sentido em que a trajetória a partir desse ponto não se encontra mais no espaço de fase adequado.

No caso conservativo em que  $\alpha = 0$ , a condição de balanço de energia se reduz a anulação da derivada na eq. 5.37. Nessas situações o valor do erro relativo com respeito à medida inicial da Hamiltoniana fornece o critério de estabilidade através da seguinte sequência  $(\epsilon)_n$ :

$$\epsilon_n = \frac{H(\mathbf{m}_{1,n}, \dots, \mathbf{m}_{N,n}) - H(\mathbf{m}_{1,0}, \dots, \mathbf{m}_{N,0})}{H(\mathbf{m}_{1,0}, \dots, \mathbf{m}_{N,0})} \quad (5.40)$$

O erro acumulado dado pela média dos termos acima durante a simulação também pode ser usado para se estimar o desvio total da energia.

Note que as eqs. 5.38 e 5.37 só valem estritamente para Campos externos constantes. No caso mais geral há um termo adicional para a superposição de Campos externos com dependência explícita no tempo, como mostrado no apêndice D. No caso do modelo contínuo de Campos, isso implica na quebra da estrutura de Lyapunov e introduz a possibilidade de aumento local da energia total de sistemas magnéticos. Para o modelo numérico com balanço de energia dado na eq. 5.39 isso implica que a própria propriedade de amortecimento pode ser desviada devido ao Campo externo durante uma simulação, se mantendo constante apenas a menos da perturbação externa equivalente no material.

Esse fato enfatiza a importância de verificarmos o cumprimento da hipótese fundamental feita sobre os Campos do modelo Hamiltoniano da eq. 5.22, i.e que sejam *uniformes* dentro da extensão de cada célula e dentro de cada intervalo de diferenças finitas do problema, incluindo o tempo. Mesmo que um Campo externo aplicado a um sistema possua dependência explícita no tempo, basta que o mesmo seja uniforme por partes dentro de cada intervalo  $\Delta t$ , e então a eq. 5.39 de desvio do damping continuará sendo válida até a ordem de erro em que a hipótese micromagnética de uniformidade local também seja.

De posse da eq. 5.39 temos então um critério “físico” e também numérico para o uso de diferentes métodos preditores para nosso método PC esférico. Podemos por exemplo iniciar os primeiros passos com o preditor de Euler e, caso o número de iterações necessária para uma convergência satisfatória seja muito grande, passamos ao preditor de Adams. O critério por iteração é dado pela eq. 4.21 com um  $\epsilon_a$  pequeno, ao menos menor do que a precisão desejada nas energias, e esse pode ser combinado com o critério por passo da eq. 5.39 para garantir uma integração estável.

## 5.4 Validação Numérica do Modelo Preditor-Corretor

Com as propriedades analíticas e também critérios numéricos de estabilidade das simulações (que incluem as eqs. 5.39 e 5.36 e todo o desenvolvimento do capítulo anterior), vamos também demonstrar com simulações concretas que nosso método é confiável e soluciona problemas de maneira ao mesmo tempo adequada e otimizada.

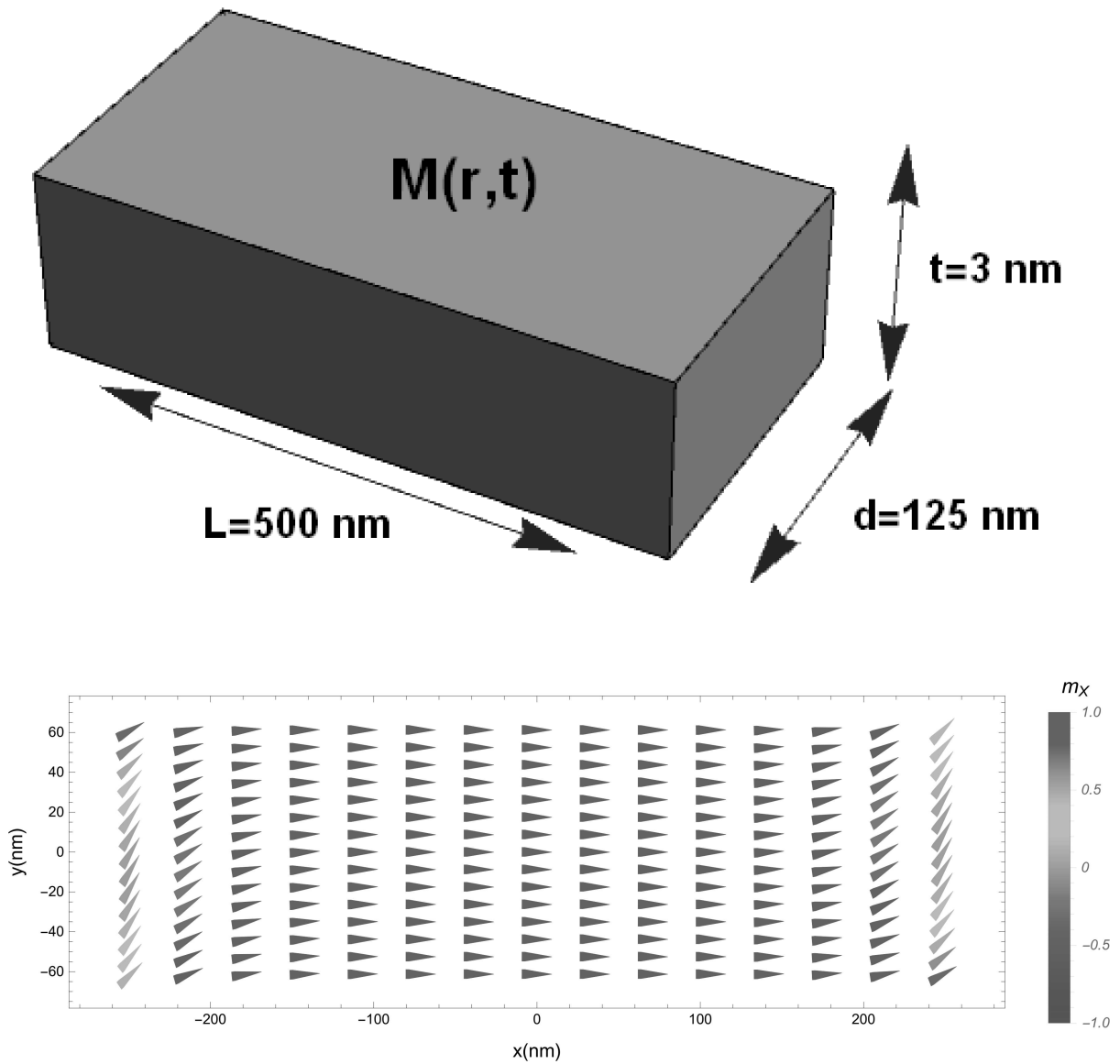
### 5.4.1 $\mu$ MAG Standard Problem #4

Devido a um grande número de diferentes modelos existentes, e da dificuldade inerente em simulações de sistemas magnéticos na escala mesoscópica, o grupo de modelagem micromagnética do NIST (*National Institute of Standards and Technology* - EUA)<sup>92</sup> criou um grupo de problemas padronizados, com parâmetros pensados para testar as diferentes características de soluções que usam o modelo micromagnético, verificando que as mesmas reproduzem a física das interações magnéticas pertinentes.

Dentre esses problemas padrões disponíveis, os problemas #1, #2 e #3 dizem respeito à propriedades de equilíbrio e energia de sistemas magnéticos. Nosso modelo, no entanto, não apresenta novos termos de interação com relação aos já estabelecidos na literatura, e utiliza um modelo Hamiltoniano já validado em diversas publicações do grupo de pesquisa ao qual esta tese está vinculada.<sup>33,96</sup> O aspecto original introduzido aqui diz respeito a propriedades dinâmicas definidas pela integração numérica do sistema Hamiltoniano não-canônico da eq. 5.22. Portanto, iremos definir e solucionar com nosso método o problema #4 do NIST, que trata justo da simulação dinâmica do micromagnetismo.

O problema padrão em questão trata de simular uma amostra da liga de NiFe conhecida como Permalloy ou Py, que tem parâmetros dados por  $A = 13 \times 10^{-12}$  J/m,  $M_s = 8.6 \times 10^5$  A/m. A amostra possui uma geometria retangular com valores de  $(x, y, z) =$  (espessura, largura, comprimento) de  $t = 3$  nm,  $L = 500$  nm,  $d = 125$  nm respectivamente, cuja visualização é dada na fig. 24. Essa amostra deve possuir uma condição inicial dada pelo estado de equilíbrio chamado de *s-state*, que corresponde ao que se encontra experimentalmente após aplicar um Campo externo de saturação (que leve ao alinhamento total) e reduzi-lo lentamente até zero na direção [1,1,1]. Esse estado é obtido pela concentração de cargas superficiais ao longo das bordas no plano XY da estrutura como na eq. 2.35. As interações no sistema correspondem aos termos de Zeeman,

Figura 24 – Geometria da amostra do problema #4 do NIST (acima) e Campo vetorial magnetização do estado inicial (abaixo).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: A minimização da energia magnetostática nas bordas causa um desvio do alinhamento ao longo do eixo x.

Magnetostático, e Troca na eq. 2.46:

$$\mathcal{E}_{\mu mag} = E_{ex} + E_d + E_{zee} \quad (5.41)$$

Com essa condição inicial de  $\mathbf{M}$  e essa geometria, devemos simular separadamente a aplicação de dois Campos externos a partir do tempo  $t_0 = 0$ , com diferentes valores de magnitude e direção em cada caso. Cada um desses Campos deve resultar num evento de inversão (*switching*) para um s-state da magnetização na direção contrária no plano XY,



i.e que seja uma reflexão em torno da origem do estado inicial. Esses Campos são:

- $\mathbf{B}_1 = (-24.6, 4.3, 0.0)$  mT, que corresponde a uma perturbação externa com magnitude de 25 mT, com direção dada por uma rotação de 170 graus com relação ao eixo x positivo;
- $\mathbf{B}_2 = (-35.5, -6.3, 0.0)$  mT, que corresponde a uma perturbação externa com magnitude de 36 mT, com direção dada por uma rotação de 190 graus com relação ao eixo x positivo.

Em ambas as simulações os Campos devem ser aplicados instantaneamente a partir de  $t_0$  e sustentados até que o novo s-state de equilíbrio seja alcançado, seja através do critério de torques da eq. 5.36 ou um número fixo de passos temporais. A comparação entre diferentes métodos de integração na resolução desse sistema é dada principalmente através de duas medidas tomadas através do tempo na simulação. Primeiramente vamos medir o valor esperado das componentes em  $(x, y, z)$  da magnetização total (a média espacial das magnetizações), dada por:

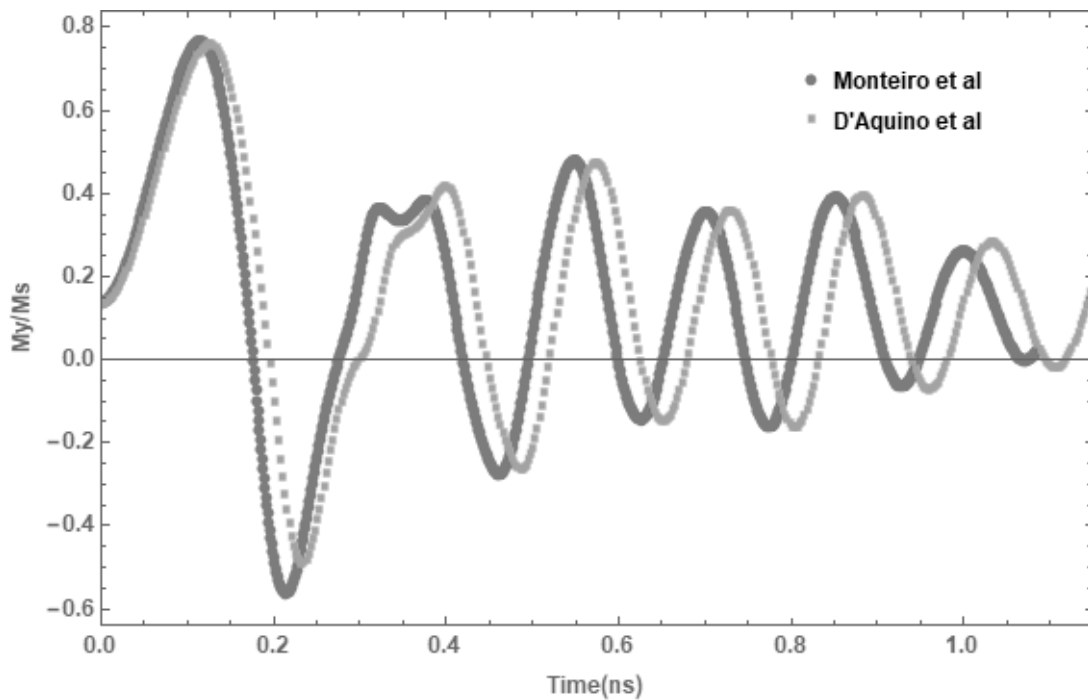
$$M_i = \frac{1}{N} \sum_j \mathbf{m}_{i,j} \quad , \quad i = (x, y, z), j = 1, \dots, N \quad (5.42)$$

O vetor  $\hat{\mathbf{M}} = (M_x, M_y, M_z)$ , além de representar a direção do Campo magnético  $\mathbf{B}_{mat}$  gerado de forma intrínseca no material através das equações de Maxwell, também representa o parâmetro de ordem para o ordenamento magnético no volume que contém a magnetização  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$ . No caso, a norma  $\|\hat{\mathbf{M}}\| \in [0, 1]$  corresponde ao “grau de ferromagnetismo” do sistema, onde uma norma unitária corresponde ao caso de saturação e um valor nulo representa uma transição *efetiva* (que pode ser instantânea, em um intervalo ou permanente) para um estado coletivo que se comporta como paramagnético.

A outra medida relevante para comparações sugerida é uma imagem do Campo  $\mathbf{m}_{i,n}$  - como na figura 24 - no momento em que a componente  $M_x = 0$ , ou seja, no momento onde de fato ocorre a transição entre diferentes estados de ordenamento no eixo-x. Essa imagem é usada para verificar os mecanismos de reversão mesmo que os intervalos de passo temporal usados em cada simulação sejam diferentes. Devemos mostrar também que diferentes discretizações (dentro dos limites de comprimentos característicos apropriados) não alteram a dinâmica do problema.

A definição do problema é feita de maneira que a trajetória dinâmica do estado inicial para o final seja de mais fácil solução para o caso do Campo aplicado em 170 graus do que no caso aplicado em 190 graus. No primeiro caso, espera-se que o centro da

Figura 25 – Evolução temporal da magnetização do problema #4 para os integradores considerados.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Os integradores usados são os de ponto médio clássico com Campo desmagnetizante aproximado (laranja, pontilhado) e esférico com Campo desmagnetizante total (azul, tracejado), para uma inclinação de Campo externo de 170 graus.

estrutura com respeito ao eixo-x rotacione no mesmo sentido que as bordas esquerda e direita durante a reversão. Já no caso do Campo aplicado em 190 graus, esperamos que o centro da estrutura rotacione em sentido oposto às bordas, o que resulta num fenômeno de inversão mais complicado - especialmente no que diz respeito ao Campo magnetostático que interfere nas cargas superficiais acumuladas nas bordas do sistema. A magnitude do Campo externo é escolhida de maneira que seja maior do que o chamado Campo de *coercividade*,<sup>16</sup> que corresponde à intensidade mínima de Campo aplicado em uma dada direção, para que ocorra um fenômeno de inversão do vetor  $\hat{M}$ .

Iremos realizar comparações diretas das soluções para o problema com a regra do ponto médio clássico desenvolvida por D'Aquino et al.<sup>92</sup> Os demais métodos usados tipicamente, como mencionado antes, necessitam de operações arbitrárias para conservar a norma das magnetizações e assim introduzem fatores externos que modificam o domínio original de maneira não-linear. Nas regras de ponto médio entretanto, podemos comparar apenas a qualidade das soluções quanto à sua convergência, com a garantia de que reproduzem suficientemente as condições exatas descritas no enunciado do problema.

A outra diferença crucial entre as soluções é que em todos os casos disponíveis para

comparação - incluindo a que escolhemos, com a regra do ponto médio clássica - são feitas aproximações no Campo magnetostático, de maneira que o mesmo seja ou truncado ou limitado quanto à formação de cargas superficiais nas bordas da amostra (por exemplo, com um domínio tomado como implicitamente periódico e solução via transformadas de Fourier<sup>61</sup>). Como usamos GPUs para otimizar o processo de obtenção das interações de longo alcance, vamos manter o cálculo *exato* dos Campos magnetostáticos segundo nosso modelo Hamiltoniano, e verificar também como isso afeta na resolução dos mecanismos de inversão da magnetização.

Os parâmetros numéricos usados em nossa simulação serão  $\Delta t = 43.86$  fs e  $a_0 = 5$  nm, com os Campos e torques calculados de acordo com o modelo da eq. 5.22, e a integração realizada com os métodos do ponto médio clássico e os métodos do ponto médio esférico de Euler e de Adams (eqs. 5.35 e 5.34, com tolerância de  $\epsilon_a < 10^{-8}$  usado como critério de parada para as iterações de passos corretores em cada passo da dinâmica. Note que como  $t = 3nm \ll (d, L)$ , mantemos uma camada de espessura de  $a_0 = 5nm$  assumindo que a estimativa acima não irá afetar a forma dos Campos de troca ou magnetostático devido à quase bidimensionalidade do sistema. Mesmo assim, na sessão seguinte iremos mostrar que redes menores corroboram os resultados gerais encontrados pelo método com esse valor de espessura.

Na fig. 25 temos a evolução temporal da magnetização efetiva  $M_y$  para o primeiro caso de Campo externo (de mais simples inversão). Essa componente é máxima/mínima pela *primeira vez* no momento em que ocorre uma reversão da componente  $M_x$  (que no mesmo momento se anula) para o sentido oposto do plano da amostra, uma vez que não há alteração significativa na direção do eixo-z.<sup>92</sup> Os picos subsequentes representam a estabilização da estrutura no estado final com uma precessão amortecida. No gráfico, podemos observar a equivalência na dinâmica entre o uso dos integradores de ponto médio esférico (Monteiro) e clássico (D'Aquino), com convergência para o mesmo estado através do tempo.

As diferenças entre os dois métodos está na velocidade de convergência, com uma aparente “diferença de fase” entre a precessão de  $M_y$  de um caso para o outro, além da presença de um pico adicional para o método esférico, que aparece apenas como uma pequena perturbação no caso clássico. A diferença entre as faixas de precessão pode ser atribuída à diferença no tratamento do Campo magnetostático (considerando uma aproximação de segunda ordem da interação completa, no caso esférico, contra considerar uma rede auxiliar do espaço recíproco e aproximada no caso clássico).

Em sistemas ferromagnéticos, Campos externos induzem as chamadas ondas de spin que se propagam através de transferências de momento angular no interior do

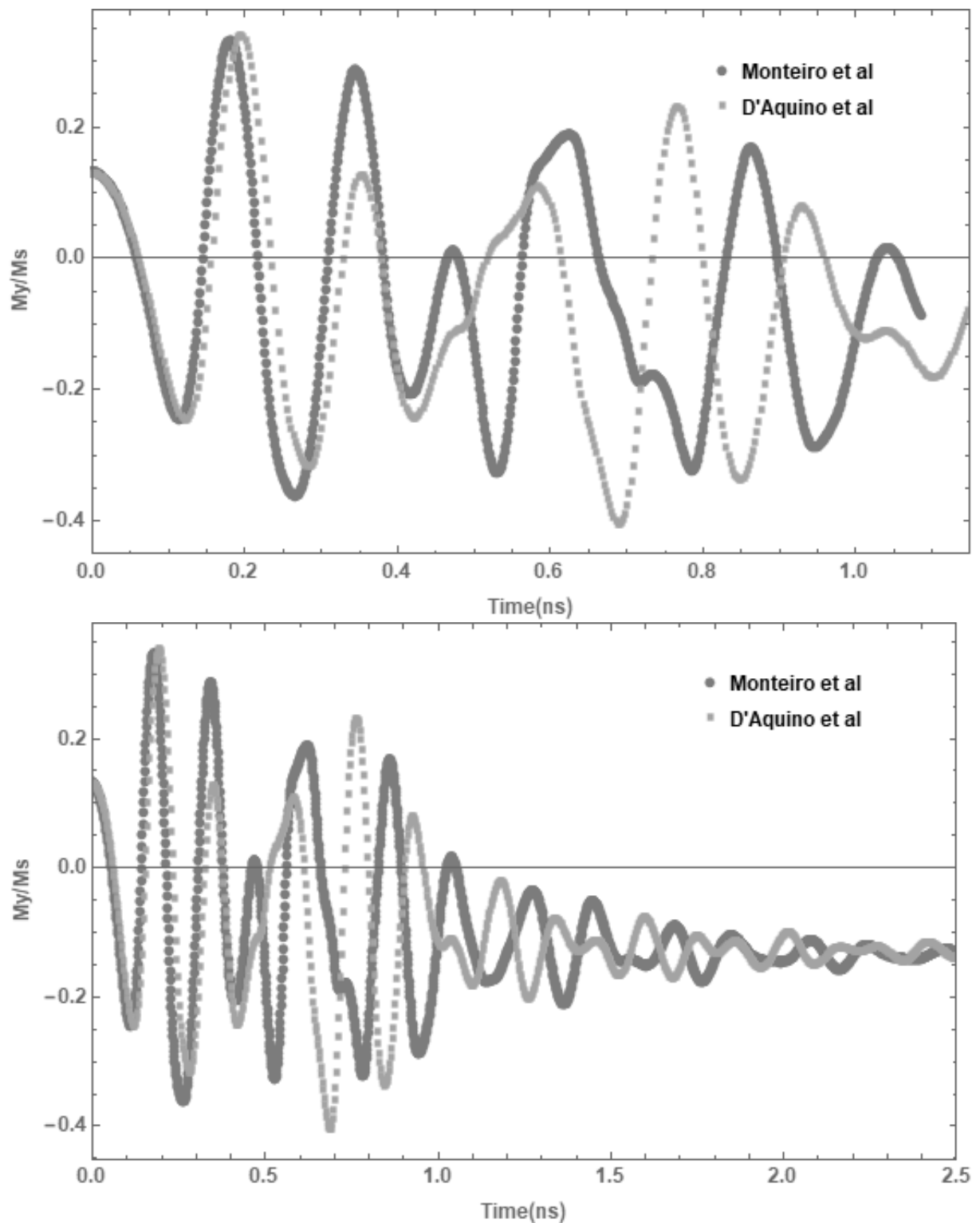
material, causando também precessão nos momentos magnéticos. Os modos normais de vibração mais próximos do fundamental dessas ondas no sistema, como já foi demonstrado na literatura,<sup>50,89,102</sup> são apreciavelmente alterados pelas energias típicas do Campo magnetostático. A presença desses modos vibracionais altera as frequências de precessão típicas na eq. LLG mas não altera a dinâmica em si exceto em alguns casos, de maneira que esse deve ser o mecanismo responsável pela diferença de fase entre as componentes  $M_y$ .

Também vemos a presença de um pico acentuado no método esférico, onde há apenas uma perturbação no caso clássico ( $t \approx 0.3$  ns). Essa diferença tem relação direta com a propriedade simplética do método do ponto médio esférico e a preservação do domínio  $S^2$  dos vetores magnetização. Apesar de preservar a norma do vetor magnetização da eq. LLG, a regra do ponto médio clássica não implica em uma norma *unitária* ( $\|\mathbf{M}_{i,n}\| = 1 \forall (i, n)$ ), exceto no caso em que a mesma já está na forma adimensional  $\mathbf{m}_{i,n}$ . Isso significa que, diferentemente de todos os métodos explícitos e até mesmo do método implícito do ponto médio clássico, o método da eq. 5.24 possui como domínio *exato* uma discretização da esfera  $S^2$ . Por sua vez, isso reflete no comportamento da energia: a Hamiltoniana  $H_{esf}$  referente às células  $\mathbf{m}_{i,n}$  obtidas com o método esférico possui como domínio o  $S^2$ , enquanto no caso clássico a Hamiltoniana  $H_{class}$  na verdade possui um domínio diferente com uma topologia que não necessariamente corresponde à original. Isso resulta em diferenças sutis (o espaço de fase nos demais métodos ainda é suficientemente aproximado do original) que podem ser vistas como perturbações do tipo da fig. 25, e devem alterar a dinâmica de maneira significativa só em casos mais sensíveis de transição. Em particular, o caráter de precessão com amortecimento fraco típico da eq. LLG deve ser acentuado no caso esférico com uma diminuição mais suave na amplitude de picos nas componentes de momento magnético. Uma demonstração mais detalhada desse fato pode ser vista no apêndice D.

Na fig. 26 temos a evolução temporal da magnetização efetiva  $M_y$  para o segundo caso de Campo externo (de inversão mais complicada). Da mesma forma que no caso anterior, o primeiro pico representa o mecanismo de inversão com uma subsequente estabilização da estrutura na nova direção de equilíbrio. Dessa vez, apesar do pico que representa a inversão coincidir, a precessão que leva ao equilíbrio possui diferenças substanciais entre os dois métodos. Primeiramente, para verificarmos que ambos os casos de fato convergem para o mesmo equilíbrio, exibimos dois gráficos, sendo um realçando o período próximo à inversão, onde se concentram as maiores diferenças, e outro que cobre um tempo suficientemente grande para constataremos a tendência de equilíbrio, permanecendo apenas a diferença de fase devido ao tratamento da interação magnetostática.

Como mencionado para o primeiro caso, a precessão amortecida em ambos os integradores ocorrem em espaços discretos estritamente diferentes, com o caso esférico

Figura 26 – Evolução temporal da magnetização do problema #4 para os integradores considerados.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Os integradores são os de ponto médio clássico com Campo desmagnetizante aproximado (laranja, pontilhado) e esférico com Campo desmagnetizante total (azul, tracejado), para uma inclinação de Campo externo de 190 graus. Acima, detalhe do mecanismo de inversão, e abaixo a convergência de ambos os casos para o mesmo estado final.

representando necessariamente pontos discretos em  $S^2$ . Como a inversão possui um mecanismo mais complexo, uma variação maior pode ser observada durante a precessão até o equilíbrio, com uma diferença mais intensa na marca de  $t \approx 0.45$  ns. Note porém, que após essa variação, o padrão de oscilações se mantém qualitativamente próximo, com platôs cada vez mais acentuados em  $M_y$  para ambos os integradores, apenas com uma diferença de fase maior atribuída do que no Campo externo da fig. 25. Assim, a diferença entre os métodos só será relevante quando nos interessarmos em aspectos mais específicos do relaxamento de sistemas que não os mecanismos de inversão e o estado final. Esse é justo o caso de cargas topológicas onde é importante que a trajetória seja suave e num domínio constante, e também é relevante quando desejamos adicionar efeitos externos além de Campos Zeeman, como correntes elétricas e espalhamentos estocásticos advindos de temperaturas finitas.

Para especificar qual aspecto da dinâmica é exatamente alterado com variações no espaço de fase, vamos nos remeter à eq. 5.13, a energia de troca entre uma célula e seus primeiros vizinhos. Vamos escrever a densidade de energia de troca equivalente entre apenas duas células adjacentes a partir dessa equação. Isso resulta em:

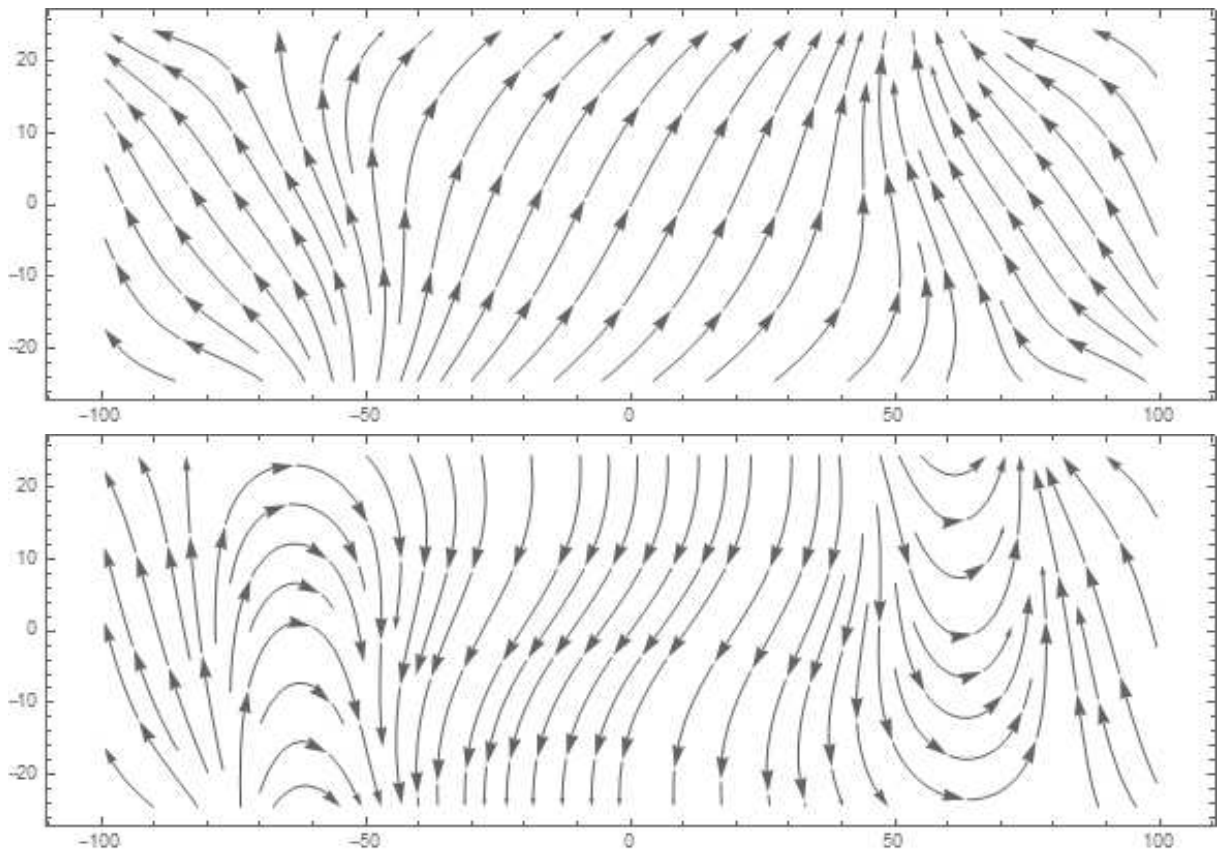
$$\frac{E_{ex}^{i,j}}{a_0^3} \approx A \left| \frac{\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j}{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j} \right|^2 \quad (5.43)$$

Em que  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = a_0$  é o parâmetro de rede de diferenças finitas, escrito em função das posições de centro das células. Estamos analisando a contribuição de troca pois é a que prevalece no curto alcance.

Podemos ver na eq. 5.43, que a densidade de energia *por ligação* entre momentos magnéticos tende corretamente a ter uma dependência ignorável com  $a_0$  apenas nos casos em que as variações de magnetização nos sítios  $i$  e  $j$  são proporcionais às distâncias, i.e pouca variação nas menores distâncias e mais variação somente em maiores valores de  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Nos casos onde essa proporcionalidade é quebrada, também a densidade de energia passa a depender explicitamente da escolha da grade de diferenças finitas. Apesar disso ser válido para todas as contribuições de energia no sistema, o efeito é mais exacerbado na interação de troca devido ao caráter de curto alcance. Por exemplo, necessariamente na formação de uma carga topológica (eq. 3.3), a hipótese fundamental do micromagnetismo não é válida e o tempo de formação irá depender da nossa escolha de rede discreta.<sup>75</sup> Como o ponto de Bloch é uma singularidade, estará localizado entre células e fora do domínio efetivo que somos capazes de descrever com diferenças finitas.

Com um grau menor de desvio, essa tendência limite do modelo também é observada em sistemas com dinâmica mais complexa, mesmo sem envolver cargas topológicas. Dessa

Figura 27 – Mecanismo de inversão (primeiro instante em que  $M_x = 0$ ) para o problema #4.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Acima, inversão do Campo à 170 graus do eixo-x positivo, e abaixo a inversão do Campo à 190 graus do eixo-x positivo. No gráfico estão representadas as linhas de Campo da magnetização  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  no plano XY.

maneira, o grau de desvio de soluções da equação LLG do seu domínio original é dado de acordo com variações intensas na magnetização local. Essas variações podem voltar a se tornarem pequenas conforme o amortecimento induz um novo equilíbrio, de maneira que a dinâmica ainda seja bem representada no geral. Podemos ilustrar esse fato com um gráfico das linhas de Campo de  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$  no instante em que  $M_x = 0$ , ou seja, a representação do mecanismo de inversão de cada um dos sistemas.

Como é possível observar nos gráficos da fig. 27, os mecanismos de inversão em cada caso apresentam diferenças substanciais. No primeiro caso, com o Campo na direção à 170 graus do eixo-x positivo, podemos ver que a inversão da magnetização se dá por uma rotação razoavelmente coerente de 3 regiões distintas ao longo do plano XY. Essas zonas podem ser divididas a partir das faixas nos pontos  $x_1 \approx -50nm$ ,  $x_2 \approx 70nm$  que possuem divergências  $\nabla \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}_i)$  positiva e negativa respectivamente, portanto representando uma transição entre diferentes fluxos do Campo na direção x. A afirmação de que podemos inferir

o sinal da divergência apenas a partir das direções do Campo em cada ponto da fita segue direto da eq. 2.22, onde o vetor magnetização possui uma única norma  $M_s$  através de todo o volume considerado. Sem nenhuma mudança local no módulo da magnetização, somente a direção da mesma em um dado ponto é suficiente para conhecermos as propriedades básicas de fluxo da mesma. Note que  $\nabla \cdot \mathbf{m} = -\rho$  é a densidade de cargas magnéticas (dipolares) do Campo magnetostático da eq. 2.35. Isso implica que o mecanismo de inversão nesse caso é a formação de fontes locais de cargas de magnetização, com uma conservação global da carga resultante. As cargas são induzidas pela presença do Campo externo e o seu fluxo resulta no desvio do único domínio original e na formação das 3 regiões distintas na figura, finalmente resultando no estado final com sentido oposto.

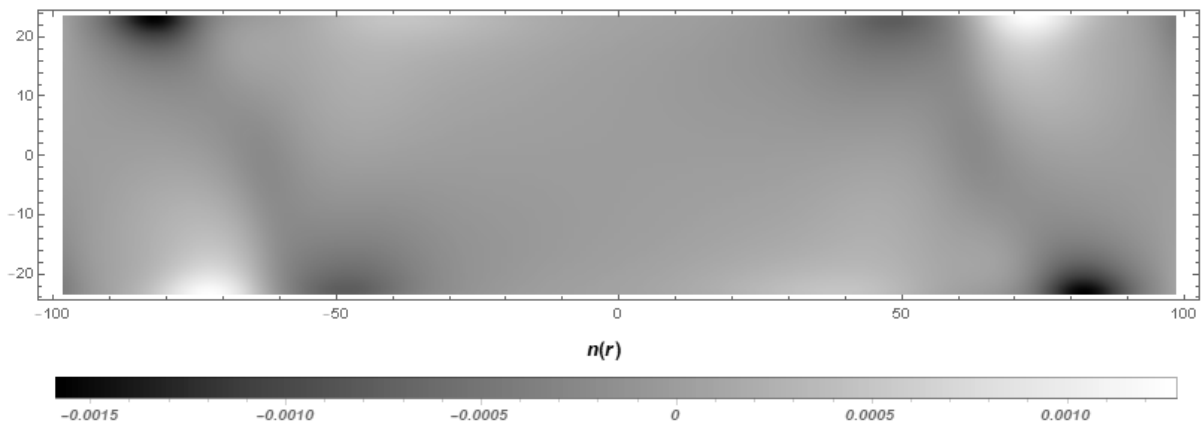
Do ponto de vista da eq. LLG em 2.47, essas 3 regiões se comportam momentaneamente como domínios e poderiam possuir uma precessão a princípio com direções independentes entre si. No entanto, seguindo a hipótese micromagnética, a transição entre essas regiões é suave e a dinâmica nessas zonas de divergência se comportam de maneira próxima ao descrito pelo modelo. Como consequência, os integradores se comportam razoavelmente da mesma forma, sem fugir muito do domínio original da equação, predominando a diferença de fase pela consideração total da interação magnetostática no caso esférico.

Com o Campo aplicado à 190 graus do eixo-x positivo, temos da mesma forma três regiões distintas de fluxo na fig. 27. No entanto, dessa vez há uma violação mais intensa da eq. 2.19, com momentos magnéticos variando até um ângulo de  $\pi$  entre si dentro de um curto espaço de  $\approx 20$  nm na direção do eixo-x. Como mencionado anteriormente, essas regiões de transição caracterizam paredes de domínio do tipo Néel - com rotação no próprio plano de anisotropia, nesse caso apenas a de forma induzida pela desmagnetização. Diferentemente do primeiro caso, a circulação no fluxo observada em duas faixas extremas da fita representa uma transição de domínio efetiva e não transiente. Na prática isso significa que é necessário que as paredes precessionem de forma independente para colapsarem no estado final em um único domínio s-state.

As regiões locais de transição não são mais fontes de carga dipolar como no caso anterior. Como podemos ver na fig. 27, não há divergência apreciável do Campo nas faixas de extremidade, mas sim circulação, o que corresponde a um termo rotacional  $\nabla \times \mathbf{m}$  mais intenso, e essa diferença é o que torna a dinâmica mais complexa nesse caso. De fato, os centros de inversão formados podem ser relacionados à uma densidade de carga topológica muito fraca e transiente, mas que se forma nas bordas do material e se sustenta enquanto dura a rotação do Campo na fig. 27. Podemos medir essa densidade de carga a partir da definição  $n(\mathbf{r}) = \|\mathbf{G}\|$  (eq. 3.1), e expor em um gráfico como na fig. 28. Note no gráfico que o mecanismo de inversão ocorre com pares de cargas nas faixas de transição entre domínios, com uma terceira carga em posição oposta no eixo-y à cada par. Um mecanismo



Figura 28 – Densidade de carga topológica  $n(\mathbf{r})$  no momento da inversão do Campo para o segundo caso do problema #4.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Na figura cada ponto do plano XY da amostra está exibido com sua respectiva densidade topológica local, de acordo com a eq. 3.1.

similar ocorre na formação e inversão da polaridade de vórtices com carga  $Q = 1/2$ .<sup>75</sup> Apesar dos valores de  $n(\mathbf{r})$  serem baixos, a carga total na amostra nesse instante, segundo a eq. 3.1, equivale a  $Q = 4.7 \times 10^{-3}$ .

Mais importante que isso é também o fato de haver uma concentração de cargas nos extremos da amostra onde ocorre a transição entre domínios. Apesar da carga topológica não definir uma classe de homotopias nesse caso, ela ainda acompanha por definição a presença de um giroacoplamento  $\mathbf{G}(\mathbf{r})$  não-nulo, sendo que  $\|\mathbf{G}\|$  é por definição um invariante local para um dado domínio.<sup>65,72</sup> Dessa forma, as densidades  $n$  e  $\rho$  podem ser usadas como medidas da transição entre domínios magnéticos mesmo quando não tratamos de classes topológicas, a depender do mecanismo responsável pela transição ser uma fonte transiente de cargas topológicas ou magnetostáticas.

Voltando para a eq. 5.43, isso implica também em que localmente há uma variação grande entre momentos magnéticos adjacentes que causa uma forte dependência entre a densidade da energia de troca por ligação  $A$ , e a discretização  $a_0 = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Esse desvio também acontece no outro caso de Campo e também no caso geral, pois não há nenhuma razão para assumirmos que  $a_0 = |\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j|$  em qualquer circunstância. Apenas em situações de variação rápida e brusca da magnetização entre pontos próximos porém, é que o desvio será grande o suficiente para alterar a dinâmica com integradores diferentes. Essas alterações dependem principalmente de como as propriedades do espaço de fase do modelo são preservadas, com uma correspondência completa ocorrendo apenas no caso simplético. Caso o integrador seja simplético, iremos encontrar uma trajetória que para cada ponto está na vizinhança da que obteríamos caso fosse possível uma solução analítica do modelo

contínuo, ainda pertencendo ao espaço de fase original, enquanto em outros casos podemos obter trajetórias que momentaneamente possuem pontos completamente fora do domínio esperado da equação (exigindo por exemplo a renormalização do módulo ou apresentando um desvio na energia). Note que, de qualquer maneira, ambos os integradores voltam a corresponder ao final da dinâmica, quando a hipótese micromagnética volta a ser validada de maneira generalizada na amostra.

## 5.4.2 Benchmarking

Vamos avaliar também a implementação em GPU do método micromagnético que combina a Hamiltoniana equivalente com a regra do ponto médio esférico, usando critérios de performance (como tempo de simulação, complexidade do algoritmo, taxa de transferências de memória) e de precisão do modelo. Todas as simulações abaixo assim como grande parte das simulações desse trabalho foram realizadas em placas gráficas GPU *Nvidia Tesla K40* com memória global gráfica de 12 GB, integradas com 64 processadores *Intel i7-6700K* em um nó de um cluster SGI com memória RAM compartilhada de 128 GB disponíveis.

Nas tabelas 2 e 3 apresentamos os resultados numéricos de performance dos métodos do ponto médio esférico aplicados no problema #4. No caso do integrador preditor de Adams, usamos 3 passos iniciais com o método esférico de Euler. Nossa tolerância para convergência do integrador corretor é de  $\epsilon_a = 10^{-8}$  em ambos os casos. As mesmas simulações com parâmetros de material idênticos aos da seção anterior foram feitas, com a única diferença de que vários valores de  $a_0$  e  $\Delta t$  foram testados a fim de verificar que de fato o resultado independe do tamanho da célula para  $a_0 < \lambda_{ex}$  (eq. 4.5) e também o comportamento do erro com o aumento do passo temporal. Um número grande de 300000 passos temporais com  $\Delta t \approx 10.89 \times 10^{-15}$  s foi utilizado na tabela 2 a fim de também medirmos a evolução temporal do erro na integração e conseqüentemente o grau simplético do método. Na tabela 3 também foram realizados 300000 passos temporais (o que agora resultam em tempos totais diferentes) mas com  $a_0 = 2.5$  nm em todos os casos.

Para diferentes valores de  $a_0$  e  $\Delta t$  mostramos o erro máximo encontrado durante os passos da dinâmica dado por  $e_\alpha = ((\alpha_n - \alpha)/\alpha)$  e o número de iterações de passos corretores necessários para se passar ao próximo passo dinâmico,  $N_{iter}$ . Os números da tabela correspondem respectivamente ao mínimo, médio e máximo para cada caso de Campo externo, discretização e método preditor. Note que na tabela 2,  $N_{iter}$  independe em geral do tamanho da rede de diferenças finitas no espaço e da dinâmica da magnetização em si, ainda que haja uma dependência direta de  $\mathbf{m}$  nos passos da dinâmica nos fatores  $\mathbf{f}_i$  da eq. 5.24.

Tabela 2 – Dados de performance numérica do método preditor-corretor esférico na eq. LLG, para integrações preditoras de Adams e Euler (eqs. 5.35 e 5.34).

$\delta$ (graus)	$a_0$ (nm)	$N_{iter}$	$e_{\alpha,max}$	Método
170	5.0	1/2/5	$1.32 \times 10^{-7}$	Adams
170	3.125	1/2/5	$1.51 \times 10^{-6}$	Adams
170	2.5	1/2/6	$3.02 \times 10^{-6}$	Adams
190	5.0	1/2/5	$1.24 \times 10^{-7}$	Adams
190	3.125	1/2/6	$2.28 \times 10^{-6}$	Adams
190	2.5	1/2/5	$3.25 \times 10^{-6}$	Adams
170	5.0	3/5/9	$2.1 \times 10^{-7}$	Euler
170	3.125	3/5/8	$1.65 \times 10^{-6}$	Euler
170	2.5	4/5/10	$2.92 \times 10^{-6}$	Euler
190	5.0	3/5/9	$2.63 \times 10^{-7}$	Euler
190	3.125	4/6/9	$3.38 \times 10^{-6}$	Euler
190	2.5	4/5/11	$6.72 \times 10^{-6}$	Euler

Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Na tabela, mostramos os dois tipos de Campo externo para o problema #4 ângulos de Campo externo  $\delta = (170, 190)$ , com diferentes discretizações  $a_0$  e  $\Delta t \approx 10.89 \times 10^{-15}$  s. Os números de iterações de passo corretor por passo temporal estão no formato min/méd/max e mostramos também o erro relativo máximo sendo esse  $e_{\alpha,max} = \max((\alpha_n - \alpha)/\alpha)$  ( $\alpha_n$  dado pela sequência 5.39).

A independência da discretização  $a_0$  não é totalmente inesperada, uma vez que em qualquer simulação todos os valores abaixo do comprimento característico  $\lambda$  pertinente cumprem a hipótese micromagnética. Sendo assim, todos as discretizações que consideramos possuem a mesma estrutura aproximada de domínios magnéticos coerentes que interagem em segunda ordem de acordo com o modelo Hamiltoniano da eq. 5.15. Consequentemente, todos esses domínios discretos de  $\mathbf{m}$  são perturbações dos sistemas de spin clássico seguindo a equação LLG. Entre os dois métodos preditores no entanto, há uma diferença significativa no número médio de iterações necessárias para se alcançar o critério de convergência, devido ao fato do integrador de Euler não possuir nem precisão e nem as propriedades corretas para preservar a magnetização. Ainda assim, é importante enfatizar que ambos os métodos devem convergir para o mesmo resultado *por passo* (o valor real de  $\mathbf{m}_{i,n+1}$ ), uma vez que a iteração com o método corretor é o que dita esse aspecto. A integração mais precisa no método de Adams, ainda que aproxime o sistema mais rápido do valor de convergência, é um mero *ansatz* para o procedimento iterativo do ponto médio esférico, que é o que conserva de fato a estrutura simplética da magnetização.

Outro indicador de independência do número de iterações do algoritmo PC da dinâmica da magnetização em si é o fato de que os valores mínimos e máximos de iterações

Tabela 3 – Dados de performance numérica do método preditor-corretor esférico na eq. LLG, para integrações preditoras de Adams e Euler (eqs. 5.35 e 5.34).

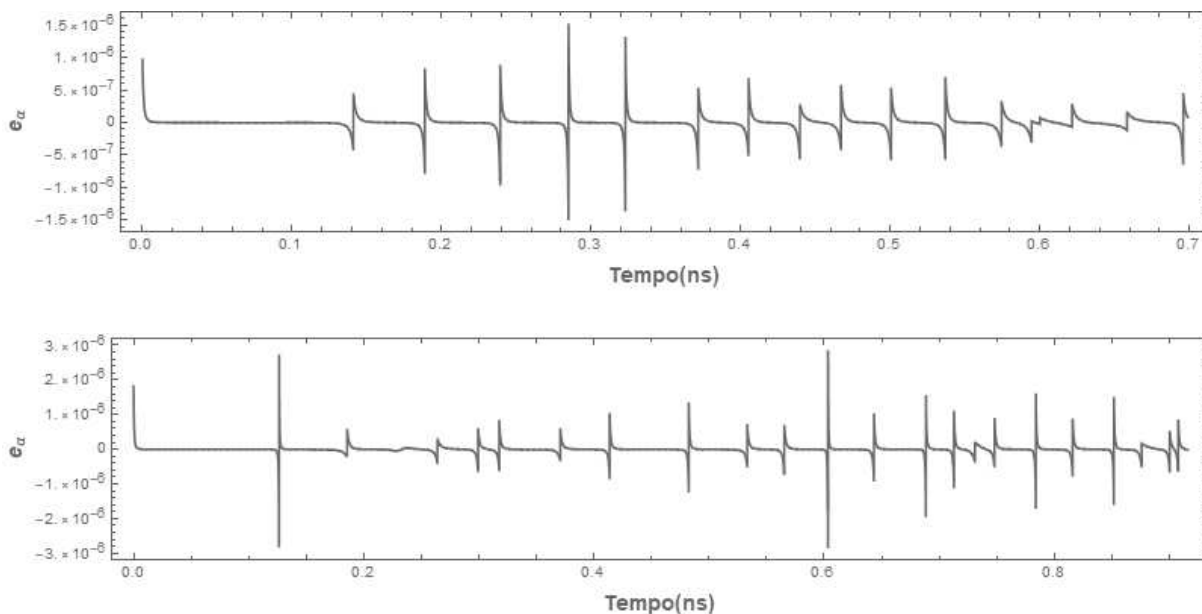
$\delta$ (graus)	$\Delta t$ (fs)	$N_{iter}$	$e_{\alpha,max}$	Método
170	1.0	1/2/3	$3.5 \times 10^{-6}$	Adams
170	10.0	1/2/5	$3.02 \times 10^{-6}$	Adams
170	100.0	3/5/9	$3.35 \times 10^{-6}$	Adams
190	1.0	1/2/4	$2.89 \times 10^{-6}$	Adams
190	10.0	1/2/6	$3.25 \times 10^{-6}$	Adams
190	100.0	2/5/10	$4.03 \times 10^{-6}$	Adams
170	1.0	2/3/8	$3.05 \times 10^{-6}$	Euler
170	10.0	3/5/9	$2.93 \times 10^{-6}$	Euler
170	100.0	4/8/13	$3.34 \times 10^{-6}$	Euler
190	1.0	2/4/7	$7.34 \times 10^{-6}$	Euler
190	10.0	2/5/9	$6.72 \times 10^{-6}$	Euler
190	100.0	3/7/15	$7.23 \times 10^{-6}$	Euler

Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Na tabela, mostramos os dois tipos de Campo externo para o problema #4 (ângulos de Campo externo  $\delta = (170, 190)$ ), com diferentes passos temporais  $\Delta t$  e  $a_0 = 2.5 \times 10^{-9}$  m. Os números de iterações de passo corretor por passo temporal estão no formato min/méd/max e mostramos também o erro relativo máximo sendo esse  $e_{\alpha,max} = \max((\alpha_n - \alpha)/\alpha)$  ( $\alpha_n$  dado pela sequência 5.39).

no decorrer de toda a dinâmica são próximos da média em ambos os casos de Campo, e não parecem ser sensíveis aos mecanismos completamente diferentes de inversão do sentido da magnetização na amostra. Em todos os casos analisados o erro máximo da integração medido através de  $(\alpha)_n$  foi proporcional à  $10^{-6}$ , com uma convergência mais lenta por passo para maiores valores de  $\Delta t$ . Ainda assim, com passos temporais maiores, um intervalo maior de eventos pode ser simulado com menos custo computacional.

Na fig. 29 vemos a evolução temporal do erro relativo  $e_\alpha$ , com  $\alpha_n$  dado pela eq. 5.39, com dois casos de parâmetros computacionais e Campo externo:  $(\delta, a_0, \Delta t) = (170, 3.125 \text{ nm}, 10.89 \text{ fs}), (190, 2.5 \text{ nm}, 10.0 \text{ fs})$  para os gráficos acima e abaixo respectivamente. Esses dados mostram que com o integrador do ponto médio esférico, os erros se apresentam como flutuações rápidas na sequência  $(\alpha)_n$ , se mantendo abaixo de  $e_\alpha < 10^{-7}$  durante grande parte da dinâmica. As flutuações dependem de detalhes do modelo e são independentes dos parâmetros computacionais dentro de passos temporais que cumprem a condição CFL, o que significa em todos os casos, com um integrador simplético. No entanto, a Hamiltoniana representada pela eq. 5.15 se torna uma perturbação cada vez maior da versão contínua conforme  $\Delta t$  aumenta, e a aproximação de uniformidade dos Campos dentro de cada célula se torna menos válida na dimensão temporal. Por esse motivo, e pelo fato de que o primeiro valor  $\alpha_n < 0$  desestabilizaria a dinâmica por completo, a melhor

Figura 29 – Evolução temporal do erro da sequência  $(\alpha)_n$ .

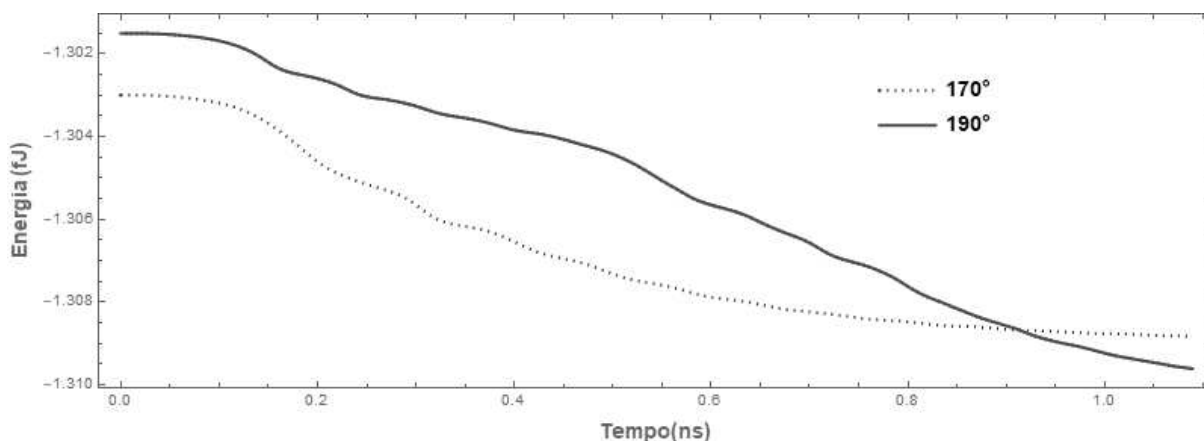
Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Representamos os casos  $(\delta = 170, a_0 = 3.125\text{nm}, \Delta t = 10.89\text{fs})$  (acima) e  $(\delta = 190, a_0 = 2.5\text{nm}, \Delta t = 10.0\text{fs})$  (abaixo). Em cada passo o erro relativo é dado por  $e_\alpha = (\alpha_n - \alpha)/\alpha$ .

avaliação do erro de integração durante a simulação é medirmos o valor máximo atingido ao invés de meramente a média dos erros através do tempo.

Além da condição numérica de preservação da sequência  $(\alpha)_n$  durante a simulação, também podemos verificar nas dinâmicas a condição física de preservação da estrutura de Lyapunov, i.e, a energia deve ser uma função monotonamente decrescente com o tempo para Campos externos constantes. De fato, isso é observado em todos os casos, como na fig. 30, em que mostramos a evolução temporal da energia para ambos os casos de Campo e  $(\Delta t, a_0) = (10.89\text{fs}, 2.5\text{nm})$ . Energeticamente, os diferentes mecanismos de inversão correspondem à diferentes taxas de diminuição de energia, devido a diferentes ondas de spin induzidas no sistema em diferentes direções. Como os Campos externos são constantes, mesmo assim devemos observar a decrescência da energia em todos os passos. No caso de desligarmos o Campo, a condição deixa de ser válida durante o período em que  $\mathbf{B}_{\text{ext}} \rightarrow 0$  e passa a ser válida novamente com a anulação do Campo externo. Para Campos baixos e suficientemente uniformes em todo o volume, podemos aproximar esse desligamento como sendo instantâneo, mas em diversas situações é interessante diminuir o Campo sucessivamente em vários passos, por exemplo com uma taxa exponencial tal que  $\mathbf{B}_{\text{ext,final}} = e^{-t/\tau} \mathbf{B}_{\text{ext}}, \tau \in \mathbb{R}$ .

Figura 30 – Evolução temporal da energia para dois casos de Campo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Usamos  $(a_0, \Delta t) = (2.5 \text{ nm}, 10.89 \text{ fs})$ .

Sobre a adequação do modelo ao problema físico do micromagnetismo, resta uma comparação com o método do ponto médio clássico, sendo esse o mais próximo do que desenvolvemos aqui. No método clássico desenvolvido por exemplo por D'Aquino,<sup>92</sup> um número significativamente maior de iterações é necessário, mesmo com a iteração sendo feita através do método de Newton na referência. Isso é devido à necessidade de um critério muito mais rígido de convergência, de  $\epsilon_a < 10^{-11}$ . Por sua vez, esse critério é necessário, pois na solução do sistema de integração os Campos magnetostáticos são truncados durante o processo de iteração e calculados em sua totalidade apenas na etapa inicial. Esse custo computacional de iterações é justificado pelo argumento de que a iteração é muito mais eficiente do que o cálculo repetido do Campo desmagnetizante na estrutura, mesmo que esse ainda esteja aproximado. Além disso, o integrador simplético também possui melhor adaptação ao espaço de fase  $S^2$ , convergindo mais rapidamente à trajetória esperada durante a iteração. Dessa maneira, com o método da eq. 5.35 possuímos um bom custo-benefício entre obter os Campos desmagnetizantes em sua totalidade e ainda simular estruturas de tamanhos experimentalmente relevantes de maneira viável.

A análise remanescente importante sobre o nosso modelo é o quesito de performance do algoritmo com respeito à sua eficiência. Uma comparação direta (em termos de tempo de duração das simulações) com modelos seriais é pouco informativa em virtude das cargas de trabalho serem muito diferentes entre si (i.e se o problema a ser solucionado é mais intensivo em uso de memória *versus* em uso de processamento). No caso serial, a otimização mais comum são grandes listas de vizinhanças entre todas as células, que são utilizadas para poupar os recursos de processamento limitado,<sup>109</sup> enquanto no caso paralelo usamos o método de N-corpos para aliviar as limitações de memória inerentes das placas GPU.

Ainda assim, podemos modelar a complexidade do algoritmo em termos do número de operações necessárias em cada passo temporal e o número de processamentos em paralelo que são executados. Primeiramente, vamos enfatizar que a lógica de *threads* e *blocks* demonstrada para as GPU CUDA no capítulo 4 é uma mera **abstração** ao nível do algoritmo que não corresponde ao processamento simultâneo que é efetivamente possível na GPU. Em particular, para as Tesla K40, ainda que milhões de threads possam ser executados virtualmente em um único fluxo, a quantidade efetiva de núcleos de processamento físicos que a placa possui é de  $N_{core} = 2888$ . Essas cores são a correspondência mais próxima dos núcleos de processamento de CPUs convencionais.

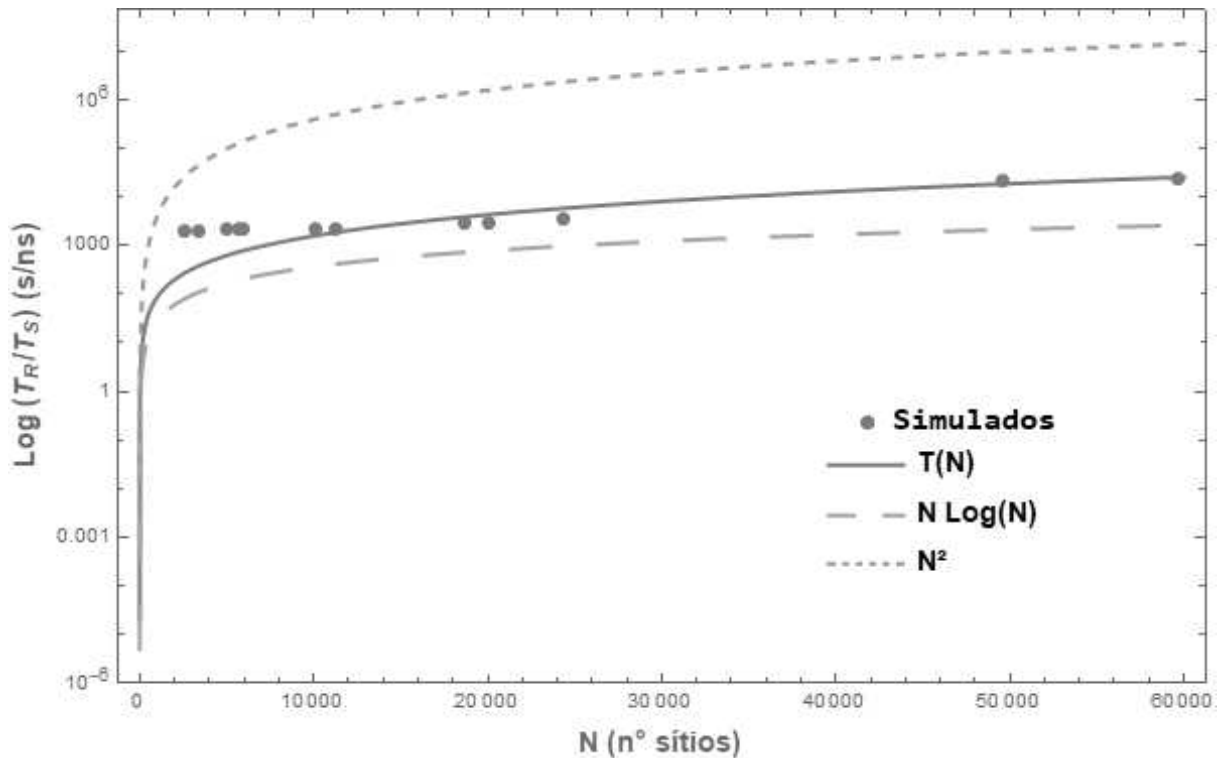
Assim sendo, em um dado momento do fluxo do algoritmo de integração, um número  $N(n) = n/N_{core}$  dos  $n$  cálculos individuais de um passo de dinâmica (incluindo o cálculo dos Campos locais efetivos por célula) são realizados simultaneamente. Podemos em segundo lugar normalizar o tempo total de execução do nosso algoritmo, dado por  $T_R$  (em segundos), em função do tempo total simulado pela dinâmica micromagnética,  $T_S = N_{passos}\Delta t$ , dado em nanossegundos com  $N_{passos}$  sendo o número total de integrações com passo  $\Delta t$ . Assim, a razão  $T_R/T_S$  fornece uma medida adimensional, e independente de  $\Delta t$  e do número de passos, para a duração total de uma simulação.

Com essas definições podemos propor uma expressão analítica para o custo computacional  $T_R(N)/T_S$  do modelo micromagnético Hamiltoniano que abordamos na eq. 5.22. Como discutido até então, evidenciado pelas eqs. 4.22 da regra do ponto médio esférico e 5.18 para o Campo magnetostático, essas são as duas etapas dominantes em cada passo de integração, no sentido de exigirem o maior número individual de cálculos para um único passo de tamanho  $\Delta t$ . A cada iteração  $k$  do passo corretor é preciso calcularmos novamente todos os Campos do sistema, e dentre esses é necessário obtermos  $n^2$  interações entre pares de células para cada instância do Campo desmagnetizante presente na amostra.

Na GPU, já vimos que o método de N-Corpos aplicado para o cálculo do Campo desmagnetizante apresenta uma complexidade proporcional à  $\mathcal{O}(n^2/P)$ , com  $P$  sendo o número de *threads* totais ativos durante o processamento de um bloco de interações entre pares (que na ocasião denominamos de *tile*). Para o programa como um todo porém, não é necessário assumirmos sincronia entre esse cálculo e a obtenção dos demais Campos (troca, DM, anisotropia, etc.) ou medidas que são relevantes para o passo presente e não são necessárias para a integração (como valores esperados da magnetização e energia). Dessa forma, outros cálculos podem ser comunicados para a GPU simultaneamente ao processo de tiles do cálculo do Campo  $H_{dip}$ , maximizando assim a ocupação das transferências de memória e promovendo *latency hiding*.

Por simplicidade, vamos supor uma ocupação *máxima* da taxa de transferência

Figura 31 – Tempo total  $T_R$  sobre tempo total simulado  $T_S$  para estruturas de diversos números de células  $N$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: As curvas tracejadas representam o caso de um algoritmo ideal com complexidade proporcional à  $N\text{Log}(N)$  e a complexidade esperada do cálculo da interação magnetostática caso um método de força bruta seja aplicado ( $N^2$ ). A curva  $T(N)$  que modela a eficiência do algoritmo de acordo com os pontos simulados é tal que  $a_1 = 1.68 \times 10^{-6}$ ,  $a_2 = 3.95 \times 10^{-3}$ ,  $\Delta t = 43$  fs, e  $N_{iter} = 2$ .

de memória, de maneira que, aproximadamente, em nenhum momento de execução do código em paralelo na GPU se tenha um número menor do que  $N_{core}$  de processadores efetivos trabalhando ou em algum fluxo de threads ou em alguma cópia entre dados da CPU e GPU. Com essa hipótese, temos dois extremos possíveis para a execução de uma simulação: por um lado, caso todas as operações sejam serializadas em cada core (por exemplo através de divergências de *warp* mencionadas no cap. 4), temos um crescimento do custo computacional por passo de  $T(N) = N_{iter}N^2$ , proporcional ao produto entre o número médio de iterações durante uma integração e o número de interações entre pares do Campo magnetostático (que possui o maior custo dentre todas as operações).

Por outro lado, desenvolvemos uma combinação de otimizações em nosso método, sendo essas: o método de N-Corpos para aproveitarmos a memória *shared* da GPU, a integração simplética para diminuir o número de iterações necessárias no algoritmo Predictor-Corretor, o uso da lista de vizinhos no cálculo dos Campos locais e a simultaneidade das



operações e das transferências de memória. Com essas otimizações devemos nos aproximar em algum grau do caso ideal de um algoritmo que minimiza o tanto quanto possível o crescimento do custo computacional com o aumento do número de células de simulação, que é demonstradamente proporcional à  $T(N) = N_{iter}N\text{Log}(N)$ .<sup>34</sup> É importante enfatizar que ainda estamos calculando as  $N^2$  interações do Campo desmagnetizante, sem nenhum tipo de aproximação ou hipótese complementar sobre as condições de contorno, ou sobre a convergência numérica. Portanto, o custo computacional real do algoritmo como um todo pode ser comparado com outros em geral assumindo que o mesmo será uma combinação linear entre o melhor e pior caso de crescimento, a partir da seguinte expressão:

$$T(N) = a_1N_{iter}N^2 + a_2N_{iter}N\text{Log}(N) \quad (5.44)$$

Em que  $(a_1, a_2) \in (0, 1)$  são parâmetros de ajuste. A eq. 5.44 descreve o aumento do custo computacional  $T_R/T_S$  em função do número total de células por processador paralelo.

Na fig. 31 simulamos diversos tamanhos de estruturas  $N(n)$  mostrando o ajuste  $T(N)$  correspondente e os respectivos limites  $N^2$  e  $N\text{Log}(N)$ . Todas as simulações são referentes a diferentes valores de  $a_0$  e  $\Delta t = 43fs$  no Campo de 170 graus no problema #4, que totalizam aproximadamente  $T_S = 13$  ns em todos os casos. O gráfico em escala logarítmica permite representar melhor as grandes diferenças em ordem de grandeza para cada um dos casos extremos. Para os valores de  $N$  testados, a curva  $T(N)$  modelada se aproxima mais do caso  $N\text{Log}(N)$  do que do caso quadrático. Isso também é visto pelos valores estimados dos parâmetros de ajuste, com  $a_1 \ll a_2$ . A compatibilidade com a curva modelada é maior em valores intermediários de  $N$  e menor nos casos onde  $N \rightarrow 1$ . Essa aproximação mais próxima da quadrática na complexidade numérica para valores pequenos de  $N$  pode ser explicada pela baixa utilização de recursos da GPU, onde a nossa hipótese inicial de ocupação maximizada da taxa de transferências de memória não se verifica. Nesses casos simulações simultâneas em mais de um sistema ou a atribuição de mais de um thread para cada sítio micromagnético são alternativas de otimização.

Especificando os dados que medimos, para uma ordem de grandeza de  $N = 10^4$  elementos por núcleo de processamento (lembrando que esse é o fator paralelizado  $N = n/N_{core}$ ), no gráfico temos um custo computacional médio  $T(N)$  na ordem de  $10^3$  s/ns, o que em termos mais práticos equivale a 0.3 horas para simular cada nanossegundo de dinâmica. Dada a alta complexidade do método como um todo e considerando o fato do cálculo dos Campos magnetostáticos serem realizados em sua totalidade, o algoritmo se encontra em um estado muito otimizado e alinhado com os tempos de execução típicos dos demais pacotes de simulação micromagnética.

As curvas similares de eficiência para pacotes como o MuMax3<sup>64</sup> e VAMPIRE,<sup>103</sup> também normalizadas para número de processadores disponíveis e tempo simulado, apresentam comportamento um pouco mais próximo de um crescimento  $\mathcal{O}(N \log(N))$ . Isso é esperado pois em praticamente todos os outros casos, aproximações e considerações numéricas adicionais são feitas para se obter uma ordem menor do que quadrática para o cálculo dos Campos desmagnetizantes. Nossa abordagem apresenta uma maneira de maximizar as otimizações possíveis do problema mais geral, mantendo a fidelidade física das simulações sem hipóteses numéricas adicionais sobre as condições iniciais ou de contorno que alterem os critérios de convergência dos modelos contínuos originais. Como ressaltado nessas próprias referências, a consideração do modelo dessa forma aprimora resultados que sejam sensíveis às anisotropias de forma e cristalina, assim como modelos térmicos estocásticos e transições entre estados com diferentes cargas topológicas.

## Parte II

Aplicações, Resultados e Discussões

## 6 Limites de Tamanho para a Estabilidade de Cargas Topológicas em Nanodiscos

Como aplicação direta do modelo e da implementação desenvolvidos nessa tese, foi feito um estudo detalhado, via simulações, de algumas propriedades topológicas de nanodiscos de Py com seu tamanho reduzido. Esse trabalho foi publicado no Journal of Magnetism and Magnetic Materials, e está anexado ao final do capítulo **com a devida permissão. Todas as referências para afirmações feitas nesse capítulo também estão contidas no texto publicado. Referências à essa tese devem conter referências a esta publicação.** A contribuição do autor dessa tese para o trabalho foi total: dentre duas rodadas de simulação da mesma faixa de tamanhos de nanodiscos (uma com parâmetro de discretização  $a_0 = 5$  nm e outra posterior com  $a_0 = 2.5$  nm), a segunda e definitiva foi conduzida, analisada e exposta inteiramente pelo autor dessa tese, assim como a escrita majoritária do artigo e a elaboração dos gráficos e imagens.

É um dado experimental conhecido que a formação de vórtices (que possuem carga topológica  $|Q| = 1/2$ ) nesse material é limitada pelo diâmetro e pela espessura dos discos, de maneira que estruturas muito finas e/ou muito pequenas em diâmetro não possuem vórtices como estados de equilíbrio mas sim estados saturados. No caso de nanodiscos o estado saturado é chamado também de cebola ou C-state, devido ao alinhamento ao longo da borda induzido pela anisotropia de forma.

Como nesse caso a carga  $Q \in \mathbb{Q}$  não é inteira, para que o vórtice seja um estado estável no sistema é de fato necessário que também seja o estado de menor energia. Ainda assim, quando o sistema assume esse estado, parte das propriedades topológicas mencionadas no capítulo 3 ainda se manifestam. Em particular, uma vez que o sistema apresenta um Campo  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  com estrutura de vórtice, a transição para um estado saturado implica necessariamente na dissipação do vórtice apenas nas bordas do volume magnetizado, onde o mesmo colapsa em ondas de spin que se propagam através de todo o material. Dessa maneira, vórtices ainda podem ser usados para armazenamento e transporte de informação num sistema, contando com a vantagem de que são duplamente degenerados: possuem uma quiralidade no plano da sua rotação e uma polaridade, a depender da direção da componente de magnetização fora do plano em seu núcleo. Podemos combinar a robustez do estado de vórtice no bulk do material com a degenerescência dupla para aplicações com dispositivos com dois bits por quasipartícula.

De especial interesse para aplicação são vórtices gerados em nanopartículas com formato de discos. Estas podem ser utilizadas como osciladores, usando-se a invariância aproximada da frequência de precessão do giroacoplamento, e também como unidades de memória magnéticas, através de inversões em sua quiralidade e/ou polaridade representando escritas de bits.

Um obstáculo no uso dessas nanopartículas são as escalas de tamanho envolvidas. Para estruturas com diâmetro e espessura muito reduzidos (abaixo de 100 nm e 20 nm respectivamente), mesmo após formado o vórtice passa a colapsar nas bordas do disco e o sistema assume a forma de um domínio saturado. Isso limita as faixas de aplicabilidade do material tanto para ser implementado como bit duplo de memória em um dispositivo quanto para que seja utilizado como nanopartícula em aplicações na biologia e na medicina, uma vez que essa já é a mesma escala típica de unidades de memória que funcionam baseadas em domínios saturados e com maior volatilidade.

Nesse trabalho uma solução para a redução do tamanho limite de estabilidade de vórtices em nanopartículas em formato de disco é proposta. Alternativamente às sugestões usuais que envolvem a dopagem do material com impurezas magnetizadas, que alteram a topologia do problema via modificações nos parâmetros magnéticos, propomos uma solução através de modificações diretas na geometria da amostra, induzindo efeitos de anisotropia de forma (cargas magnetostáticas volumétricas e superficiais) que promovem a estabilidade maior nos estados desejados para aplicações.

Para esse caso específico foi proposto o uso de estruturas inspiradas no jogo das *torres de Hanói*, que consiste em um empilhamento de discos de diâmetros diferentes. Com base nessa geometria, concebemos estruturas que sejam discos de diversos tamanhos (em particular, incluindo aqueles abaixo dos 100 nm de diâmetro e 20 nm de espessura), com dois discos empilhados acima e abaixo do centro do mesmo, sempre de tamanho consideravelmente menor em diâmetro e consideravelmente maior em espessura. A escolha de dois discos dispostos simetricamente em torno do eixo de rotação do diâmetro do disco maior visa antecipar a possibilidade de se inverter a polaridade de vórtices em potencial dessa estrutura, caso sejam estáveis, através de Campos externos. Com essa modificação simétrica a topologia do sistema resultante não privilegia a princípio nenhuma direção específica para a polaridade de vórtices.

As propriedades estacionárias de um vórtice magnético podem ser derivadas a partir da equação LLG em 2.47. Podemos reinterpretar a equação como a definição de um Campo efetivo atuando sobre uma quasipartícula (localizada no núcleo do vórtice) com velocidade  $\mathbf{v}$ . Para tanto, vamos primeiro multiplicar ambos os lados da eq. 2.47 por  $\mathbf{m}$ , com um produto vetorial pela esquerda. Usando a identidade  $\mathbf{a} \times (\mathbf{a} \times \mathbf{a}) = -a^2\mathbf{b}$  se  $\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$ ,

e rearranjando os termos, obtemos a nova forma da equação LLG:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} &= -\mathbf{m} \times (\gamma \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) + \mathbf{m} \times \left( \alpha \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) \\ \iff \mathbf{H}_{\text{eff}} &= \frac{1}{\gamma} \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} \end{aligned} \quad (6.1)$$

Nessa forma, o lado direito da eq. 6.1 pode ser visto como termos de um Campo efetivo. Note que esse Campo ainda deve estar relacionado com as interações que formam a energia livre da eq. 2.46, e o que explicitamos aqui é meramente o efeito coletivo de  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  no núcleo do vórtice, i.e as precessões de Campo e de amortecimento da fig. 8. Em particular, podemos definir um Campo equivalente giroscópico e um Campo equivalente dissipativo:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_g &= -\frac{1}{\gamma} \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \\ \mathbf{H}_d &= -\frac{\alpha}{\gamma} \frac{d\mathbf{m}}{dt} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Com essas definições, podemos relacionar os Campos  $H_g$  e  $H_d$  ao movimento do núcleo do vórtice reescrevendo a derivada temporal de  $\mathbf{m}$  em função da velocidade do núcleo:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\left( \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{d}{dr} \right) \mathbf{m} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{m} \quad (6.3)$$

Na relação estabelecida pela eq. 6.3 o regime estacionário já está implícito na existência da velocidade  $\mathbf{v}$  para uma quasipartícula no sistema. Essa velocidade deve ser derivada de um Campo magnetização sob uma transformação de Galileu, da forma  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{m}_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))$  para uma posição  $\mathbf{R}(t)$  do núcleo do vórtice, onde carregamos de maneira implícita toda a informação dinâmica do sistema, i.e os domínios são descritos em função de suas posições relativas à trajetória da quasipartícula. Para uma dada carga topológica,  $\mathbf{m}_0$  representa uma homotopia que descreve todos os estados possíveis no sistema para essa dada carga, onde nesse caso, a deformação entre diferentes estados resulta numa translação do centro das cargas sem alteração da sua estrutura interna, devido ao regime estacionário. Isso significa que  $m_0$  representa a trajetória  $\mathbf{R}$  de uma quasipartícula sem que suas propriedades (e.g o “raio” do vórtice, onde está localizada a componente fora do plano) sejam alteradas significativamente. Isso é válido tanto para cargas invariantes como no caso  $Q \in \mathbb{Z}$ , quanto para cargas transientes com alguma estabilidade, como é o caso de vórtices.

Na dinâmica Lagrangeana do núcleo do vórtice magnético, as componentes da densidade da força que atua sobre o sistema são dadas por produtos entre as derivadas espaciais de  $\mathbf{m}$  e os respectivos campos  $H$  equivalentes:

$$f_i = -\mu_0 H_k \frac{\partial m_k}{\partial x_i} \quad (6.4)$$

Em que usamos a notação de Einstein para representar a soma de índices repetidos. Inserindo as eqs. 6.3 e 6.2 na eq. 6.4, podemos chegar na densidade de força giroscópica:

$$\begin{aligned} f_i^g &= -\mu_0 H_i^g \frac{\partial m_l}{\partial x_i} = \mu_0 \frac{1}{\gamma} \epsilon_{lmn} m_m \frac{dm_n}{dt} \frac{\partial m_l}{\partial x_i} \\ &= -\frac{\mu_0}{\gamma} \epsilon_{lmn} m_l \frac{\partial m_m}{\partial x_j} \frac{\partial m_n}{\partial x_i} v_j \\ &= G_{ij} v_j \end{aligned} \quad (6.5)$$

E também na densidade de força dissipativa:

$$\begin{aligned} f_i^\alpha &= -\mu_0 H_i^\alpha \frac{\partial m_l}{\partial x_i} = \frac{\alpha \mu_0}{\gamma} \frac{dm_l}{dt} \frac{\partial m_l}{\partial x_i} \\ &= -\frac{\alpha \mu_0}{\gamma} \frac{\partial m_l}{\partial x_j} \frac{\partial m_l}{\partial x_i} v_j \\ &= -\alpha d_{ij} v_j \end{aligned} \quad (6.6)$$

Os tensores  $G_{ij}$  e  $d_{ij}$  podem ser expressos através de vetores com a transformação  $A_i = -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} A_{ik}$  resultando nas expressões  $\mathbf{f}^g = -\mathbf{g} \times \mathbf{v}$  e  $\mathbf{f}^\alpha = -\alpha \mathbf{d} \cdot \mathbf{v}$ . Agora devemos lembrar novamente que essas densidades de força devem estar relacionadas com a densidade  $\mathbf{f}_{\text{eff}}$  relativa ao termo de energia livre do sistema, que em geral é dada por:

$$\mathbf{f}_{\text{eff}} = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \mathbf{x}_j} \nabla \mathbf{x}_j = \mathbf{f}^g + \mathbf{f}^\alpha \quad (6.7)$$

A integração da eq. 6.7 no volume  $V$  do sistema que contém a quasipartícula nos leva à expressão para a força total  $\mathbf{F}$  em função dos vetores giroscópico total  $\mathbf{G}$  e dissipativo total  $\mathbf{D}$ :

$$\mathbf{F} = -\mathbf{G} \times \mathbf{v} - \alpha \mathbf{D} \cdot \mathbf{v} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (6.8)$$

A eq. de movimento 6.8 é conhecida como *equação de Thiele* e descreve a dinâmica de uma quasipartícula rígida em um sistema magnético dissipativo, cuja estrutura interna está implícita na massa efetiva  $m$ .

A equação de Thiele ressalta o caráter da precessão giromagnética e do amortecimento na modelagem de materiais magnéticos, com o primeiro termo representando o torque exercido na quasipartícula devido à presença de um Campo de giroacoplamento, e o segundo termo representando uma dissipação clássica proporcional à velocidade de deslocamento. O vetor giroscópico  $\mathbf{G}$  da eq. 6.8 corresponde exatamente à densidade de carga topológica da eq. 3.1, o que podemos verificar na definição do tensor  $G_{ij}$  da eq. 6.5.

Isso evidencia imediatamente que a estabilidade de quasipartículas cuja dinâmica é dada pela equação de Thiele está diretamente relacionada à conservação da carga topológica do problema. Em sistemas topologicamente estáveis o termo de precessão  $\mathbf{G} \times \mathbf{v}$  será conservativo, e a quasipartícula se comportará como uma versão escalonada do sistema micromagnético original, com a carga topológica comportando-se como um único domínio magnético, sustentado pela interação de troca e sujeito aos Campos magnetostático, anisotropias e Zeeman da eq. 2.47. Em outros casos essa passagem não é trivial, pois a própria eq. 6.8 perde a validade caso a topologia do sistema seja perturbada e o giroacoplamento consequentemente anulado ou se tornar descontínuo. Isso acontece em sistemas onde a aproximação de uma quasipartícula rígida não é válida, e no ansatz  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{m}_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))$  deveríamos adicionar mais termos correspondendo à perturbações desse caso fundamental.

Para esse trabalho de proposta de geometria favorável à formação de vórtices, o aspecto relevante da formulação de Thiele é o fato de que, para pequenas oscilações do núcleo na posição  $\mathbf{R}(t)$ , o sistema se comporta como um oscilador harmônico com potencial da forma:

$$U = \frac{1}{2}m\omega_R^2 R^2 \quad (6.9)$$

Onde  $R$  é a posição do núcleo do vórtice com respeito à posição de equilíbrio (no caso, o centro dos nanodiscos), e  $\omega_R$  a frequência de pequenas oscilações (particularmente conhecida como *modo girotrópico*). O valor de  $U$  deve coincidir com variações da energia magnetostática com respeito a  $U_0$  para um vórtice no centro, dado que  $\omega_R$  seja pequeno o suficiente.

Em aplicações utilizando nanopartículas desejamos tanto excitar um modo girotrópico para criar nano osciladores para medidas, quanto também causar a inversão da polaridade do vórtice para aplicações em bits de memórias magnéticas. A inversão de polaridade se dá através da transformação da carga topológica do sistema  $Q = \frac{np}{2}$ , em que  $n$  é o *índice* ou *winding number* do Campo  $\mathbf{m}$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ), e  $p$  é a polaridade do vórtice ( $p = \pm 1$ ). Por exemplo, para um vórtice com polaridade positiva ( $n = 1, p = 1, Q = 1/2$ ), um Campo externo intenso o suficiente irá, ao invés de meramente excitar uma frequência  $\omega_R$ , promover



a criação no sistema de uma partícula perturbativa ( $n = 0, p = -1, Q = 0$ ). Essa partícula irá rapidamente se decair em um par vórtice-antivórtice ( $(n = 1, p = -1, Q = -1/2)$  e  $(n = -1, p = -1, Q = 1/2)$  respectivamente). Finalmente, o antivórtice criado se aniquila em contato com o vórtice original de polaridade positiva, sobrando apenas o vórtice na direção reversa e um ponto de Bloch, resultado da aniquilação das quasipartículas, sendo que esse ponto de Bloch se decai rapidamente em ondas de spin. Esse processo só acontece para Campos externos cuja formação de partícula perturbativa tenha energia associada dentro da faixa de  $|E| = 8\pi At$ , com  $t$  sendo a espessura do nanodisco. Essa é precisamente a energia associada à pontos de Bloch da eq. 3.3, e valores de Campo altos demais, no sentido em gerar flutuações de energia maior que essa, irão fazer com que todas as quasipartículas decaiam em ondas de spin, restando apenas o estado saturado ao final.

Em ambos os casos de aplicação, nosso interesse é excitar o sistema através de um Campo externo com energia total no sistema menor ou igual a de formação de um ponto de Bloch,  $E \leq |E_{BP}| \sim 8\pi At$ . Para energias maiores, as perturbações externas são capazes de colapsar toda a carga topológica do sistema e saturar todos os momentos magnéticos em uma única direção, através de transformações descontínuas  $Q \rightarrow 0$ . No entanto, essa relação entre a energia de formação de pontos de Bloch e a saturação da magnetização só é estritamente válida para sistemas suficientemente grandes no plano para se comportarem como bulk. Em sistemas com uma proporção maior de área de superfície, efeitos de borda contribuem com um novo fator de energia  $E_{surf}$ , correspondente à interação entre a quasipartícula e as bordas do material. Em particular, para  $|Q| = 1/2$  essa interação é atrativa, o que resulta numa aniquilação do vórtice conforme o raio do nanodisco diminui. Energeticamente, isso se traduz num valor  $E_{surf} < E_{BP}$ , tornando a interação vórtice-borda mais favorável que a formação de pontos de Bloch para qualquer Campo externo ou estado da magnetização. A região de transição pode ser observada em um diagrama de fase para os possíveis estados de equilíbrio de um nanodisco (entre um vórtice e o estado saturado), em função da espessura e do diâmetro de nanodiscos.

Para minimizar o tamanho típico das nanopartículas ao mesmo em que preservamos a carga topológica, devemos então propor maneiras de limitar a interação entre o núcleo do vórtice e as bordas do material no plano de sua quiralidade. Uma das formas propostas previamente é a de alterar localmente as propriedades magnéticas do sistema através de dopagem com impurezas no nanodisco. Com um ajuste adequado da distribuição das impurezas e de suas propriedades, esses sítios de dopagem podem se comportar como poços de potencial para o vórtice com energia menor do que  $E_{surf}$ , caracterizando assim uma impureza atrativa. No entanto, a manipulação precisa de impurezas a ponto de garantir uma dopagem específica o suficiente ainda é um desafio experimental.

Um pouco mais simples que isso e experimentalmente viável com o avanço de

técnicas de crescimento de cristais, é realizar modificações na topologia do próprio material magnético, alterando propriedades topológicas localmente sem afetar os parâmetros intrínsecos do material. Isso pode ser feito por meio de modificações geométricas, introduzindo ou removendo partes da estrutura do nanodisco, criando uma nova forma. Essas modificações alteram a anisotropia de forma da magnetização, criando cargas magnéticas dipolares e cargas superficiais, e podemos em princípio gerar Campos de anisotropia que tornem favorável a sustentação de vórtices em diâmetros e espessuras menores do que as tipicamente observadas.

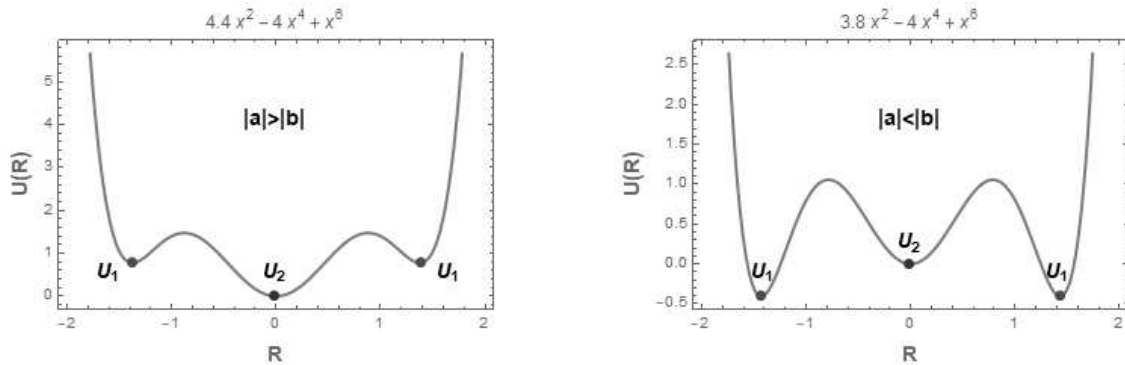
Para decidir qual modificação geométrica utilizar, devemos pensar em manter um volume reduzido. É um resultado conhecido por exemplo que a frequência do modo girotrópico de um vórtice diminui em nanodiscos conforme a espessura dos mesmos aumenta. A partir de um dado limite, a anisotropia de forma induzida na direção da espessura é suficiente para colapsar os domínios em uma saturação fora do plano do disco. Também com o aumenta da espessura, há uma diminuição na amplitude e na frequência das oscilações do modo girotrópico, de onde segue que, pelo menos abaixo do limite de saturação, a anisotropia de forma na direção perpendicular ao plano age como um fator multiplicativo de diminuição da energia  $U$  da eq. 6.9, efetivamente aumentando a barreira de energia para que o vórtice seja atraído pelas bordas no plano.

O mero incremento da espessura porém não é uma aplicação viável, pois causa um aumento excessivo do volume total de potenciais dispositivos e, além disso, gostaríamos também de não promover a saturação na direção fora do plano, mantendo o comportamento oscilatório do modo girotrópico até certo ponto (para o caso de aplicações em osciladores por exemplo). Vamos portanto imaginar uma geometria que limite o alcance das interações vórtice-bordas através da manipulação de modificações da energia potencial da eq. 6.9. Uma possível alteração seria induzir termos de potencial adicionais que criem uma barreira de potencial a mais entre a borda do nanodisco e o seu centro, resultando assim num confinamento mais efetivo do giroacoplamento  $\mathbf{G}$ . Uma forma geral simples para um potencial que descreva essa barreira entre centro do nanodisco e as bordas atrativas é o de um oscilador com termos de sexta potência, com forma geral dada por:

$$U(\mathbf{R}) - U(\mathbf{0}) = aR^2 - bR^4 + cR^6 \quad (6.10)$$

em que  $U(\mathbf{0})$  é o valor da energia do sistema com o núcleo do vórtice localizado no centro do nanodisco, usado como referência, e  $\mathbf{R}$  a distância em coordenadas polares entre o centro do nanodisco e o núcleo do vórtice. Um exemplo de como um potencial com essa forma representa uma barreira de energia secundária é dado na fig.32. Note que, dentre as possibilidades para a tripla de parâmetros  $(a, b, c)$ , é necessário que  $b$  e  $a$  possuam sinais

Figura 32 – Modelo de polinômio de sexta potência para o aprisionamento aprimorado de um vórtice em um nanodisco.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: São apresentados dois casos, com o centro do nanodisco representando a posição de equilíbrio global do vórtice (esquerda), ou poços de potencial laterais representando essa posição de equilíbrio global (direita). Em ambos os casos há uma barreira de energia entre os respectivos equilíbrios.

opostos para que haja uma barreira de potencial adicional próxima à origem, e que os sinais de  $a$  e  $c$  sejam iguais para que o polinômio possua o comportamento oscilatório desejado perto da origem. Além disso, o potencial atrativo das bordas do nanodisco podem ser modelados com  $c > 0$ , uma vez que  $c < 0$  irá sempre resultar em um ponto de equilíbrio instável nas bordas e no centro. A relação entre  $b$  e  $a$  também dita se as energias de equilíbrio serão as mesmas para cada poço de potencial, com a presença de dois estados metaestáveis e um equilíbrio global em  $|a| > |b|$ , e três estados com energia total idêntica em  $|a| = |b|$ . Para casos de materiais dopados que possuam interações de troca diferentes entre cada região do nanodisco,  $|b| < |a|$  também pode modelar um sistema onde o centro não é a posição de equilíbrio do nanodisco e sim as bordas das modificações geométricas em si. No entanto, já foi observado no trabalho realizado que a posição de equilíbrio para essa geometria é no centro do disco, dado um sistema homogêneo.

Devido à existência do modo girotrópico, sabemos que a interação atrativa das bordas só prevalece para valores de  $\mathbf{v}$  elevados e para uma proximidade maior do núcleo do vórtice com as bordas, o que equivale ao colapso de um dos domínios magnéticos que sustentam o giroacoplamento  $\mathbf{G}$ .

Também podemos ter dois casos diferentes da interação entre os poços de potencial no modelo. No primeiro caso, Temos  $U_1 = U_2$ , ou seja, é igualmente favorável que o vórtice esteja localizado no centro do nanodisco ou na região entre o potencial adicional induzido e a borda. No entanto, dada a hipótese de que o estado de equilíbrio global com  $Q = 1/2$  no centro do nanodisco não será alterado, somente criando-se uma barreira de potencial

entre este e uma região intermediária, também devemos supor o caso  $U_1 > U_2$  em que o mínimo global do sistema continua sendo a origem. O caso  $U_2 > U_1$  envolve a presença de mínimos laterais mais estáveis do que o centro do nanodisco, seja através de dopagens com impurezas ou modificações geométricas.

Mesmo sem especificar valores  $(a, b, c)$ , que na verdade serão uma função do diâmetro do nanodisco e de comprimentos característicos de quaisquer modificações geométricas propostas, podemos intuir a partir da eq. 6.10 uma geometria desejada para alcançar esse comportamento. Como um aumento da polaridade do nanodisco (através de um aumento da espessura) é capaz de amortecer o modo girotrópico, escolhemos introduzir uma descontinuidade ou aumento apenas local da espessura, na forma de um empilhamento de discos menores. Próximo ao centro da estrutura, isso deveria fazer com que a atenuação da polaridade ocorra como esperado de estruturas com volume maior.

O mais importante porém, é o fato da polaridade do vórtice sofrer uma diminuição ou aumento bruscos de intensidade caso seja removido ou colocado nessa região de maior espessura local. Esse processo representa uma mudança no giroacoplamento  $\mathbf{G}$  e portanto não é favorável topologicamente, estabelecendo efetivamente uma barreira de energia entre estados com  $(\mathbf{M}_1)_z < (\mathbf{M}_2)_z$  para núcleos de vórtice respectivamente fora e dentro dos nanodiscos menores. Essa descontinuidade também permite que o incremento local da espessura para o efeito de atenuação seja muito menor do que seria necessário caso camadas inteiras fossem acrescentadas, uma vez que os Campos externos necessários para alteração do giroacoplamento do sistema são razoavelmente mais altos devido à descontinuidade dos termos da eq. de Thiele em 6.8.

Na publicação anexada à esse capítulo desenvolvemos todas as simulações micro-magnéticas, de acordo com os modelos desenvolvidos no decorrer desse trabalho, que demonstram a prova de conceito dos dispositivos de torre de Hanoi propostos. Utilizamos os parâmetros do Py de  $\mu_0 M_s = 1.005T$  e  $A = 1.3 \times 10^{-11} J/m$  com os termos de troca e dipolar do modelo da eq. 5.15, e na dinâmica do sistema usamos o integrador do ponto médio esférico com  $\alpha = 0.01$ ,  $\Delta t = 43 \times 10^{-15} s$ , e  $a_0 = 5 \times 10^{-9} m$ . A cada passo apenas duas iterações do passo corretor e um passo preditor de Adams como na eq. 5.35, com os 3 passos iniciais dado pelo método PC com um preditor de Euler e dois passos corretores como na eq. 5.34.

Mostramos através de diagramas de fase dos estados de equilíbrio, que nanodiscos de volume total reduzido estabilizam vórtices com a alteração geométrica proposta, além dos limites convencionais de diâmetro e espessura onde nanodiscos usuais apresentariam monodomínios. É importante ressaltar que o modelo da eq. LLG em 2.47 é mais geral do que a eq. de Thiele em 6.2, fornecendo assim resultados mais definitivos sobre a relação

entre o giroacoplamento e a geometria da estrutura, além do fato de nosso modelo levar em conta a totalidade do Campo magnetostático, incluindo suas contribuições de cargas superficiais.



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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



Research articles

Decreasing the size limit for a stable magnetic vortex in modified permalloy nanodiscs



C.D. Moreira<sup>b,a</sup>, M.G. Monteiro Jr.<sup>b,\*</sup>, D. Toscano<sup>b</sup>, S.A. Leonel<sup>b</sup>, F. Sato<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Amazonas, Itacoatiara, Amazonas 69103-128, Brazil

<sup>b</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 16 May 2017  
Received in revised form 10 July 2017  
Accepted 21 July 2017  
Available online 23 July 2017

Keywords:

Micromagnetism  
Nanostructures  
Simulation  
Magnetic vortex  
Magnetization dynamics

ABSTRACT

This work proposes the use of tower-like structures (small diameter cylinders) embedded on nanodiscs in order to reduce the minimum size of disc diameter to sustain a vortex as ground state. By simulating the dynamics of nanostructured discs of Py-79, we demonstrate that the geometric modification of piling smaller diameter cylinders on top and bottom of a larger diameter disc, introduces a large out-of-plane anisotropy, which in turn allows for the tailoring of stable vortices, even as the diameter of disc and cylinders are greatly reduced, down to dozens of nanometers. This geometric modification is in contrast to the same result (of decreasing the overall size of structures containing vortices) if we introduce vacancies inside a nanodisc, turning it into a ring shaped structure. Such ring structures, while experimentally easy to achieve and also allowing for a stable vortex to form with a well defined chirality, act as an attractive site for vortices, effectively diminishing or completely eliminating the polarity component of the vortex. The proposed tower structures, however, are shown to not only preserve both vortex chirality and polarity, but also exacerbates the polarity, thus increasing the stability of the vortex ground state by pinning. This result introduces the possibility of creating devices that require a reliable magnetization profile, in the sense that the vortex becomes strongly pinned to the tower, which also has a well defined magnetization, rather than being bound to a vacancy which may potentially collapse the ground state. Upon constructing magnetization phase diagrams for regular discs and discs that contain these tower-like structures, we conclude that the latter are appropriate candidates for a high density, high reliability device, suitable for potential applications that require vortex pinning, such as in biomedicine and computation.

© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Recent improvements in research on magnetic nanostructures have proven to be a fertile ground for the most diverse applications, and understanding the physics of these structures is an exciting topic for both theory and experiment. In biomedicine [1] these magnetic nanostructures may be remotely controlled to interact with living tissues performing drug delivery at specific locations. The use of Permalloy microdiscs has been shown as effective in destroying cancer cells through the interaction of a magnetic vortex with oscillating magnetic fields [2]. They can be produced for this purpose with a high yield, and thus very good contenders to becoming a medical treatment [3]. Magnetic nanostructures have also been intensely studied due to improved data storage and increasing information density. Cylindrical nanostructures, for

example, are promising candidates for a nonvolatile MRAM unit [4]. Moreover, studies have shown the possibility of injecting spin polarized currents from a ferromagnet into a semiconductor [5,6] open a new window for the development of spintronic devices.

To achieve a higher level of applicability regarding these magnetic structures, increasingly more knowledge about the equilibrium and dynamic aspects of their composing elements is required. We do this mainly by specifying the sample's magnetization, which is the measure of how much a system reacts due to the presence of a magnetic field from an external source. In particular, disk and cylinder shaped nanostructures are an interesting target for studying, due to their potential in becoming high density recording devices and efficient sensors at the nanoscale [7].

There are three very well known equilibrium states of magnetization for ferromagnetic cylindrical nanostructures [8]. Two of these states have fully saturated configurations in which the magnetization lies either along the cylinder's axial (out-of-plane) or radial (in-plane) directions. For these configurations the boundary

\* Corresponding author.

E-mail address: [maxweljr@gmail.com](mailto:maxweljr@gmail.com) (M.G. Monteiro Jr.).

of the nanostructure is relevant, because the demagnetizing field due to the dipole interaction among magnetic moments leads to deviations in the direction of magnetization at the boundary. From now on we will refer to the in-plane alignment of magnetization as C-plane state or simply C-state. Another equilibrium state consists in a magnetic vortex, with a curling radial in-plane magnetization and an out-of-plane component perpendicular to the cylinder radius. These vortices are known to appear as a result of the competition among short range exchange interactions due to localized magnetic moments and the long range demagnetizing field created across the whole cylinder [9,10]. A vector plot of the C-state and vortex magnetization fields for a nanostructured disc is found in Fig. 1.

Manipulation of the magnetization states for applications is done mostly through external magnetic fields in order to introduce perturbations to the ground state, leading to phenomena such as gyrotropic excitation modes and switching [11]. It is most relevant in general to modify a material in order to change both the ground state and its response to the external applied field, leaving it suitable for many different purposes [12,13]. This can be done, for example, by doping with impurities, ferromagnetic or not. One of the most popular materials is the Nickel-Iron alloy Permalloy or simply Py. Much has been done in the matter of introducing magnetic impurities and using them to modify the structural properties of Py, experimentally and theoretically [14].

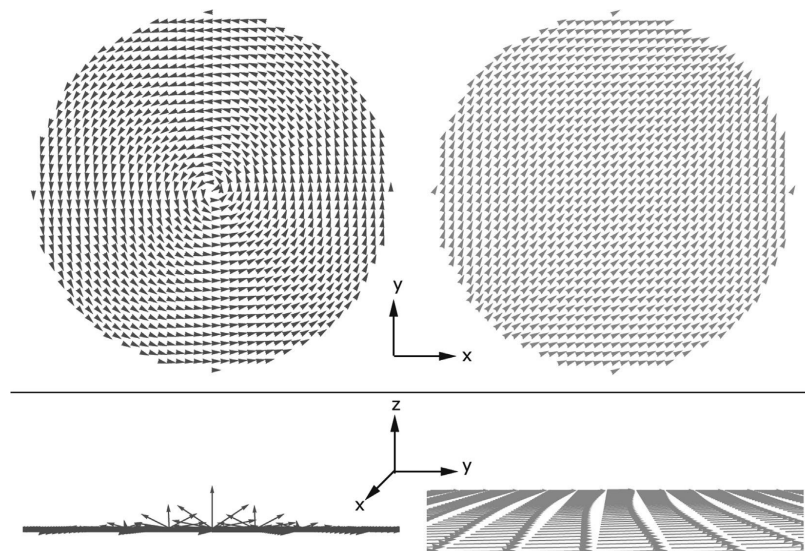
Another way to influence the ground state and its response to external fields in a ferromagnet is through its geometry. Several works have studied the way shape and different aspect ratios in nanostructures impact the equilibrium magnetization states [15–17], and these factors are important for vortex nucleation and annihilation mechanisms. In so called soft magnetic materials such as Py, global magnetostatic ordering trumps over the magnetocrystalline anisotropy due to unit cell ordering, and the emerging magnetic configurations in nanostructures become

very sensitive to the geometric form and dimensions of the magnet [18]. The reason for structural modifications affecting the magnetization vector field then, is that the *shape anisotropy effects* driven by dipole interactions are modified. The number of nearest neighbors to any particular lattice point is also modified by changing the boundary, thus modifying the exchange interactions as well. The relationship of both factors contribute to a change in total energy which may accordingly increase or decrease surface effects, making the ground state size and shape dependant.

Different levels of stability and different ground states may be desired for any given application, and obtaining a detailed control of such states merely from structural modifications is an attractive choice compared to doping with (at times very expensive) materials, and also very doable experimentally, with techniques ranging on their degree of precision, such as epitaxial growth, dot array fabrication, and lithography, the latter with typical sizes up from 10 to 20 nm [19–21].

One interesting approach is to use a ring shaped structure to induce vortex formation in a nanomagnet, by introducing a diamagnetic defect (or vacancy) in a disk. This defect or vacancy can then capture and retain a vortex state, however, it significantly reduces or even vanishes the out-of-plane component [22–24], making it very hard to actually measure a logical state (a bit) due to the out-of-plane vortex field, in a potential memory device. Furthermore, potential applications in biomedicine and related areas for example, can benefit from a wider range of structures containing vortices as their ground state [25].

In this work we propose a simple structural modification to nanodisks of  $\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$  Py-79, in order to tailor shape effects and increase pinning of vortices, as well as decreasing the overall size of stable vortices. We start by describing the theoretical methods and computational tools developed for simulation and analysis, and then proceed to describe the considered structures and the



**Fig. 1.** Magnetization vector field for the vortex (up and bottom left) and C-state (up and bottom right) ground states. Note that for the vortex phase, the polarity (z-component) does not correspond to a full alignment along one direction, but rather a smooth curling profile around the vortex core. For the C-state, there is approximately no z-component at all and every vector lies along the XY plane. The vortex phase is shown on the YZ plane at the bottom for clarity. We denote by radial direction any vector lying on the XY plane, and axial direction by any vector lying along the z-axis.

relevant physical properties. Then we present the results and discuss their relevance for potential technological applications.

## 2. Methods

Permalloy-79 samples considered here are modeled by a set of classical Heisenberg magnetic moments with dipole-dipole and exchange interactions. The Heisenberg model can describe reasonably well both the atomistic representation of a material through its atomic (classical) magnetic moments, which are assumed to be well localized at atomic sites, and the micromagnetic approach, that considers instead the magnetization vector field evaluated at cells that average over many atomic moments [26,27]. The Hamiltonian which describes these systems can thus be written as:

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{U}{2j} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (1)$$

where  $i, j$  refer to the sites of localized moments (atomic or cell-based);  $\hat{m}_i$  and  $\hat{m}_j$  are the dimensionless representations of magnetic moments at sites  $i$  and  $j$ , with constraint  $\|\hat{m}\| = 1$  for all  $i, j$ ;  $r_{ij}$  is the distance between sites measured in units of length;  $a$  is the lattice parameter of first neighbors distance, either for the crystalline atomic sites or the micromagnetic cell system, also in units of length;  $U$  is the dipole coupling intensity (in units of energy);  $J$  is the exchange coupling constant (in units of energy), assuming the exchange interactions are uniform across all sites ( $J_{ij} = J$ ). The first sum with index set  $\langle i, j \rangle$  is taken over nearest neighbors only. The Hamiltonian in Eq. (1) is of the type  $H = J\mathcal{H}$  with  $\mathcal{H}$  being the dimensionless term in curly brackets, thus the whole energy is measured in terms of  $J$ . We consider soft samples of Permalloy, where the magnetocrystalline anisotropy effects can be neglected to good approximation. The dynamics is obtained by numerical solution, at each site or cell, of the discrete Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation [28] expressed as

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

The form of LLG equation in Eq. (2) is such that the numerical accuracy in integration is roughly the same regardless of the Hamiltonian parameters, by rescaling time as  $dt \rightarrow \omega_0 dt$ , with  $dt$  measured in seconds and  $dt$  dimensionless [29].  $\alpha$  is the material damping parameter, and  $\vec{b}_i$  is the dimensionless effective field at site  $i$ , combining the respective contributions from exchange and dipolar interactions.

The expected value of the magnetization distribution, written as  $\langle M \rangle$ , plays the role of order parameter for each phase (C-State, vortex and full out-of-plane alignment). It is given by

$$\langle M \rangle = \sqrt{M_x^2 + M_y^2 + M_z^2} \quad (3)$$

$$M_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_\alpha^i, \quad \alpha = x, y, z \quad (4)$$

The order parameter can be used to distinguish between the vortex and C-state phases for nanostructures; for a C-state,  $M_z \approx 0$  and  $\langle M \rangle \approx 1$  while for a vortex phase,  $M_x = M_y \approx 0$  and  $\langle M \rangle \approx M_z \neq 0 \ll 1$ , just as shown in Fig. 1.

For this work we use the micromagnetic approach. The interaction constants  $J$  and  $U$  therefore depend on the material parameters and the cell partition of the system. We employ a simple cubic lattice, equivalent to a finite difference grid (for example, see [30,31]), with moments located at the center of each cell, the distance between moments being  $a$ . The typical values of Permalloy-79

parameters are exchange stiffness  $A = 13 \times 10^{-12}$  [J/m] and saturation magnetization  $M_s = 8.6 \times 10^5$  [A/m]. The exchange length,  $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s}} \approx 5.3$  [nm], provides an indication for the reach of the exchange interaction, and so we choose the volume of the micromagnetic cell as  $a^3 = 2.5 \times 2.5 \times 2.5$  [nm<sup>3</sup>] so as to retain detail of the exchange interactions. For the case in which the nanostructure is discretized into a simple cubic lattice, the Hamiltonian parameters are given by  $J = 2Aa$  and  $\frac{U}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$ . To integrate the equations of motion in Eq. (2) we use the fourth-order Adams predictor-corrector scheme, as in other work [27], with  $\alpha = 0.01$ . The rescaled time step used is  $d\tau = 0.01$ , obtained from rescaling time by the factor  $\omega_0 = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \mu_0 M_s \gamma$ , with  $\gamma$  being the electron gyromagnetic ratio. The full energy is measured during simulations, with no approximation or cutoff whatsoever used when calculating the dipolar interactions term in Eq. (1), leading to the best description of the demagnetizing field's shape anisotropy, regardless of boundary size and limited only by the system discretization.

We conducted the micromagnetic simulations using our own software built with the CUDA<sup>®</sup> parallel computing platform. CUDA by NVIDIA uses a modified version of the C language (C-CUDA) to achieve better performance, at times even surpassing other parallel platforms such as CPU clusters [32].

Our simulation structures consist of a Tower of Hanoi with three discs, defined by a large diameter (D) embedded by a tower with height (h) and small diameter (d), with all three discs rotationally symmetric to the horizontal plane (see Fig. 2). In our study we consider two different situations for disks, regarding their thickness: with a single layer (5 nm thickness) and double layer (10 nm thickness).

The dynamical simulations are done by running numerical integration of the LLG equation for each cell over a total of 300 000 timestep, more than enough for the nanodisks to achieve a proper equilibrium state. In order to construct magnetic phase diagrams for our structures, we use the dynamics to find out what is the ground state of each set of defining nanodisc parameters ( $D, d, h$ ). At each point ( $D_0, d_0, h_0$ ) we use two initial conditions for two separate simulation runs: one starting as a plane vortex centered on the disc's center (with  $M_z$  initially set to zero), and the other starting as a C-state configuration. The C-state ordering corresponds to a full alignment of every vector along an arbitrary direction on the XY plane. Py-79 has very weak magnetocrystalline anisotropy so we have dropped this term from the Hamiltonian in Eq. (1). With that and the boundary being rotationally symmetric, any initial C-state condition is already the ground state due to degeneracy.

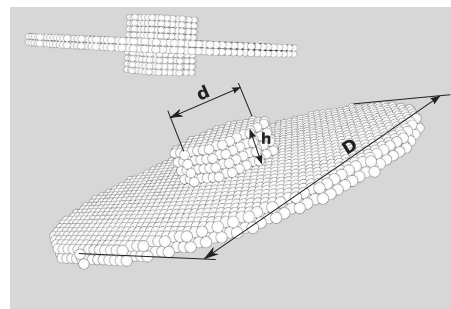


Fig. 2. Nanostructured disc with tower. Both the top and bottom surfaces of the central structure contain smaller discs. Each sphere in the figure represents a site with a defined (micromagnetic)  $\hat{m}_i$  magnetization vector.



Likewise, by having the initial condition be an in-plane vortex with  $M_z = 0$ , the system has equal probability of evolving to one of four degenerate states, with either counterclockwise or clockwise chirality, and positive z-axis or negative z-axis polarity. To break degeneracy, an external field or breaking of rotational symmetry is required [33]. One such vortex ground state for our Hanoi piling structure is shown in Fig. 3. Note that, considering each height value  $h$  as a layer of the disc, the in-plane curling pattern of magnetization remains the same across every layer.

By comparing the energy per site after both simulation runs, the ground state can be considered as that which has the minimum value, for the LLG equation with no external fields, due to the positive damping, will always lead to an equilibrium state (i.e the magnetization is monotonic decreasing in this case) [34,35].

### 3. Results and discussions

#### 3.1. General cylindrical nanostructures

First, we investigate the ground state of single nanodiscs as a function of both diameter (40–200 nm) and thickness (5–45 nm). One can discern two clearly different states regarding the in-plane magnetization, namely the single domain C-state and the vortex structure with a small out-of-plane component, at or close to the disc's center. Fig. 4 shows the single nanodisc magnetic phase diagram, built by time evolution of a C-state and a vortex at each point, as described previously. The results are in agreement with available experimental for nanostructured disks, regarding both the size and kinds of domain presented by the diagram [36,37].

We can see from Fig. 4 two very distinct regions mapping each phase. The filled region corresponds to a vortex ground state, while on the other region no nucleation occurred or persisted. Our data shows there is a boundary of minimum size for a nanodisc so that the ground state corresponds to a vortex, by drawing a line between the diameter-thickness diagram regions. This is in agreement with previous information on the topic [10]. As  $D$  increases with a constant  $t$  value, for values higher than shown in Fig. 4, the ground state becomes degenerate with the possibility of multiple domains co-existing (e.g vortex and antivortex pair nucleation) and the single order parameter component  $M_z$  is gradually reduced. On the other hand, as  $t$  increases for constant  $D$ , the state with magnetization fully parallel to the axial direction becomes the ground state, with  $\langle M \rangle \rightarrow M_z$ . The C-state is more stable for the

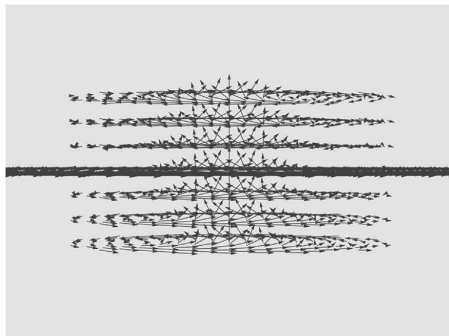


Fig. 3. Magnetization ground state of vortex state in a nanostructured disc with tower. The curling magnetization pattern of the central disk layer is repeated across the remaining layers, composing the vortex.

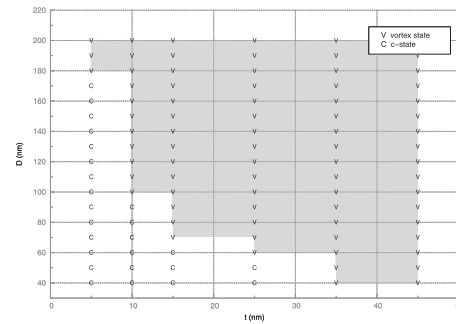


Fig. 4. Diameter-thickness magnetic phase diagram for the fundamental states of nanosized discs.

smallest structures because the large surface to volume ratio induces alignment along the boundary (i.e increasing both  $M_x$  and  $M_y$  parameters), but the exchange coupling is strong enough to promote full alignment across the whole structure in a general radial direction. We are not concerned with the regions of larger typical lengths and so will conceal ourselves to the mapping of the single domain, small thickness region of phase space.

In order to reduce the overall diameter ( $D$ ) and thickness ( $t$ ) of the disc and still maintain a vortex ground state, we can start from the fact that the vortex stability on a finite cylindrical disc is directly tied to the minimum average value of axial magnetization  $M_z^{min}$ , at which point smaller values do not allow for the nucleation of a vortex with an out-of-plane component. Planar vortices and those with  $M_z < M_z^{min}$  are not stable, and even a small perturbation with external fields might saturate the magnetization state inducing full alignment, rather than inducing oscillation or switching. This minimum value is particular to each material and constant at any  $D > D_{min}(t)$ , with  $D_{min}(t)$  being the minimum diameter for vortex formation at a specific thickness  $t$ .  $M_z^{min}$  also increases as  $t$  increases, up to the saturation value, where the vortex state changes into complete axial alignment. Permalloy-79 shows stable vortex formations even at a low value of  $t = 10$  [nm] [29]. The local effective fields acting on each magnetic moment also contribute to vortex formation and stability, because in a finite system the dipole-dipole interaction energies are minimized through alignment of moments along the directions tangent to the boundary, and the competition among this induced shape anisotropy and the exchange interactions leads to the vortex state. As system size decreases, the typical ranges of the dipolar coupling become proportional to the exchange length, i.e, all interactions become 'short range' in this sense, and therefore alignment along the boundary becomes unfavourable in comparison to the exchange coupling parallel alignment (for example, see [38]). The relevant question then is: can shape anisotropy, with an axial direction, be responsible to maintain a pinned vortex state, even as the diameter decreases past the range of boundary alignment ( $D < D_{min}(t)$ )? To answer this, we proceed to map phase diagrams for the discs with an embedded tower.

#### 3.2. Nanodisc with tower

Figs. 5b), c), d) and 6b), c) and d) show the magnetic phase diagrams for the tower piling structures, with thickness of single and double layer respectively ( $t = 5$  and  $10$  [nm]), and three different tower heights (or thickness) from the central disk,  $h = \{10, 15, 20\}$  [nm]. The diagrams are mapped by the large and

256

C.D. Moreira et al./Journal of Magnetism and Magnetic Materials 443 (2017) 252–260

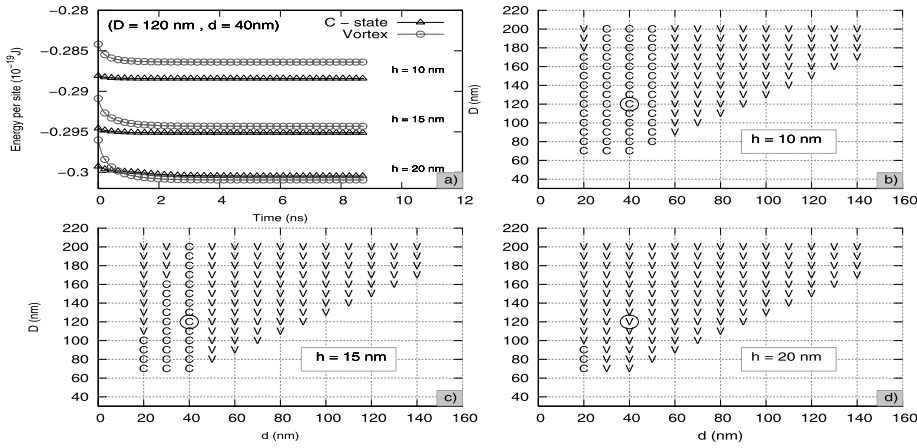


Fig. 5. Magnetic phase diagrams for single layer ( $t = 5$  [nm]) disc with tower nanostructure, with dynamics data of sample points circled in diagram. The diagrams show that, by increasing the thickness of the smaller disks, we can obtain vortex ground states from smaller nanomagnets than discs containing only a single diameter. a) shows dynamics of circled points in b), c) and d), showing the evolution of both C-state and vortex initial conditions. b), c) and d) show the phase diagrams for nanostructures with  $h = 10, 15, 20$  [nm] respectively.

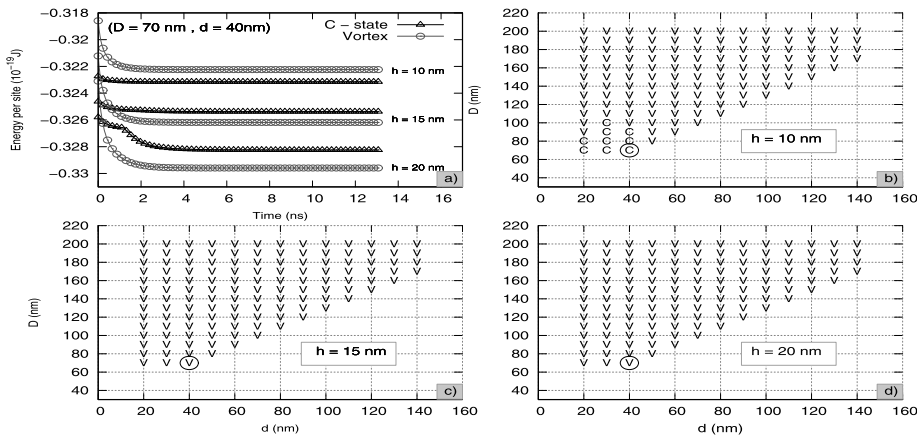


Fig. 6. Magnetic phase diagrams for double layer ( $t = 10$  [nm]) disc with tower nanostructure, with dynamics data of sample points circled in diagram. The diagrams show that, by increasing the thickness of the smaller disks, we can obtain vortex ground states from smaller nanomagnets than discs containing only a single diameter. In this case, a very small increase in disc thickness was enough to maintain a vortex ground state across the whole region considered. a) shows dynamics of circled points in b), c) and d), showing the evolution of both C-state and vortex initial conditions. b), c) and d) show the phase diagrams for nanostructures with  $h = 10, 15, 20$  [nm] respectively.

small diameters  $D$  and  $d$ . The marked points at 5 and 6b), 5 and 6c), 5 and 6d) have their energy time evolution given by the graphics in 5a) and 6a) for further detail, containing both initial conditions (C-state and vortex).

The single layer structures, similarly to the single diameter disks on Fig. 4, show no vortex formation for lower  $D$ , and as the ratio  $d/D$  approaches 1 (thus becoming a single disc), the expected behavior of limiting size for vortex nucleation is seen. However, as the tower height is increased with constant  $d$  values, we can see that a vortex takes place as ground state. When looking at the Hanoi piling structure, we can point out that now, due to the increased thickness of the small discs, the full structure now has

collective properties derived from every disc present, inducing vortex formation. In other words, the multiple disc system now has enough thickness that, if taken as analogous to the single disc systems in Fig. 4, would correspond to a vortex ground state in the phase diagram. The dynamics of the sample point ( $d, D = (40$  [nm],  $120$  [nm]) at Fig. 5a) demonstrates how the vortex nucleation process becomes the ground state as  $h$  increases. In this manner, the tower structure translates into an effective shape anisotropy term which promotes alignment towards the out-of-plane directions of the large nanodisc, lowering the in-plane contribution of exchange interactions. This can be understood as the combined interaction of the small thickness, large

diameter disc, and the large thickness, small diameter discs composing the tower of Hanoi piling. The large thickness discs, due to the stronger out-of-plane exchange interactions, promote alignment towards that direction. The large diameter central disc, on the other hand, now has lowered its in-plane exchange contribution near the boundary of the tower, allowing the demagnetizing field in Eq. (1) to take over, inducing the global in-plane ordering of a vortex, even though the multiple disc system, taken as separate entities, would not be able to sustain this magnetic domain.

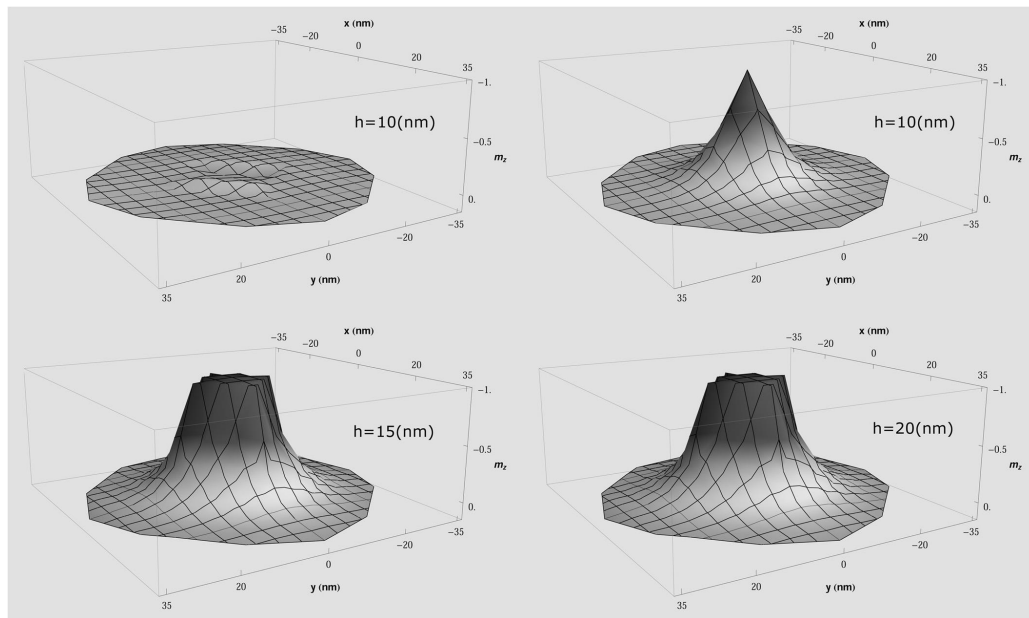
The double layer structures have more stable vortex states as expected, however they possess the same size limitations as  $d/D \rightarrow 1$  and the shape converges to a three-layer disc. This time however, even a very small increase in disc height, of only 5 [nm], is enough to increase the vortex ground state region of the phase diagram. Further increasing the height increases vortex pinning (here assumed as the gap between vortex and C-state), as shown by the sample point  $(d, D) = (40 \text{ [nm]}, 70 \text{ [nm]})$  at Fig. 6a), with the vortex state energy going lower and lower in comparison to the C-state, with increasing height for the aspect ratio considered.

It can be observed that, although the dipolar energy is minimized for the vortex state, the in-plane exchange coupling in nanostructures is too strong to allow for alignment along the out-of-plane direction. This is what happens for the full disks (with a single diameter  $D$ ) and a small  $t$  value, as there is a higher density of moments along the radial, or in-plane direction than there are along the axial direction. On the other hand, as we increase system size through the thickness  $t$ , vortex nucleation is only favourable up to the point where  $M_z$  goes close to saturation, then the axial or out-of-plane state becomes more stable. Therefore we have

three different regions of transition: high radial coupling, low axial coupling (C-state); low radial coupling, low axial coupling (Vortex); and low radial coupling, high axial coupling (axial alignment). For a soft ferromagnetic model such as described by Eq. (1), boundary conditions and overall size are the properties responsible for tailoring each phase.

What we want then is to increase the size of the vortex transition region towards the direction of the C-state region. To do so, it is required to introduce an out-of-plane anisotropy that is large enough to deviate the system from its in-plane coupling, while also being small enough to not significantly increase the thickness dependent  $M_z^{min}$ . The strong coupling of axial moments can be related to a sharp variation of the axial (out-of-plane) magnetization at the tower boundary,  $\frac{dm_z}{dz} \gg 0$ , whereas for a cylindrical structure the variation is smooth and much smaller. This effect is an expression of the way the tower of Hanoi structure is built: the two side discs introduce a local and strong out-of-plane field, corresponding to the largest thickness regions shown in Fig. 4, and the central disc introduces a global in-plane demagnetizing field, corresponding to a larger diameter region of Fig. 4, which is only significant due to in-plane exchange interactions being diminished in favor of out-of-plane alignment in the disc center.

Fig. 7 shows the surface plot of the  $m_z$  component of each site on the XY plane, as well as its increase with height  $h$ , for the nanostructures with  $(t, d, D) = (10 \text{ [nm]}, 40 \text{ [nm]}, 70 \text{ [nm]})$ . The total  $m_z$  component on each site of the graphics was taken by averaging the sites on every layer for a given  $(x, y)$ . The upper left and right plots show the final C-state and vortex states for  $h = 10$ , respectively. Note that, in this case (see Fig. 6b)), we have C-state as



**Fig. 7.** Surface plot of the  $(x, y, m_z)$  surfaces in a structure with  $(t, d, D) = (10 \text{ [nm]}, 40 \text{ [nm]}, 70 \text{ [nm]})$ , where  $m_z$  is averaged over every  $z$  value, i.e. every central disc and tower layer. Top left and right are the C-state and Vortex states respectively for  $h = 10 \text{ [nm]}$ , with C-state being the ground state. Bottom left and right are the vortex ground states for  $h = 15$  and  $20 \text{ [nm]}$  respectively. For such a small structure size, the out-of-plane anisotropy created by the tower boundary greatly increases  $m_z$ , with the vortex core (where  $|m_z| \approx 1$  in this case) becoming approximately the size of the smaller diameter  $d$ . Note that the average  $m_z$  values of the curling components around the core are close to unity for  $h = 15$  and  $20 \text{ [nm]}$ , but not exactly unity (i.e.  $|m_z| \approx 0.98$ ) leading to a nearly axial magnetization surface inside the smaller diameter.

ground, and the vortex is less stable. The bottom left and right plots show the ground state (now a vortex) for  $h = 15$  and  $20$  [nm] respectively. We can see that now there is a sharper increase of the out-of-plane magnetization, near the boundary of the tower. This sharp increase, induced by the magnetostatic interactions along the tower boundary, corresponds to an out-of-plane anisotropy favoring alignment along the z-axis, leading to the formation of the characteristic curling pattern of Fig. 3. The role of the tower of Hanoi structure then, is that of a multiple disc system that acts towards increasing the range of the vortex zone towards overall smaller systems. The presence of a central disc with larger diameter and small thickness induces both magnetostatic and exchange fields which lie mainly at in-plane directions, whereas the addition of discs with smaller diameter but larger thickness, is responsible for a strong out-of-plane ordering from exchange interactions. The smaller discs also contribute in diminishing the in-plane exchange fields that would otherwise supplant the shape anisotropy of the magnetostatic interactions, due to the strong variation in  $M_z$  near the tower boundary. In this way, the tower inherits desirable properties from both types of disc that promote vortex formation even for structures with overall small volume.

Even a monolayer structure with size as small as ( $D = 110$  [nm],  $d = 20$  [nm],  $h = 15$  [nm],  $t = 5$  [nm]) was shown to be stable at the vortex phase, as shown in Fig. 5c). The strong in-plane coupling due to the very small thickness-to-diameter ratio is counteracted by  $\frac{dm_z}{dz}$  being very high near the tower boundary, which in turn induces strong axial alignment on the vicinity of the center. The minimization of the local dipolar field energies toward the axial directions is then followed by further minimization of the exchange coupling along this direction. Combined with the dipolar energy minimization along the outermost boundary  $D$ ,

the end result is a vortex formation that is a robust ground state due to having a higher  $M_z$  with little effective increase of thickness, of less than a single layer, considering the large diameter disk as the main structure.

In Fig. 7 we can also notice that the ground C-state for  $h = 10$  [nm] has a very small out-of-plane component along the smaller diameter boundary. To better illustrate this effect, in Fig. 8 we compare the surface plots of a large single layer disc structure of  $D = 200$  [nm] (left), and a Tower of Hanoi disc (right) with the same  $D$  value and small diameter of  $d = 35$  [nm], with a height of  $h = 20$  [nm]. The embedded tower not only increases the size of the vortex core and the variation of  $m_z$  near the boundary, but also induces, in larger structures, the formation of a small ring-shaped anisotropy with local  $M_z$  pointing towards the opposite polarity. We attribute this effect to the symmetry of the tower, as the exchange and magnetostatic interactions are acting alongside both sides of the central disc surface. This small drop only serves to exacerbate the variation of  $m_z$  at the tower boundary, and may be potentially used as a way of pulling the vortex core into the tower center.

As opposed to a ring or torus structure with one or more vacant sites in its center, the tower structures are responsible for both the formation of vortices and an increase of the overall out-of-plane component. This leads, for example, to a more easily measurable bit-state, along with the density increase from having the overall size of the nanomagnet reduced, because the total volume increase from introducing the tower is much smaller than what it would be if we simply increased the number of layers of a single disc.

In summary, the tower structure presents a simple way of tailoring magnetic structures that are both small and reliable regard-

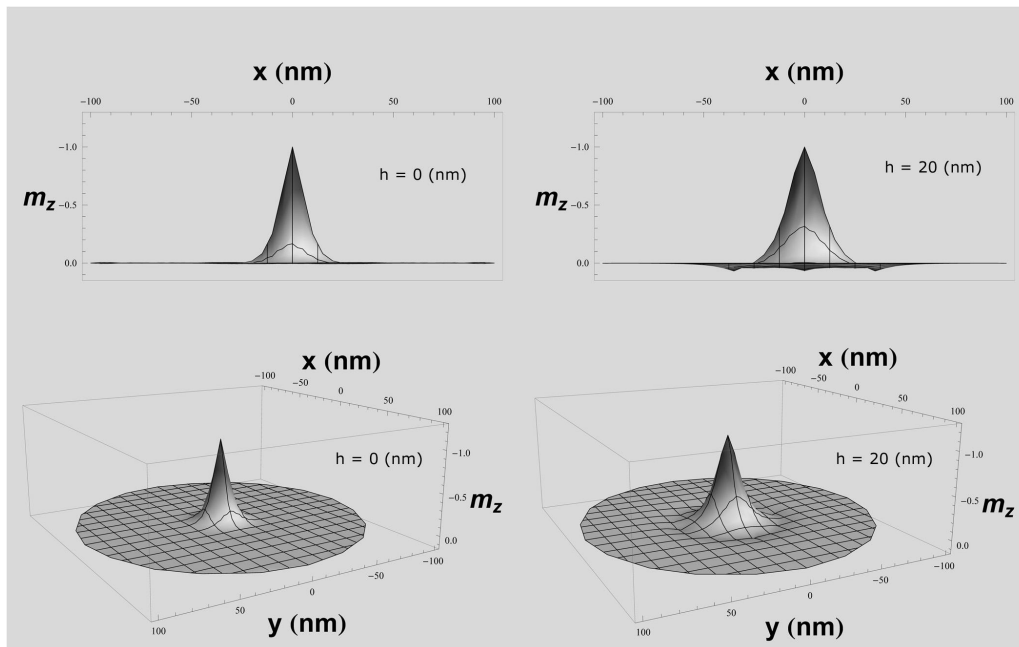


Fig. 8. Surface plot of the  $(x, y, m_z)$  surfaces in single layer structures with  $D = 200$  [nm]. Left has no smaller discs attached to it and Right has  $d = 35$  [nm] and  $h = 20$  [nm].

ing their polarity, in the sense that shape effects are increased and the ground states correspond to a vortex with either (+) or (−) polarities rather than having an arbitrary in-plane direction, as in the case of a C-state, or a curling magnetization with chirality but only negligible polarity, such as in the case of a ring.

#### 4. Conclusions

In this work we sought to reduce the size limit of the nanomagnets in order to tailor the vortex as ground state, which has many useful and attractive technological applications. We have shown that cylindrical structures do have a minimum size in order to have the vortex as their ground state, and that this size is related both to the diameter and thickness of each disc. This result is in agreement with previous data on the topic. It was demonstrated through phase diagram mappings, drawn from dynamics, that a tower of Hanoi structure, comprised of a central disc and two smaller discs embedded to its top and bottom, achieves the task of reducing this size limit, by taking advantage of each individual discs defining length parameter (diameter for the central disc and thickness for the smaller discs). The experimental value and applicability of this setup, in principle, relies on a strong need of either more density in vortex shaped magnetization profiles inside a potential device, such as in computation, or a need for a strongly pinned magnetization profile, that makes use of a large axial field induced by the thick discs, while also retaining a curling profile due to the magnetostatic interactions of the central disc, which has a larger planar boundary. This is the case in many recent attempts at biomedical applications of nanoparticles.

From the phase diagrams of the tower of Hanoi structure, we can draw some conclusions about the relationships of the multiple discs system. A combined effect derived from the presence of both types of disc takes place to promote vortex ground states. In one hand, the central disc induces planar alignment along its boundary, due to an appreciable in-plane demagnetizing field, owing to its relatively large radius. On the other hand, the top and bottom discs, being thicker towards the axial or out-of-plane direction, but having a small diameter, favors a strong axial alignment with both exchange interactions and shape anisotropy at play. This mix of different proportions from each disc is responsible for the vortex magnetization mainly for two reasons: first, because the thicker discs diminish the planar exchange interactions near the central discs core, thus allowing the planar component of demagnetizing fields to rule the interactions in that direction; and second, because the thickness value resulting from the combination of discs create a large value of  $\frac{dm_z}{dz}$  near the center of the tower, which further helps in developing and pinning a vortex magnetization domain (due to increasing the energy gap between C-state and vortex). This is valid for discs that, even when combined, have a reduced volume in relation to their single radius, cylindrical equivalents, as well as having more desirable proportions regarding the specific roles of in-plane and out-of-plane fields in vortex formation.

With the geometric modification of introducing the smaller discs to the top and bottom of a larger disc surface in a tower-like manner, we have a way of tailoring shape anisotropy effects that drive the appearance of vortex magnetization ground states, even for very small overall size of structures, of up to 70 [nm] in diameter and 10 [nm] in thickness. When comparing the disc structures with and without this geometric modification, we notice that the symmetry also introduces a significant variation of out-of-plane anisotropy near the diameter of the smaller discs, presenting a clear boundary between vortex cores lying inside and outside of the tower center, potentially allowing for useful applications. The dynamics of the tower structures are very rich and we hope to spark future discussions on the topic.

From a technological point of view, it is fundamental that we increase the bit-density in any potential memory device. This is achieved by reducing the size of the material sustaining the bit unit or bit state (in this case, the vortex). Devices using hanoi-tower disks thus are promising alternatives to simple nanodisks, due to the vortex configuration being favourable and naturally occurring in systems with overall reduced dimensions. The towers also significantly increase out-of-plane effects, which is relevant when coming up with reading/writing operations in memory devices, and also important when tailoring pinned vortices for other applications.

#### Acknowledgments

The authors would like to thank the Brazilian agencies FAPESP, FAPEMIG, CAPES, CNPq and FINEP.

#### References

- [1] Q.A. Pankhurst, J. Connolly, S.K. Jones, J. Dobson, Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 36 (13) (2003) R167, <http://stacks.iop.org/0022-3727/36/i=13/a=201>.
- [2] D.-H. Kim, E.A. Rozhkova, I.V. Ulasov, S.D. Bader, T. Rajh, M.S. Lesniak, V. Novosad, Biofunctionalized magnetic-vortex microdisks for targeted cancer-cell destruction, *Nat. Mater.* 9 (2) (2010) 165–171, <http://dx.doi.org/10.1038/nmat2591>.
- [3] M. Goiriëna-Goikoetxea, A. García-Arribas, M. Rouco, A.V. Svalov, J.M. Barandiaran, High-yield fabrication of 60 nm permalloy nanodisks in well-defined magnetic vortex state for biomedical applications, *Nanotechnol.* 27 (17) (2016) 175302, <http://stacks.iop.org/0957-4484/27/i=17/a=175302>.
- [4] G.A. Prinz, Magneto-electronics applications, *J. Magn. Magn. Mater.* 200 (1–3) (1999) 57–68, [http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00335-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00335-2).
- [5] P.R. Hammar, B.R. Bennett, M.J. Yang, M. Johnson, Observation of spin injection at a ferromagnet-semiconductor interface, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999) 203–206, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.203>.
- [6] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, L.W. Molenkamp, Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode, *Nature* 402 (6763) (1999) 787–790, <http://dx.doi.org/10.1038/45502>.
- [7] H. Zeng, R. Skomski, L. Menon, Y. Liu, S. Bandyopadhyay, D.J. Sellmyer, Structure and magnetic properties of ferromagnetic nanowires in well-assembled arrays, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 134426, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.134426>.
- [8] S.-H. Chung, R.D. McMichael, D.T. Pierce, J. Unguris, Phase diagram of magnetic nanodisks measured by scanning electron microscopy with polarization analysis, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 024410, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.024410>.
- [9] W.F. Brown Jr., Criterion for uniform micromagnetization, *Phys. Rev.* 105 (1957) 1479–1482, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.105.1479>.
- [10] R.P. Cowburn, D.K. Koltsov, A.O. Adeyeye, M.E. Welland, D.M. Tricker, Single-domain circular nanomagnets, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999) 1042–1045, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.1042>.
- [11] H.W. Schumacher, C. Chappert, R.C. Sousa, P.P. Freitas, Effective bit addressing times for precessional switching of magnetic memory cells, *J. Appl. Phys.* 97 (12) (2005) 123907, <http://dx.doi.org/10.1063/1.1935765>.
- [12] J. Ding, G.N. Kakazei, X. Liu, K.Y. Guslienko, A.O. Adeyeye, Higher order vortex gyrotropic modes in circular ferromagnetic nanodots 4 (2014) 4796, doi: <http://dx.doi.org/10.1038/srep04796>.
- [13] C.A. Samudio, A.V.d. Santos, Electronic effect of v, ti, and sc impurities on the hyperfine interactions of fe atoms in  $\alpha$ -fe: a first principles study, *Mater. Res.* doi: <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2016-0662>.
- [14] J.O. Rantschler, D. Pulugurtha, A.J. Shapiro, L.M. Connors, A.P. Chen, A. Castillo, B.B. Maranville, R.D. McMichael, W.F. Egelhoff, Periodic table of impurity damping in doped permalloy thin films, in: INTERMAG 2006 – IEEE International Magnetism Conference, 2006, pp. 425–425, doi: <http://dx.doi.org/10.1109/INTMAG.2006.376149>.
- [15] R.P. Cowburn, Property variation with shape in magnetic nanoelements, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 33 (1) (2000) R1, <http://stacks.iop.org/0022-3727/33/i=1/a=201>.
- [16] V. Uhlíř, M. Urbánek, L. Hladík, J. Spousta, M.-Y. Im, P. Fischer, N. Eibagi, J.J. Kan, E.E. Fullerton, T. Šikola, Dynamic switching of the spin circulation in tapered magnetic nanodisks, *Nat. Nano.* 8 (5) (2013) 341–346, <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2013.66>.
- [17] M. Bi, X. Wang, H. Lu, L. Zhang, L. Deng, J. Xie, Enhanced nucleation of magnetic vortex in geometrically confined nanodots, *IEEE Trans. Magn.* 51 (11) (2015) 1–4, <http://dx.doi.org/10.1109/TMAG.2015.2450502>.
- [18] D. Toscano, S.A. Leonel, P.Z. Coura, F. Sato, B.V. Costa, M. Vázquez, Magnetization reversal of the transverse domain wall confined between two clusters of magnetic impurities in a ferromagnetic planar nanowire, *J. Magn.*

- Magn. Mater. 419 (2016) 37–42, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.05.107>.
- [19] M. Ohtake, T. Tanaka, K. Matsubara, F. Kirino, M. Futamoto, Epitaxial growth of permalloy thin films on mgo single-crystal substrates, *J. Phys.: Conf. Ser.* 303 (1) (2011) 012015, <http://stacks.iop.org/1742-6596/303/i=1/a=012015>.
- [20] K. Tanaka, Y. Cho, Actual information storage with a recording density of 4 tbit/in<sup>2</sup> in a ferroelectric recording medium, *Appl. Phys. Lett.* 97 (9), doi: 10.1063/1.3463470.
- [21] S. Hosaka, H. Sano, M. Shirai, H. Sone, Nanosilicon dot arrays with a bit pitch and a track pitch of 25 nm formed by electron-beam drawing and reactive ion etching for 1 Tbit/in<sup>2</sup> storage, *Appl. Phys. Lett.* 89 (22) (2006) 223131, <http://dx.doi.org/10.1063/1.2400102>.
- [22] A.R. Pereira, L.A.S. Mól, S.A. Leonel, P.Z. Coura, B.V. Costa, Vortex behavior near a spin vacancy in two-dimensional xy magnets, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 132409, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.132409>.
- [23] M. Rahm, J. Biberger, V. Umansky, D. Weiss, Vortex pinning at individual defects in magnetic nanodisks, *J. Appl. Phys.* 93 (10) (2003) 7429–7431, <http://dx.doi.org/10.1063/1.1558255>.
- [24] T. Uhlig, M. Rahm, C. Dietrich, R. Höllinger, M. Heumann, D. Weiss, J. Zweck, Shifting and pinning of a magnetic vortex core in a permalloy dot by a magnetic field, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 237205, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.237205>.
- [25] D. Kim, E. Rozhkova, I. Ulasov, S. Bader, T. Rajh, M. Lesniak, V. Novosad, Biofunctionalized magnetic-vortex microdisks for targeted cancer-cell destruction, *Nat. Mater.* 9 (2) (2010) 165–171, <http://dx.doi.org/10.1038/nmat2591>.
- [26] B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordström, O. Eriksson, A method for atomistic spin dynamics simulations: implementation and examples, *J. Phys.: Condens. Matter* 20 (31) (2008) 315203, <http://stacks.iop.org/0953-8984/20/i=31/a=315203>.
- [27] D. Toscano, S.A. Leonel, R.A. Dias, P. Coura, B.V. Costa, *J. Appl. Phys.* 109 (2011) 076104, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3573518>.
- [28] R.F.L. Evans, W.J. Fan, P. Churemart, T.A. Ostler, M.O.A. Ellis, R.W. Chantrell, Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials, *J. Phys.: Condens. Matter* 26 (10) (2014) 103202, <http://stacks.iop.org/0953-8984/26/i=10/a=103202>.
- [29] D. Toscano, S.A. Leonel, R.A. Dias, P.Z. Coura, J.C.S. Rocha, B.V. Costa, Magnetic vortex formation and gyrotropic mode in nanodisks, *J. Appl. Phys.* 109 (1), doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3526970>.
- [30] D. Toscano, S.A. Leonel, P.Z. Coura, F. Sato, R.A. Dias, B.V. Costa, Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities, *Appl. Phys. Lett.* 101 (25), doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4772071>.
- [31] J. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Coura, B. Costa, S. Leonel, The influence of magnetic impurities in the vortex core dynamics in magnetic nano-disks, *J. Magn. Magn. Mater.* 324 (19) (2012) 3083–3086, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.05.006>.
- [32] J. Sanders, E. Kandrot, *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming*, first ed., Addison-Wesley Professional, 2010, <http://www.amazon.com/exec/obidos/redirect?tag=citeulike07-20&path=ASIN/0131387685>.
- [33] S. Agramunt-Puig, N. Del-Valle, C. Navau, A. Sanchez, Controlling vortex chirality and polarity by geometry in magnetic nanodots, *Appl. Phys. Lett.* 104 (1) (2014) 012407, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4861423>.
- [34] M. d’Aquino, C. Serpico, G. Miano, Geometrical integration of Landau-Lifshitz-Gilbert equation based on the mid-point rule, *J. Comput. Phys.* 209 (2) (2005) 730–753, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.04.001>.
- [35] D.S. Vieira Jr., S.A. Leonel, R.A. Dias, D. Toscano, P.Z. Coura, F. Sato, Ground state study of the thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays, *J. Appl. Phys.* 116 (9), doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4894252>.
- [36] C.A. Ross, M. Hwang, M. Shima, J.Y. Cheng, M. Farhoud, T.A. Savas, H.I. Smith, W. Schwarzacher, F.M. Ross, M. Redjail, E.B. Humphrey, Micromagnetic behavior of electrodeposited cylinder arrays, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 144417, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.144417>.
- [37] S.-H. Chung, R.D. McMichael, D.T. Pierce, J. Unguris, Phase diagram of magnetic nanodisks measured by scanning electron microscopy with polarization analysis, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 024410, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.024410>.
- [38] J.C.S. Rocha, P.Z. Coura, S.A. Leonel, R.A. Dias, B.V. Costa, Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots, *J. Appl. Phys.* 107 (5), doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3318605>.

## 7 Estabilidade Térmica e Manipulação de Paredes de Domínio Aprisionadas em Impurezas

Outra aplicação imediata e relevante das implementações dessa tese foi na simulação de efeitos térmicos em nanofitas de Py dopadas com impurezas magnetizadas em um padrão específico, voltadas para o aprisionamento e controle de paredes de domínio de Néel. Como os domínios considerados aqui são estritamente instáveis em condições normais, o uso de impurezas modifica localmente a topologia do sistema, em analogia com modificações geométricas que alteram a anisotropia local das estruturas, causando uma interação adicional atrativa ou repulsiva sobre os domínios, a depender dos parâmetros relativos da impureza.

O trabalho foi publicado no Journal of Magnetism and Magnetic Materials, anexado ao final do capítulo **com a devida permissão. Todas as referências para afirmações feitas nesse capítulo também estão contidas no texto publicado. Referências à essa tese devem conter referências a esta publicação.** A contribuição do autor dessa tese para o trabalho foi com os dados e análise em particular do caso de temperaturas finitas para a movimentação da nanofita através de correntes elétricas de spins polarizados. Na análise da dinâmica das paredes de domínios na presença de impurezas, foi constatado que certas impurezas se comportam como poços de potencial que aprisionam as paredes, introduzindo um equilíbrio estável para esses domínios magnéticos e possibilitando o controle detalhado de sua posição. Sistemas construídos dessa maneira podem ser utilizados em designs de memórias magnéticas (MRAM) do tipo “racetrack”, reduzindo a volatilidade das mesmas. Essas paredes de domínio podem ser liberadas do potencial de impurezas através de pulsos de correntes baixos o suficiente para ignorarmos o efeito Joule.

No entanto, as energias de atração entre as paredes de domínio e as impurezas, para os tamanhos considerados, não aparentam serem suficientes para efetivamente manipular os domínios ao usarmos somente o modelo da eq. 2.47. Acontece que, em todos os casos de diferentes graus de impureza analisados, o potencial resultante de interação entre a parede domínio transversal gerada na fita e a impureza possui um estado de equilíbrio com energia proporcional à energia térmica  $K_b T$  (onde  $K_b$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura do sistema), com  $T = 300K$ . Ou seja, a energia de flutuações térmicas inerentes ao sistema poderia, em tese, ser suficiente para colapsar o estado de equilíbrio e

destruir a parede de domínio através da propagação de ondas de spin nas bordas, mesmo com a presença de impurezas atrativas na nanofita. Além disso, essa energia térmica é um efeito médio presente nos sistemas reais independentemente da atuação de correntes no sistema, não devendo ser confundida com a energia de dissipação de calor induzida pelo efeito Joule, que já foi levada em consideração ao usarmos valores baixos de corrente na dinâmica de movimento da parede de domínio entre diferentes concentrações locais de impurezas.

A modelagem dos efeitos térmicos foi feita com o modelo discreto da eq. 5.15, usando-se também a dinâmica de Langevin para considerar os efeitos estocásticos de ruído induzidos pela temperatura. Há duas etapas nesse processo, pois primeiro devemos demonstrar que os parâmetros da simulação são adequados para o tratamento via equação de Langevin (apêndice B), e após isso verificar que os ruídos presentes nos sistemas considerados podem ser realisticamente modelados por um modelo de ruído branco como na eq. B.23 do apêndice B. O modelo para a interação da parede de domínio com uma corrente elétrica de spins polarizados é o de Zhang-Li também mostrado no apêndice B.

Primeiramente, vamos lembrar que de acordo com a hipótese fundamental do micromagnetismo na eq. 2.19, devemos ter Campos estritamente uniformes dentro de cada célula discretizada em um sistema, para que as simulações reproduzam a dinâmica dos domínios magnéticos  $\chi_V$  adequadamente. Para o Campo estocástico na eq. de Langevin, essa hipótese deve ser adaptada para que o *valor esperado* das amplitudes de ruído seja constante através de todo o domínio da simulação (no espaço e no tempo). Com essa nova hipótese, uma trajetória estocástica simulada corresponderá a um movimento Browniano derivado a partir da equação de Langevin.

Para isso, é necessário e suficiente que seja válida a aproximação no sistema da existência de um *ruído branco*, ou seja, que os termos de Campo estocástico não tenham correlação alguma entre si, tanto entre dois passos temporais discretos quanto entre dois pontos diferentes do espaço. Com isso, a densidade espectral de processos aleatórios no sistema é constante, e podemos supor com alguma segurança que ao menos os valores esperados de Campos em cada célula serão uniformes.

A modelagem correta de um ruído branco para uma equação de Langevin baseada na equação LLG depende das integrais estocásticas utilizadas na solução do problema. Há dois tipos de integração de processos estocásticos, chamados de integral de Itô e integral de Stratonovich. A diferença fundamental entre as duas integrais (que são equivalentes em certos casos) é que no caso de Stratonovich vale a mesma regra da cadeia que para diferenciais usuais do cálculo de Leibniz, enquanto na integral de Itô é válida uma expressão mais complicada.



A estrutura de Lyapunov e a conservação da norma dos momentos magnéticos para todos os tempos - propriedades fundamentais da equação LLG - dependem das formas diferenciais envolvendo derivadas da magnetização. Dessa maneira, a manutenção das propriedades da eq. de Langevin baseada na equação LLG depende mutuamente de uma convergência do tipo Stratonovich - a eq. de Langevin mantém as propriedades da norma dos momentos magnéticos se e somente se a equação for integrada no sentido de Stratonovich.

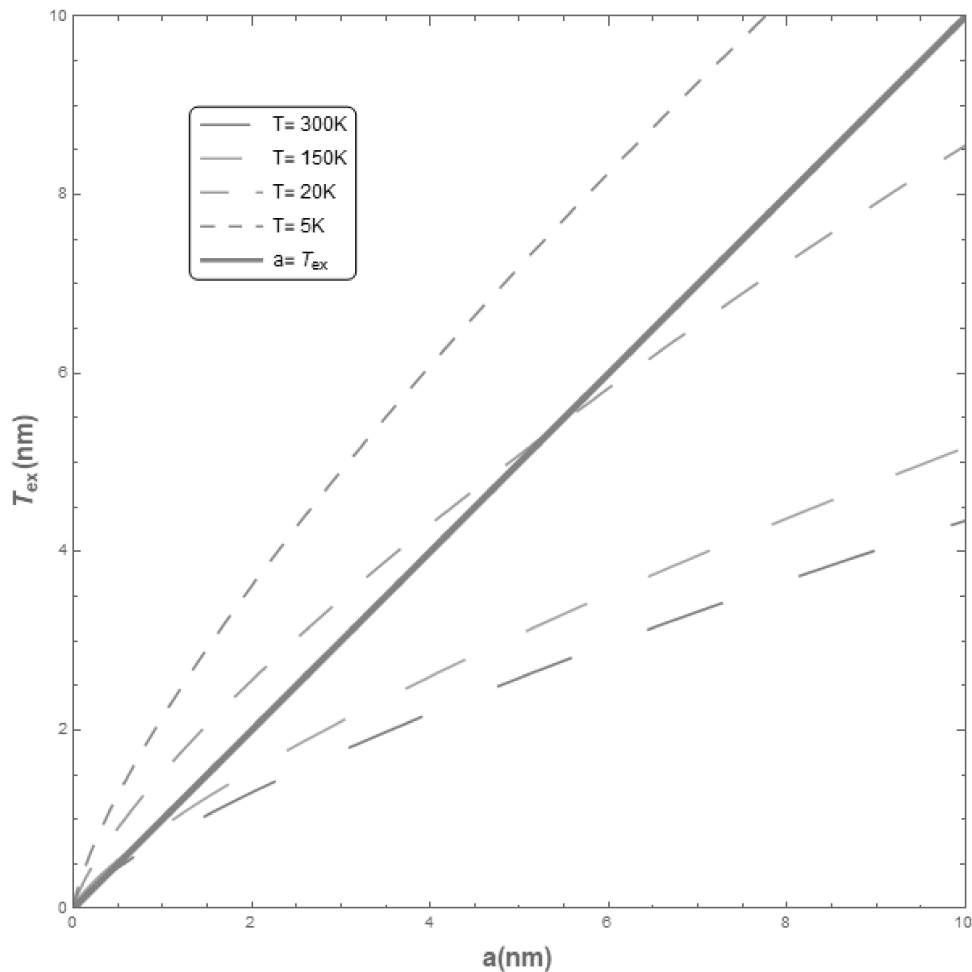
Devemos então escolher métodos numéricos que preservem a norma das magnetizações por célula a fim de garantir uma convergência das integrais de Stratonovich do problema de Langevin. Como vale a mesma regra da cadeia que no cálculo de Leibniz usual, não são necessárias outras modificações uma vez que essa condição for verificada. Portanto, o integrador do ponto médio esférico da eq. 5.24 é uma escolha excelente para garantir a convergência correta dessas simulações.

Quanto aos parâmetros da simulação, devemos elaborar como a presença do ruído afeta os limites de passos temporais e de tamanhos das células de trabalho micromagnéticas. De acordo com a eq. 4.4, o alcance típico de um domínio magnético em um sistema é dado por um comprimento característico  $\lambda$  que é função do Campo de anisotropia mais intenso no material. No caso de temperatura nula  $T = 0$ , temos os comprimentos de troca e o parâmetro de Bloch das eqs. 4.5 e 4.6 respectivamente, e os domínios magnéticos tem sua direção de saturação alterados em distâncias típicas de  $\pi\lambda_{ex}$  e  $\pi\delta_{ex}$ . Já em temperaturas finitas, haverá um efeito adicional de desvio da saturação, com flutuações térmicas não só removendo spins individuais de sua posição de equilíbrio, como também uma troca de momento angular entre esse sítio que recebeu energia térmica e os demais vizinhos próximos. Podemos inferir um alcance típico da propagação desse desvio considerando a amplitude média de flutuações e seguindo a definição geral de comprimentos característicos de domínios na eq. 4.4:

$$\begin{aligned} T_{ex} &= \sqrt{\frac{A}{\mu_0 M_s H_{th}}} \\ H_{th} &= \sqrt{\frac{2\alpha k_B T}{\Delta t \gamma \mu_0 M_s a^3}} \end{aligned} \tag{7.1}$$

Na expressão acima para o comprimento térmico  $T_{ex}$ ,  $A$  é a rigidez de troca,  $M_s$  a magnetização de saturação, e  $H_{th}$  é o valor esperado da intensidade das flutuações térmicas (apêndice B), escrita em função do damping  $\alpha$ , a constante de Boltzmann  $k_B$ , a temperatura  $T$ , o passo temporal  $\Delta t$  e o comprimento de correlação entre flutuações  $a$ , assim como a razão giromagnética eletrônica  $\gamma$  e a permeabilidade do vácuo  $\mu_0$ . Com a nossa hipótese de que o valor esperado do Campo resultante em cada célula é uniforme,  $a = a_0$  em

Figura 33 – Comprimento térmico  $T_{ex}$  em função dos comprimentos de correlação  $a$  para amostras de Py.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: As amostras são simuladas com  $\Delta t = 10^{-14}s$ . As simulações são apropriadas para valores acima da curva  $a = T_{ex}$  (linha sólida), uma vez que nessa região temos  $a_0 < T_{ex}$ .

uma simulação passa a representar tanto a discretização de simulações micromagnéticas, quanto o próprio comprimento de correlação das flutuações. A eq. 7.1 pode ser interpretada diretamente como o desvio da saturação dos domínios em comprimentos característicos de  $\pi T_{ex}$ , de maneira que similar aos demais casos, devemos escolher  $a_0 < T_{ex}$  para garantir a representação correta dos domínios nesse novo regime.

É importante notar que  $a = a_0$  é assumido de acordo com a hipótese de uniformidade, mas é justo a manutenção dessa hipótese que depende da nossa escolha de volume de células de trabalho. Por exemplo, seja uma amostra de Py com parâmetros  $\mu_0 M_s = 1.005T$ ,  $A = 1.3 \times 10^{-11} J/m$ ,  $\alpha = 0.01$  e simulado com  $\Delta t = 4.3 \times 10^{-14}s$ . Podemos obter as curvas de  $T_{ex}$  na eq. 7.1, em função de diferentes temperaturas e comprimentos de correlação  $a$ , como na fig. 33. O comprimento térmico é a distância a partir da qual efeitos de flutuação

são capazes de causar um desvio na saturação dos domínios, i.e o alcance limite dado pela razão entre a interação de troca e o Campo de flutuações. Para valores de comprimentos de correlação  $a = a_0 < T_{ex}$ , as flutuações térmicas não irão depender diretamente do tamanho da célula, pois obtemos resolução completa dos Campos de troca e da transição entre domínios, chegando até o valor limite em que  $a_0 = T_{ex}$ .

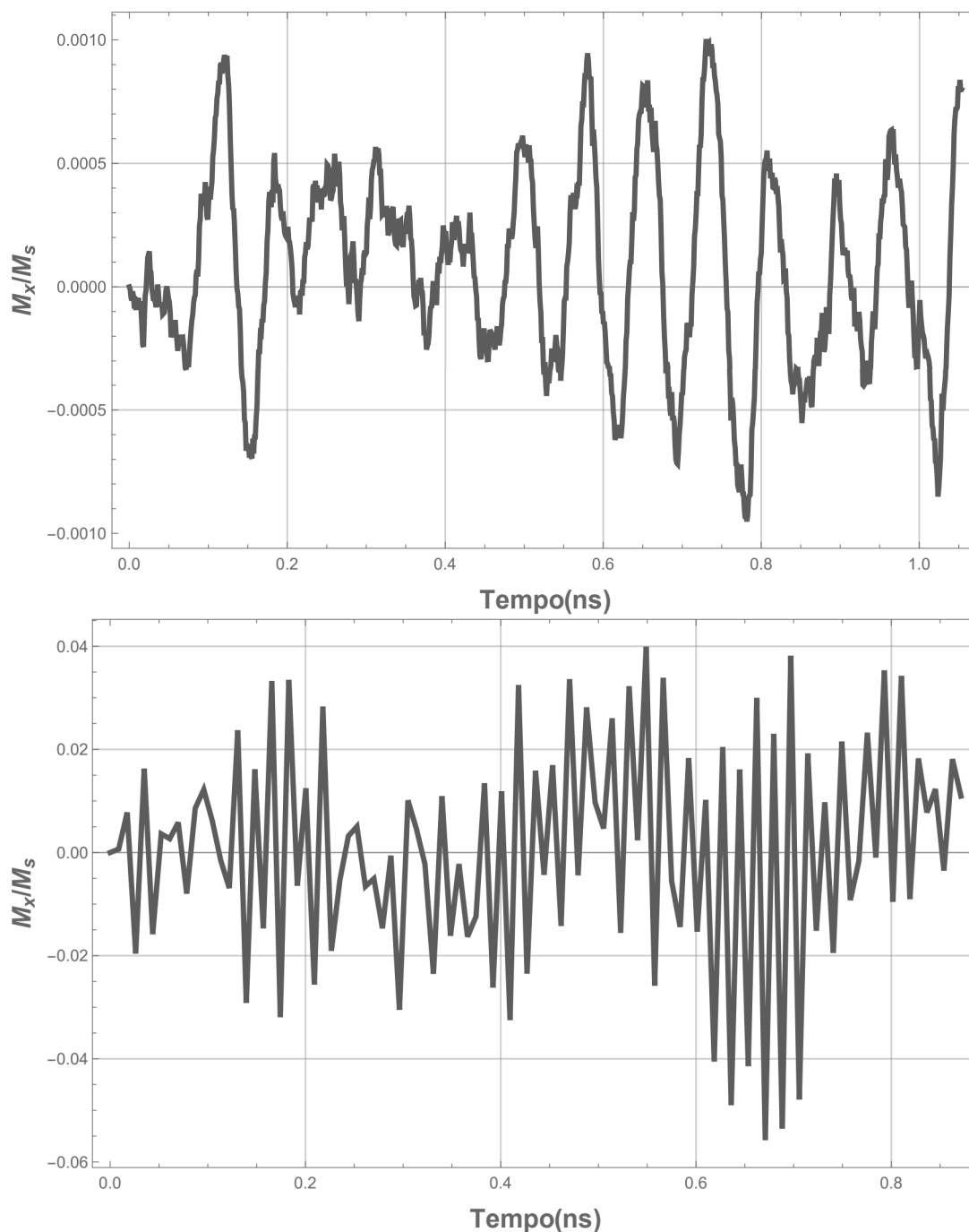
O comprimento térmico também possui uma dependência aguda com a temperatura. Conforme a mesma aumenta,  $T_{ex}$  passa a ser independente do tamanho da célula apenas para uma pequena faixa de parâmetros, e perdemos a resolução apropriada dos domínios. Para temperaturas mais baixas, podemos manter um volume de células de trabalho próximos aos do caso sem temperatura, com o comprimento de troca da eq. 4.5 dominando as transições entre domínios.

Para realizar simulações em altas temperaturas, é possível também aumentarmos o tamanho do passo temporal  $\Delta t$  afim de manter intervalos de diferenças finitas computacionalmente viáveis. Isso apresenta um problema de otimização similar ao apresentado pela condição CFL na eq. 4.25. Para as nanofitas de Py consideradas aqui por exemplo, podemos simular fenômenos em temperatura ambiente que ocorrem em escalas do nanossegundo ou até mesmo do picossegundo com passos temporais de  $\Delta t \sim (10^{-10}, 10^{-12})s$ , como é o caso das correntes e das transições entre impurezas das paredes de domínio consideradas. Fenômenos ultra rápidos porém, na escala do femtossegundo, exigiriam um tratamento diferenciado ou até mesmo em resolução atômica das estruturas. Além disso, é importante levar em conta que estamos usando um integrador simplético que é estável mesmo em passos temporais elevados, ao passo que introduziríamos grandes erros numéricos com integradores explícitos convencionais, inviabilizando simulações com Campos e correntes externos.

Em contribuição para esse trabalho, nosso objetivo foi demonstrar que as flutuações térmicas não são capazes de remover paredes de domínio centradas em torno de impurezas atrativas, mesmo em temperaturas típicas de operação de dispositivos, acima da temperatura ambiente. Utilizando os parâmetros do Py, simulamos nanofitas com volume  $2500 \times 30 \times 5nm^3$ , com uma impureza atrativa de tamanho  $5 \times 5 \times 5nm^3$  em seu centro, tal que a razão entre os valores de rigidez de troca do Py e da impureza seja  $A_{imp}/A_{Py} = 0.7$ . Os detalhes da atração e repulsão através de impurezas são discutidos na publicação em si e não alteram a análise realizada aqui, uma vez estabelecido que existe uma interação entre as paredes e impurezas.

Para simular a dinâmica de equilíbrio em temperaturas finitas, usamos a eq. de Langevin (apêndice B) com uma rede de diferenças finitas composta de células de tamanho  $2 \times 2 \times 2nm^3$ . Utilizamos o integrador PC esférico da eq. 5.35, com a eq.

Figura 34 – Dinâmica da magnetização em equilíbrio para as temperaturas de 300K e 600K (acima e abaixo respectivamente).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Em ambos os casos a posição da parede de domínio é variada em menos de 10% de sua posição original, apesar de flutuações mais bruscas ou intensas no caso de temperatura mais alta.

5.34 para gerar os três primeiros passos iniciais. Ao invés de usar apenas um passo corretor, reiteramos o método até que um erro de  $\|\mathbf{m}_{i,n+1}^{k+1} - \mathbf{m}_{i,n+1}^k\| = \epsilon < 10^{-5}$  seja alcançado, ressaltando também que o Campo estocástico  $H_{th}$  é mantido constante entre passos temporais. Para descrever o sistema em altas temperaturas, é necessário um passo temporal  $\Delta t$  suficientemente grande para que  $a_0 < T_{ex}$  e o comprimento térmico não seja ultrapassado. Escolhemos assim  $\Delta t = 10^{-11}s$ , o que nos possibilitou simular estruturas entre 300K a 600K ( $T_{ex} \approx 2.2 \sim 3nm$ ).

Na fig. 34 temos a evolução temporal do parâmetro de ordem  $M_x$  (eq. 5.42) para duas estruturas idênticas com respectivamente 300K e 600K de temperatura. Este pode ser usado como posição da parede de domínio na nanofita uma vez que a variação dele está diretamente relacionado com a proporção de momentos magnéticos saturados a mais em uma dada direção da largura da fita sendo  $|M_x| = 0$  para a posição da parede na origem, e  $|M_x| = 1$  para momentos completamente saturados em algum dos sentidos do eixo-x. Em ambos os casos, uma variação de menos de 0.05 é observada a partir da posição original, para uma escala de tempo típica dos pulsos de corrente utilizados no trabalho e as respostas dinâmicas correspondentes. Estruturas com temperatura intermediária simuladas na publicação também apresentam comportamento oscilatório similar. A pequena variação encontrada sugere que o dispositivo é capaz de manter seu estado a longo prazo sem que efeitos térmicos destruam ou desloquem as paredes de domínio.

Devemos explicar então porque a energia térmica  $K_b T$  na forma de ruído não é capaz de destruir a interação entre os domínios e impurezas, se essa interação é exatamente proporcional à mesma. Nos remetendo novamente à fig. 34, podemos ver que, com o aumento da temperatura, não só ocorre um aumento da amplitude de oscilações da parede de domínio em torno de  $M_x = 0$ , como também aumenta sua frequência. Em princípio a frequência seria alta o suficiente para se acoplar aos valores típicos de pulsos e respostas para dispositivos de memória (na ordem do GHz). No entanto, a diferença crucial é que as flutuações não são bem localizadas mas sim distribuídas através de toda a amostra. Tanto no caso de  $T = 300K$  e especialmente no caso  $T = 600K$ , as flutuações mais rápidas com picos acentuados no valor de  $M_x$  não são apenas devido à oscilação na posição da parede de domínio, mas também ocorrem devido a variações distantes da região central, principalmente nas bordas laterais onde a interação magnetostática predomina, e a presença maior de cargas superficiais permite um desvio mais intenso da saturação.

Vemos assim que, apesar de ordens de grandeza similares, a energia térmica e a interação entre impurezas e a parede de domínio são de natureza estritamente diferente, sendo a primeira distribuída através de toda a amostra com longo alcance e a primeira local e atuando diretamente em sítios de impureza. Além disso a interação parede-impurezas tem natureza derivada da interação de troca e portanto prevalece em escalas abaixo e próximas

do comprimento térmico e dos demais comprimentos característicos de anisotropias do sistema.

Note que em nossa análise é fundamental que os tempos típicos de operação de correntes elétricas, assim como o de estabilização dos sistemas, sejam da ordem de ns como na publicação. Também é importante que as densidades de corrente sejam baixas o suficiente para limitar a presença de outros efeitos térmicos além dos processos de flutuação e dissipação, como o efeito Joule. Isso é necessário pois em nossa análise assumimos um ruído branco, em que trocas de momentos em um dado intervalo de tempo e em um dado sítio de magnetização não tem correlação alguma com outros eventos de flutuação no sistema. Essa aproximação não é estritamente válida, pois no nível eletrônico transferências de momento possuem uma correlação não-nula em geral (apêndice B). Mesmo assim, o tempo de correlação em flutuações típicas de ferromagnetos são da ordem de  $\tau < 10^{-15}s$ , de maneira que nas escalas de tempo consideradas nesse trabalho, os efeitos térmicos transientes são suficientemente mais rápidos do que os fenômenos de interesse para considerarmos apenas a dinâmica específica dos mesmos, mantendo a hipótese de um ruído branco. Em casos mais complexos envolvendo fenômenos ultrarrápidos na ordem do fs, o próprio modelo da eq. de Langevin deverá ser revisado para simularmos a correlação no ruído.



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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

## Research articles

## Depinning of the transverse domain wall trapped at magnetic impurities patterned in planar nanowires: Control of the wall motion using low-intensity and short-duration current pulses



E.L.M. Paixão\*, D. Toscano, J.C.S. Gomes, M.G. Monteiro Jr., F. Sato, S.A. Leonel, P.Z. Coura

Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received 27 April 2017

Received in revised form 24 November 2017

Accepted 27 November 2017

## Keywords:

Transverse domain wall  
Spin transfer torque  
Artificial magnetic defects  
Micromagnetic simulations

## ABSTRACT

Understanding and controlling of domain wall motion in magnetic nanowires is extremely important for the development and production of many spintronic devices. It is well known that notches are able to pin domain walls, but their pinning potential strength are too strong and it demands high-intensity current pulses to achieve wall depinning in magnetic nanowires. However, traps of pinning can be also originated from magnetic impurities, consisting of located variations of the nanowire's magnetic properties, such as exchange stiffness constant, saturation magnetization, anisotropy constant, damping parameter, and so on. In this work, we have performed micromagnetic simulations to investigate the depinning mechanism of a transverse domain wall (TDW) trapped at an artificial magnetic defect using spin-polarized current pulses. In order to create pinning traps, a simplified magnetic impurity model, only based on a local reduction of the exchange stiffness constant, have been considered. In order to provide a background for experimental studies, we have varied the parameter related to the pinning potential strength of the magnetic impurity. By adjusting the pinning potential of magnetic impurities and choosing simultaneously a suitable current pulse, we have found that it is possible to obtain domain wall depinning by applying low-intensity and short-duration current pulses. Furthermore, it was considered a planar magnetic nanowire containing a linear distribution of equally-spaced magnetic impurities and we have demonstrated the position control of a single TDW by applying sequential current pulses; that means the wall movement from an impurity to another.

© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

Nanoscaled magnetic thin films are suitable systems to study exotic magnetic structures, such as vortices, skyrmions and domain walls. Besides being a relevant subject to fundamental micromagnetism, new concepts for spintronic devices [1–3] based on such quasiparticles are made possible once they can be manipulated not only by a magnetic field but also by a spin-polarized current. In this paper, we focus on the study of the magnetization dynamics of magnetic nanowires where the domain walls are restricted to an unidimensional movement. In the last few years, much effort has been dedicated to control the nucleation and propagation of domain walls in magnetic nanowires [4–8]. It is well known that a planar nanowire made of a soft magnetic material

can present the either transverse or vortex domain walls [9,10], the wall structure depends on the aspect ratio of the nanowire (thickness/width). Due to the shape anisotropy, the magnetic domains are aligned along the wire's longest axis. Thus, the wall separating two antiparallel domains can occur in the either head-to-head or tail-to-tail configurations. Several domain walls can coexist in the same magnetic nanowire, being necessary that adjacent domain walls alternate between the head-to-head and tail-to-tail configurations. The simplest effect induced by an axial magnetic field pulse is the wall displacement. When applying magnetic field along the wire's length, the domain with magnetization oriented in the direction of the field expands to minimize the Zeeman energy, thus the wall is shifted from its equilibrium position. It is worth mentioning that magnetic fields can not be used to move multiple DWs in the same nanowire, because the neighboring DWs move in opposite directions and eventually annihilate with each other. Due to the spin transfer torque effect (STT) [11–15], it has been found that both head-to-head and tail-to-tail domain walls can be translated with the same velocity when a

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [elmpaixao@fisica.ufjf.br](mailto:elmpaixao@fisica.ufjf.br) (E.L.M. Paixão), [danielotoscano@fisica.ufjf.br](mailto:danielotoscano@fisica.ufjf.br) (D. Toscano), [jcs.gomes@fisica.ufjf.br](mailto:jcs.gomes@fisica.ufjf.br) (J.C.S. Gomes), [maxweljr@gmail.com](mailto:maxweljr@gmail.com) (M.G. Monteiro Jr.), [sjfsato@fisica.ufjf.br](mailto:sjfsato@fisica.ufjf.br) (F. Sato), [sidney@fisica.ufjf.br](mailto:sidney@fisica.ufjf.br) (S.A. Leonel), [pablo@fisica.ufjf.br](mailto:pablo@fisica.ufjf.br) (P.Z. Coura).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.117>  
0304-8853/© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

spin-polarized current is conducted along the nanowire. Thus, either wall configuration will be shifted in the direction of the electron flow [16]. It has been demonstrated experimentally that artificial defects, such as notches patterned as part of the nanowire, are able to control the wall domain positions [17,18]. The DW precessional motion confined in a potential well was observed by applying a spin-polarized current below a threshold value [19]. Also it has been noticed that it was needed to use high current densities [20,21] for depinning the wall trapped at a notch, being the current amplitudes impractical for applications in devices due to increase of the material temperature (Joule heating) [22]. Thomas et al. [23] showed the domain walls can be easily depinned from a notch by using the concept of resonant amplification, which uses a short sequence of current pulses, whose durations and separations are tuned to the wall's precession frequency. Although this strategy minimizes the current densities required to depin the domain walls (about 5 times smaller than in the absence of resonant amplification), a static magnetic field was simultaneously used to assist domain wall depinning.

The majority of spintronic devices based on domain wall motion require traps to stabilize the wall at predefined positions along the magnetic nanowire [16,24–26]. These traps correspond to artificial defects and its incorporation into nanowires has been performed by nanowire's located variations either its geometry or its magnetic properties. Variations on the geometry of the nanowires (such as notches, anti-notches, junctions and corners) have shown useful to pin domain walls [6,18,27–32], but their pinning potential strength are too strong and it demands high-intensity current pulses to achieve wall depinning in magnetic nanowires. As an alternative, magnetic defects (variations on the magnetic properties of the nanowires) can be used to engineer traps for domain walls. The control offered by ion irradiation or ion implantation techniques makes it possible to tailor magnetic properties of a predefined region in magnetic thin films [33], for a review see Ref. [34]. Gallium implantation in Permalloy thin films from a focused ion beam system has been investigated in Ref. [35]. It was found that there is minimum value of the implantation dose ( $10^{15}$  Ga<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup>) required for increasing the coercivity of the implanted region. The region with higher coercivity has resulted in a trap for domain wall pinning. On the other hand, the gallium implantation in films with perpendicular magnetic anisotropy (PMA) was suitable to locally reduce the magnetic anisotropy [36,37]. Moreover, transition metals have been implanted with the intention to modify the saturation magnetization (chromium and nickel) and the magnetic anisotropy (cobalt), see Ref. [38–40]. Finally, the modification of the magnetic damping could be achieved with the implantation of rare-earth elements (terbium, gadolinium, holmium), see Ref. [41,42].

In the last few years the effect of the implantation of chromium ions into permalloy thin films have been investigated [38,43,44]. It is well known that modification of magnetic properties are accompanied by structural changes in the irradiated region. It might also be observed that structural defects are responsible for tailoring magnetic properties: local reduction of the saturation magnetization, small variations in the magnetocrystalline anisotropy as well as changing the exchange constant and the damping parameter [34]. Domain wall pinning was observed experimentally in permalloy nanowires containing the so-called magnetic soft spots [45,46]. These works have reported that the strength of the pinning potential can be tuned by the Cr ion fluence applied to induce the traps for domain walls. In addition the authors performed micromagnetic simulations to investigate the pinning potential by varying the saturation magnetization at the local of a square-shaped magnetic soft spot. In summary they have concluded that the implantation of chromium ions can be used to induce traps for domain

walls via a local reduction in the saturation magnetization. A small addition of Cr into permalloy, about 8% Cr, is able to degrade the magnetic properties of the near-surface region, which becomes an alloy paramagnetic at room temperature [43]. For this reason, subsequent works have used focused ion beam irradiation to modify the magnetic properties at the interface of multilayer nanowires [47–49]. The magnetic system consist of a layer permalloy capped with a non-magnetic layer, such as chromium or gold. Using localized Ga<sup>+</sup> ion irradiation, these investigations have observed domain wall pinning at the regions where the irradiation caused the intermixing of the ferromagnetic and non-magnetic layers. Thus, the modification of the magnetic properties occurs more homogeneously without the damaging effects become significant. Once again the authors of these investigations perform micromagnetic simulations to explain the irradiation dose dependence with the pinning strength via a local reduction of the saturation magnetization, whereas the others material parameters have not been changed. As mentioned in many works [34,46,47], the effect of the ion irradiation can introduce discontinuities not only in the saturation magnetization but also in others magnetic properties, in particular a local variation in the exchange coupling. However, until this study there are no experimental results about the effect caused in the domain wall dynamic by a local change in the exchange constant. Furthermore, our team has considered a discontinuity of the exchange stiffness constant in soft magnetic material by using micromagnetic simulations [50–52]. In the Ref. [50] both pinning and blocking traps for the TDW in magnetic nanowires have been observed via Hamiltonian model describing two types of magnetic impurities. A local reduction of the exchange constant originates a pinning trap (potential well), whereas a local increase of the exchange constant originates a blocking trap (potential barrier). The control of the position using such magnetic impurities have already been demonstrated via micromagnetic simulation by our group [51]. In this study the TDW movement from an impurity to another was induced by external magnetic field pulse. Recently we have studied the polarity reversal of the TDW under the condition that the wall with reversed polarity was stabilized at predefined positions [52]. We have observed that the control of the TDW position using a pair of magnetic impurities requires smaller excitation amplitudes than the polarity control does, about one order of magnitude. In order to stabilize the wall with the reversed polarity, we had to strengthen the pinning and blocking effects. This was achieved by increasing the size of the magnetic impurity clusters.

Within this framework, magnetic defects can be intentionally incorporated in nanomagnets to change the magnetic properties of selected areas, which can be used to engineer traps for domain walls in magnetic nanowires. We believe that magnetic impurities consisting of local variations of the nanowire's magnetic properties are more advantageous than notches, because they do not distort the wire geometry besides providing more parameters to adjust the strength of the trap pinning potential. Evidently, it is not needed to apply a high-intensity current pulse when the wall is weakly pinned at a trap. This can be achieved by tuning not only the impurity size (the selected area of the nanowire where the material magnetic properties will be modified) but also in strength of the located magnetic variations (exchange stiffness constant, saturation magnetization, anisotropy constant, damping parameter, and so on). In previous papers our team has used only magnetic field pulses as external agent to manipulate TDW trapped in magnetic defects, however, in this work, we have used only current pulses. Our work system consists of Permalloy planar nanowires containing magnetic impurities, such pinning traps were introduced via a local reduction of the exchange stiffness constant. In contrast to previous studies on the domain wall depinning, which



used a notch as a trap, we have observed that it is not necessary high-intensity current pulses or even an additional magnetic field to achieve domain wall depinning. Even if the wall is strongly pinned at a magnetic impurity, we can reduce the amplitude of the current pulse by using the concept of resonant amplification. As has been previously mentioned, this strategy was developed by L. Thomas et al. [23] by studying the domain wall depinning at a notch. This study has also considered a planar magnetic nanowire containing a linear distribution of equally-spaced magnetic impurities and we have investigated the possibility of controlling the TDW position from an impurity to another by applying sequential current pulses.

## 2. Model and methodology

In this section we present a brief introduction of the micromagnetism formalism, in particular of the problem concerning the current induced domain wall motion. By applying a spin polarized current in a ferromagnet, the magnetic moments of the charge carriers tend to align its polarization along the local magnetization direction due to the strong exchange interaction between the local magnetization and the magnetic moments of the itinerant electrons. Due to total spin conservation, the spin angular momentum of conduction electrons is transferred to localized magnetic moments, which is equivalent to a torque acting on the magnetization. In order to obtain a theoretical framework in which was able to explain the experimental results, Zhang and Li have proposed the standard Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation with two additional terms related to spin torque due to the spatially non-uniform magnetization [53]. The modified LLG equation for a polarized current in the x-direction is given by

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{B}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{b_j}{M_s^2} \vec{M} \times \left( \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right) - \frac{c_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}, \quad (1)$$

where  $\vec{M}$  is the local magnetization,  $M_s$  is the saturation magnetization ( $|\vec{M}| = M_s$ ),  $\gamma$  is the gyromagnetic ratio,  $\vec{B}_{\text{eff}}$  is the effective magnetic field,  $\alpha$  is the Gilbert damping parameter,  $b_j = P j_e \mu_B / e M_s (1 + \xi^2)$  and  $c_j = \xi b_j$  has unit of velocity,  $\mu_B$  is the Bohr magneton,  $j_e$  is the current density and  $P$  is the spin polarization of the current. The two last terms are well known adiabatic and non-adiabatic spin torques, respectively. Initially,  $c_j$  was discarded because  $c_j/b_j = \xi \approx 10^{-2}$ , but it is necessary to determine the initial and terminal velocities of the domain wall [53].

Our work system have the shape of a parallelepiped of length  $L$ , width  $w$  and thickness  $t$  along the directions  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  and  $\hat{z}$ , respectively, see Fig. 1. We have chosen  $L = 2500$  nm,  $w = 30$  nm and  $t = 5$  nm that satisfy the condition  $L \gg w > t$  required to obtain TDW. Fig. 1 shows a typical initial configuration to study TDW depinning. We have used our own numerical code written in Fortran 90 programming language and the magnetization dynamics is performed by numerical solution of the discrete version of the modified LLG

equation (Eq. 1). Within the micromagnetic approach, the interaction constants depend on the parameters of the material and also on how the system is partitioned into cells. We have chosen to use cubic cells of edge length  $a$  to calculate the total energy  $E = E_{\text{ex}} + E_{\text{dip}}$ . According to the classical ferromagnetic model, we have computed the energy of the system with the following expression

$$E = -\frac{a^3}{2} \sum_i \vec{M}_i \cdot \left\{ \frac{1}{a^3 M_s^2} \sum_j \left\langle \begin{array}{l} J_{ij} \vec{M}_j + \\ < i, j > \end{array} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{j \neq i} \left[ \frac{3 \vec{r}_{ij} (\vec{M}_j \cdot \vec{r}_{ij}) - \vec{M}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \right. \\ \left. E = -\frac{a^3}{2} \sum_i \vec{M}_i \cdot \vec{B}_{\text{eff}}^i \right. \quad (2)$$

where the indices  $i$  and  $j$  represent the cubic cells of the sample,  $r_{ij}$  the distance between them, the constant  $\mu_0$  is the magnetic permeability and the symbol  $\langle i, j \rangle$  indicates nearest neighbors. We have chosen the typical parameters of the Permalloy-79 ( $\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$ ), the saturation magnetization  $M_s = 8.6 \times 10^5$  A/m, the exchange stiffness constant  $A = 1.3 \times 10^{-11}$  J/m, the damping parameter  $\alpha = 0.01$  and no anisotropy. As in many micromagnetic simulations [21,54,55] we have used the following parameters for the spin-polarized current  $P = 0.5$  and  $\xi = 0.015$ . We have estimated the exchange length as  $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \approx 5.3$  nm and according to the rule  $a < \lambda$  we have chosen  $a = 5$  nm.  $J_{ij} = J = 2aA$  (units of energy) is the exchange coupling constant between cells of the Permalloy and  $J_{ij} = J'$  for interaction between Permalloy and magnetic impurities. To integrate the equation of motion we have used the fourth-order predictor-corrector method with time step  $\Delta t = 0.043$  ps and we have not used cut off in the dipolar interaction term.

Considering the TDW as a quasiparticle of well-defined mass [56], its dynamical behavior in the presence of magnetic impurities can be studied as a mechanical oscillator when it is subjected to an external excitation. By altering the local variation  $J'/J$ , we can change the minimum (attractive) or maximum (repulsive) energy between TDW and magnetic impurity. There are two possible situations: If  $J'/J < 1$ , the TDW moves toward the magnetic impurity site and is trapped by it due to an effective attractive potential interaction between the TDW and the magnetic impurity. If  $J'/J > 1$ , the TDW moves away of the magnetic impurity site due to an effective repulsive potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity [50–52]. In this work, we have considered only values in the range  $0 \leq J'/J \leq 0.9$  for a local variation of the exchange constant, which represent pinning traps (potential wells). For example  $J'/J = 0.3$  corresponds to a local reduction of 70% exchange constant.

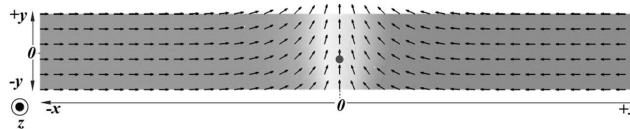


Fig. 1. Schematic view of the initial configuration of a ferromagnetic planar nanowire containing a TDW pinned at a predefined position, where there is a magnetic impurity (red circle) located practically at the wire's geometrical center (0, -2.50, 0) nm.

642

E.L.M. Paixão et al./Journal of Magnetism and Magnetic Materials 451 (2018) 639–646

In our numerical code we use the field  $\vec{B}_{\text{eff}}$  rather than to calculate  $\vec{H}_{\text{eff}}$ , which is other common way to calculate  $\partial\vec{M}/\partial t$  in the micromagnetic approach. The relation between them is given by  $\vec{B}_{\text{eff}} = \mu_0\vec{H}_{\text{eff}} + \mu_0\vec{M}$  and the energy per unit volume is given by  $\vec{M} \cdot \vec{B}_{\text{eff}} = \mu_0\vec{M} \cdot \vec{H}_{\text{eff}} + \mu_0 |\vec{M}|^2$ . The last term is constant because it depends on the local magnetization and it can be ignored to resolve the Eq. 1. Thereby, the system dynamics is not altered if we choose either the field  $\vec{B}_{\text{eff}}$  or  $\vec{H}_{\text{eff}}$ .

### 3. Results and discussion

In order to propose a simple model trap using magnetic impurities that act as pinning sites, it is essential to know the interaction potential between the TDW and the magnetic impurity as a function of the distance  $d_{\text{T}}$  between them. To calculate the interaction energy between the magnetic impurity and TDW, we have fixed the TDW at the center of the nanowire (see Fig. 1) and only varied the impurity position along the x-axis. For each  $d_{\text{T}}$  we have calculated the total internal energy of the system  $E(d_{\text{T}})$ . The energy  $E(d_{\text{T}} \rightarrow \infty)$  tends to the configuration energy of the system without impurity. Thus, the interaction energy between the magnetic impurity and TDW has been estimated using the following expression  $E_{\text{T}}(d_{\text{T}}) = E(d_{\text{T}}) - E(d_{\text{T}} \rightarrow \infty)$ . Fig. 2 shows the interaction energy as a function of  $d_{\text{T}}$ . For any local variation  $J'/J$ , we have observed that the TDW can be considered a free quasiparticle (depinning) as the interaction energy goes to zero in  $d_{\text{T}} \approx 60$  nm. Before computing the interaction energy between the TDW and the magnetic impurity, we have chosen as initial condition, the TDW placed exactly at the middle of the wire without no impurity. In the absence of an external agent (magnetic field or current), the integration of the equations of motion (Eq. 1) leads the system to minimum energy configuration. This makes possible the adjustment of the wall width to the dimensions of the nanowire.

To begin the study of the TDW depinning mechanism we have chosen to use small constant current pulse in the range  $(0.1 \leq j_e \leq 2.0) \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>, where the maximum value  $j_e^{\text{max}} = 2.0 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup> was chosen to avoid joule heating [22]. Fig. 3 shows our simulation results of the TDW position as a

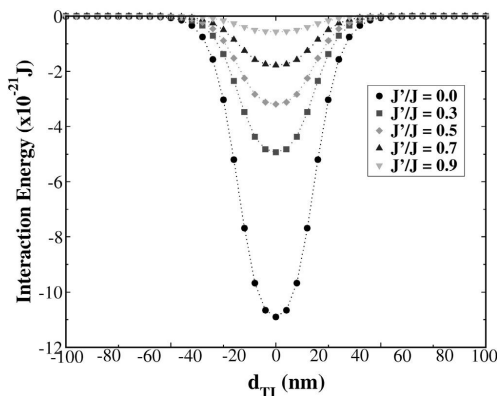


Fig. 2. Interaction energy as a function of the distance  $d_{\text{T}}$  between magnetic impurity and TDW. To compute the interaction energy for a certain relative distance  $d_{\text{T}}$ , we have kept the wall at the wire's center and only the impurity position was varied the wire's axis (x-axis). One can see that the pinning potential strength increases as the local variation  $J'/J$  decreases. A typical value of  $J'/J = 0.7$  corresponds to a local reduction of 30% exchange constant.

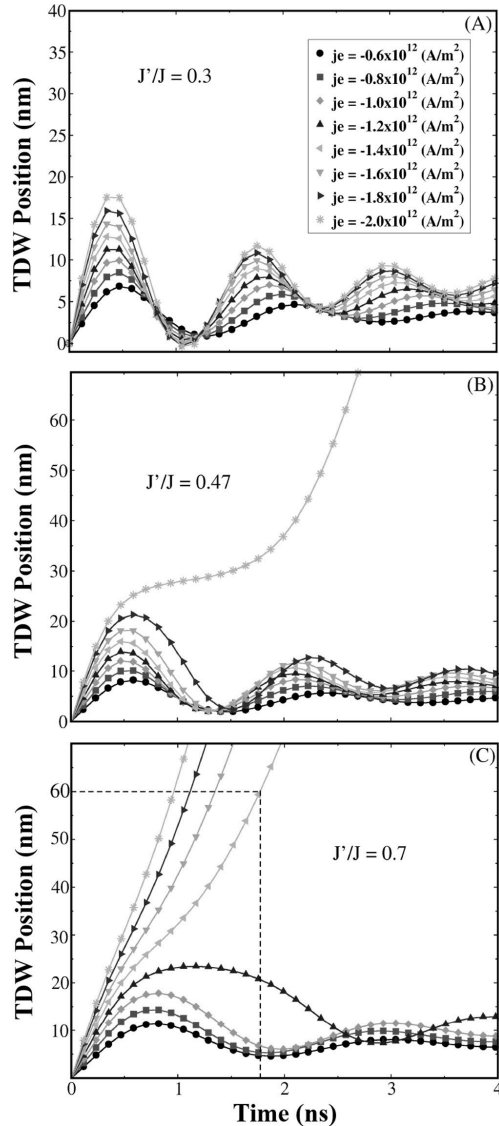


Fig. 3. When it is applied a constant current pulse the behavior of the TDW position can be separated in two situations: Figure (A) shows our simulations results when the TDW is strongly pinned ( $J'/J < 0.47$ ). Figure (B) shows the limit case between strongly and weakly pinned. Figure (C) shows our results when the TDW is weakly pinned ( $J'/J > 0.47$ ). For several values of  $j_e$  the TDW can be considered depinned when  $d_{\text{T}} \geq 60$  nm. For  $j_e = -1.4 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup> a current pulse of duration  $T_p \approx 1.80$  ns is sufficient for depin the TDW.

function of the time for  $J'/J = 0.3, 0.47, 0.7$  as the current is injected into the TDW along the negative x-axis. The value of  $J'/J = 0.3$  has been chosen because its pinning potential is not as strong as  $J'/J = 0.0$ , whereas the value of  $J'/J = 0.7$  has been chosen

due its pinning potential is not as weak as  $J'/J = 0.9$ , see Fig. 2. We can see that  $j_e^{max}$  is the minimum value required to depin the domain wall for  $(J'/J)_{min} = J'/J = 0.47$  (Fig. 3B). Thereby, the depinning mechanism is divided in two situations: In the first situations (weakly pinned), for  $J'/J \geq (J'/J)_{min}$  (Fig. 3B and 3C), the depinning occurs for some values  $j_e \leq j_e^{max}$ . In the second situation (strongly pinned), for  $J'/J < (J'/J)_{min}$  (Fig. 3A) it is impossible to depin the TDW applying a small constant current pulse.

In the first situation, we can use an unipolar current pulse of duration  $T_p$ , which is defined using the limit of  $d_{fl} = 60$  nm as reference. For example, in Fig. 4 is displayed our simulation results to  $j_e = 1.4 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup> along the negative x-axis, and  $J'/J = 0.7$  when it is applied an unipolar current pulse for several values of  $T_p$ . We can observe that for  $T_p \approx 1.80$  ns the TDW is depinned according to the result showed in Fig. 3C (dashed line). Thus, we can conclude that it is a good option to apply a constant current to determine  $T_p$  previously. We performed simulations for others rates  $J'/J > (J'/J)_{min}$  (not showed here) that confirm this methodology to depin the TDW.

In the second situation it is possible to take advantage of the resonant behavior of the TDW subjected to an oscillatory current pulse. L. Thomas et al. showed that the oscillation amplitude of the TDW confined to a strong pinning potential can be amplified when the current pulse has opposite polarities [23]. We have verified that for  $0.13 \leq J'/J < (J'/J)_{min}$  the oscillation amplitude is amplified, in an efficient way to depin the TDW, when it is applied a bipolar current pulse that has a duration  $T_p$  varying between the times  $t_1 = T_0(j_e)/4$  and  $t_2 = T_0(j_e)/2$  (see Fig. 5A), where  $T_0(j_e)$  is the TDW oscillation period subjected to a constant current pulse  $j_e$ . By reversing the pulse in this way, the amplitude of oscillation can be increased until reaching the distance  $d_{fl} \approx 60$  nm. In Fig. 5B it is showed the type of current pulse (inset) and our simulation results of the TDW position as a function of the time for  $J'/J = 0.3$ . We can observe that the depin occur for several values of  $T_p$  in the interval  $[t_1, t_2]$ .

Finally, for  $0 < J'/J < 0.13$ , we have verified that a bipolar current pulse is not enough to increase the oscillation amplitude to depin the TDW. Thus, it is necessary to explore other types of current pulses of opposing polarities to increase the amplitude of oscillation as, for example, a tripulse pulse. Fig. 6 shows our simulation results for  $J'/J = 0$  using a tripulse (see inset of the Fig. 6) where we can observe that the TDW is only depinned for

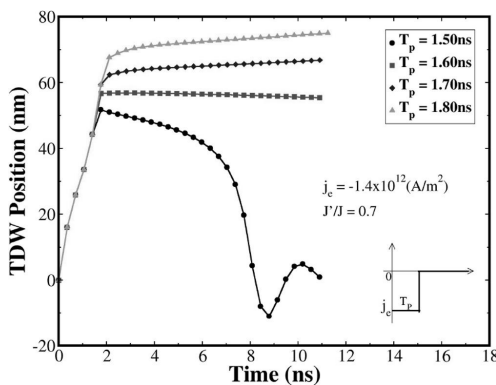


Fig. 4. TDW position as a function of the time when it is applied an unipolar current pulse (see inset). The green line was obtained for  $T_p = 1.80$  ns. This pulse duration was predicted in Fig. 3C, considering the limit of  $d_{fl} = 60$  nm.

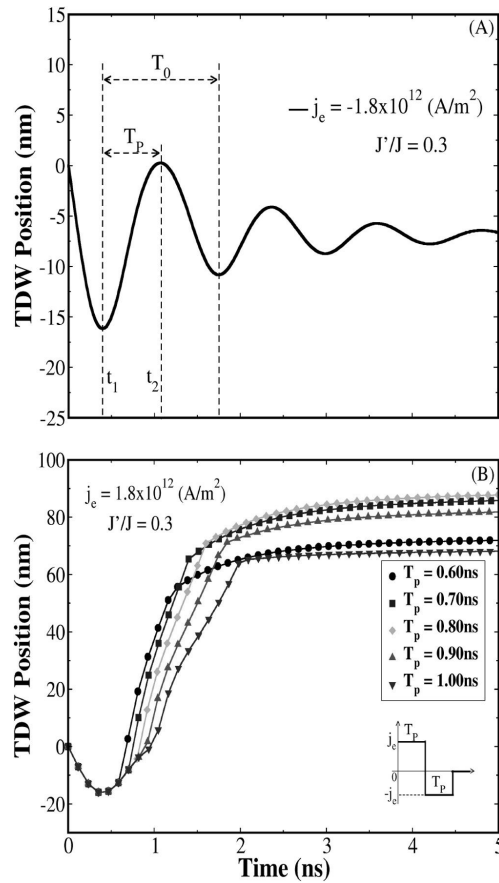


Fig. 5. TDW position as a function of time. Figure (A) when a constant current pulse was applied in order to determine the range  $[t_1, t_2]$  which was used to obtain  $T_p$ . Figure (B) shows the resonant amplification for some values of  $T_p$  when it was applied a bipolar current pulse. We can see that it is possible to depin the TDW for values of  $T_p$  within the range  $[t_1, t_2]$ . For each local variation  $J'/J$  we have different values of  $T_p$ .

$j_e = 2.0 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>. Again, the best result is to use the range  $t_1 < T_p < t_2$  defined in the same way as it was obtained for the bipolar current pulses. Our simulation results have confirmed the L. Thomas's simulation results about the use of oscillatory current pulse to depin domain wall [23].

Let us focus on the range  $J'/J > 0.13$  to demonstrate the possibility of moving the TDW by controlling its position using an equally spaced magnetic impurities array in the nanowire. As an example, Fig. 7 shows a nanowire containing 7 magnetic impurities ( $J'/J = 0.7$ ) separated by a distance of 60 nm and a TDW initially located at the center of the nanowire. We have applied a sequence of 3 unipolar current pulses along the negative x-axis, of duration  $T_p = 1$  ns separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns that it is the necessary time for the TDW to reach a new equilibrium position, see Fig. 7A. The consecutive snapshots in Fig. 7B show the TDW motion (see, for example, the supplemental videos M1 Ref. [57]). The TDW position as a function of the time is shown in Fig. 8.

644

E.L.M. Paixão et al./Journal of Magnetism and Magnetic Materials 451 (2018) 639–646

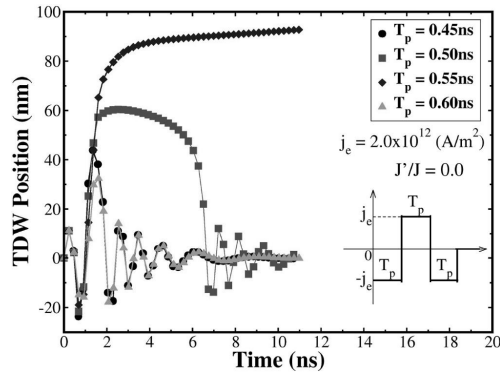


Fig. 6. TDW position as a function of time. For  $J//J = 0$  it is necessary to use a tripulse for depinning the TDW (see inset). Again, the obtained values for  $T_P$  are within the range  $[t_1, t_2]$  such as it was defined in Fig. 5A.

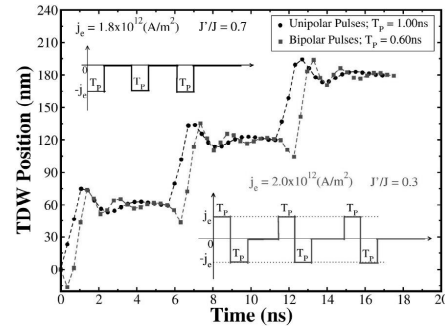


Fig. 8. Temporal evolution of the TDW position using unipolar and bipolar current pulses. TDW position can be controlled using both pulses. The black (circle symbol) curve shows the position control for the case in which the TDW was weakly pinned, while the red (square symbol) curve shows the position control in which the TDW was strongly pinned.

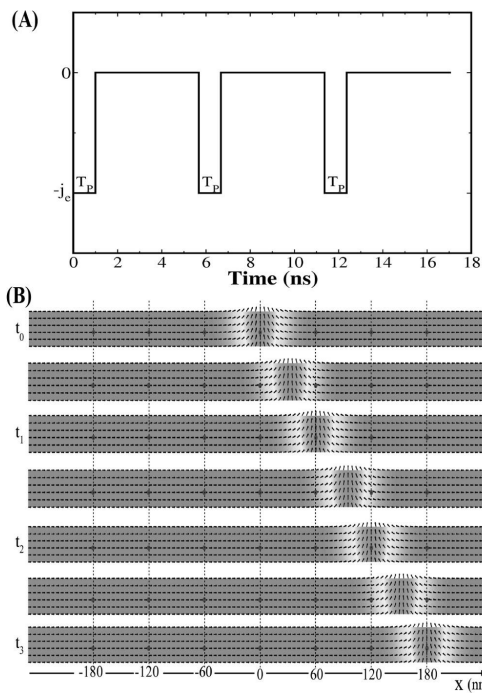


Fig. 7. Figure (A) shows a sequence of 3 unipolar current pulses along the negative  $x$ -axis, of duration  $T_P = 1$  ns separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns. Figure (B) snapshots showing the TDW motion when applying a sequence of 3 unipolar current pulses of duration  $T_P = 1$  ns separated by an interval of 4.68 ns for  $J//J = 0.7$  and  $j_c = -1.8 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>. The red circles represent the impurities. The TDW is at rest in  $t_1 = 5.68$  ns,  $t_2 = 11.36$  ns, and  $t_3 = 17.05$  ns at positions 60 nm, 120 nm, and 180 nm, respectively (Multimedia view).

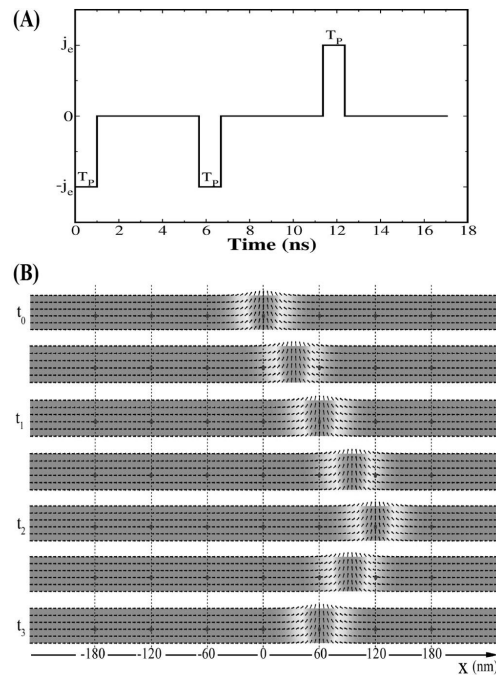


Fig. 9. Figure (A) shows two unipolar current pulses in the negative  $x$ -axis direction and one unipolar current pulse in the positive  $x$ -axis direction, of duration  $T_P = 1$  ns separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns. Figure (B) snapshots showing the TDW motion when it is applied a sequence of 3 unipolar current pulses (first two along the negative  $x$ -axis and the last one in the positive  $x$ -axis direction) of duration  $T_P = 1$  ns separated by an interval of 4.68 ns for  $J//J = 0.7$  and  $j_c = 1.8 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>. The red circles represent the impurities. The TDW is at rest in  $t_1 = 5.68$  ns,  $t_2 = 11.36$  ns, and  $t_3 = 17.05$  ns at positions 60 nm, 120 nm, and 60 nm, respectively (Multimedia view).

Another example showing the control of the TDW motion can be seen in the Fig. 9, which shows a nanowire containing 7 magnetic impurities ( $J'/J = 0.7$ ) separated by a distance of 60 nm and a TDW initially located at the center of the nanowire. A scheme similar to Fig. 7. However, we have applied first two unipolar current pulses in the negative x-axis direction and the last one was applied in the opposite direction, of duration  $T_p = 1$  ns separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns, which is the necessary time for the TDW to reach a new equilibrium position, see Fig. 9A. The consecutive snapshots in Fig. 9B show that after the TDW reached the equilibrium position at 120 nm, an unipolar current pulse was applied along the positive x-axis. Thereby, the TDW moves from its equilibrium position at 120 nm to a new equilibrium position at 60 nm (see, for example, the supplemental videos M2 Ref. [57]). Our simulation results for other values  $J'/J > (J'/J)_{min}$  are equivalent, confirming that it is possible to control the TDW position using magnetic impurities and an unipolar current pulse of small intensity.

Other results also show that it is possible to move the TDW between successive magnetic impurities using bipolar current pulses. For example, for  $J'/J = 0.3$ , where we use  $T_p = 0.60$  ns, and  $\Delta T = 4.68$  ns it is also possible to control the TDW position such as for unipolar current pulses. See Fig. 8 where is shown the TDW position as a function of time for both cases. Thus, we have shown that the TDW position can be controlled using a magnetic impurity array, and either unipolar or bipolar current pulses.

Our simulation results were obtained for a unique set of values of width, thickness, magnetic impurity size and magnetic impurity position along the y-axis. The results for  $(J'/J)_{min}$ ,  $d_m$ , and  $T_p$  will be different when other values are used, nevertheless the qualitative behavior of the interaction potential should be similar [50]. Thus, further research is needed to analyze these effects and obtain additional conclusions.

From the technological point of view, the reader can wonder whether magnetic defects considered in this work would be able to pin TDW's in a nanowire at room temperature? By analyzing the Fig. 2, one can see that our results for depths of the potential wells are of the same order of magnitude than the thermal energy at room temperature, that is,  $\Delta E \sim 10^{-21} J \sim k_B T_{room}$ . Thus, a defect like that will not pin the domain wall at room temperatures or at least depinning time constant will be very small. As in many micromagnetic simulations, the effect of temperature has been not included in our previous simulations. Although we have shown that magnetic defects (presenting a local reduction in the exchange stiffness constant) are able to pin TDW's, we believe this behavior should be observed at room temperature. In order to complement this work, we have performed some micromagnetic simulations including thermal fluctuations via Langevin dynamics [58] and the results showed that the TDW depinning mechanism is not activated by thermal fluctuations at temperatures below of the Curie temperature, for the case of Permalloy  $T_c \approx 700$  K  $> T_{room}$ . Thus, micromagnetic simulations including or not thermal fluctuations provide evidences that such magnetic defects work as traps for TDW's (see, for example, the supplemental videos L1 and L2 Ref. [59]). In order to verify our predictions, experimental studies could be done to further conclusions. A route to such studies would be to consider an analogue to the multilayer nanowires which were studied in Refs. [47, 48] by replacing the non-magnetic layer with a ferromagnetic layer. What magnetic properties will change significantly if the concentration of Ni or Fe were locally modified in ferromagnet/permalloy bilayer nanowires, exchange stiffness constant or saturation magnetization or even both of these magnetic properties? After using focused ion beam irradiation, we expect an increase in concentration of Ni at the interface of a Ni/Permalloy bilayer nanowire. On the other hand, we expect an

increase in concentration of Fe (or a decrease in concentration of Ni) at the interface of a Fe/Permalloy bilayer nanowire. By comparing the exchange stiffness constant among Ni, Fe and Permalloy, one can see that  $A^{Ni} < A^{Py} < A^{Fe}$ . A pinning trap (potential well) occurs for a local reduction in the exchange stiffness constant, for example,  $A^{Ni} < A^{Py}$ , whereas a blocking trap (potential barrier) occurs for a local increase in the exchange stiffness constant, for example,  $A^{Fe} > A^{Py}$ . Thus, we believe that both pinning and blocking traps for domain walls can be created in Ni/Permalloy and Fe/Permalloy bilayer nanowires, respectively. In order to verify our predictions, a quantitative study should be done to further conclusions.

#### 4. Conclusion

In order to create traps for domain walls in planar magnetic nanowires, recent works [47,48] have used focused ion beam irradiation to modify the magnetic properties at the non-magnetic/ferromagnetic multilayer nanowires. We believe that the intermixing of a non-magnetic metal and permalloy induced by the Ga<sup>+</sup> beam at the interface of a multilayer nanowires modifies locally not only the saturation magnetization but also other material parameters, especially the exchange stiffness constant; once the exchange energy represents the main term in the total energy of a ferromagnet. For this reason we have considered a simplified magnetic impurity model, which is based on the local variation of the exchange constant [52]. In this work, micromagnetic simulations have been used to investigate the depinning mechanism of the TDW trapped at artificial magnetic defects. We have observed that the adjust of the pinning potential strength via local variation of the exchange constant can be useful to build traps, where the TDW remains weakly pinned. Consequently, it is possible to depin the wall by applying current pulses of small intensities and short duration. It is well known that notches are able to pin DW's, but their pinning potentials are too strong and it demands high-intensity current pulses to depin the DW's from such traps. In order to minimize the current density required to depin the wall at a notch, an external magnetic field had to be applied simultaneously [23]. In the absence of a magnetic field [20,21], it has been reported relatively high current density to induce DW depinning from a notch, being the typical threshold values of the order of  $10^{13}$  A/m<sup>2</sup>. In this work, we have found that it is possible to obtain DW depinning without the need of a magnetic field by adjusting the pinning potential of magnetic impurities and choosing a suitable current pulse simultaneously. Our typical threshold values for current density of the order of  $10^{12}$  A/m<sup>2</sup> and the pulse duration is a few nanoseconds. In addition, we have shown the position control of the TDW in a planar magnetic nanowire containing a linear distribution of equally-spaced magnetic impurities by using low-intensity and short-duration current pulses. Evidently, it is not needed to apply a high-intensity current pulse when the wall is weakly pinned at a trap. Although we have considered the DW trap size relatively small (which can be really challenge, it does not limit the validity of our results), we can cite a recent experimental work [49] which have already created such traps, whose areas are only one order of magnitude larger. It is important to mention that it is possible to increase the pinning potential strength by increasing the magnetic defect size [48,52]. From the technological point of view, it is crucial to know how to control the pinning potential strength of DW traps. Although it is possible to create traps in which the wall remains weakly pinned, thermal fluctuations at room temperature can affect efficiency of the trap. In this case, it can be necessary a fine tuning in the pinning potential strength to guarantee that the wall remains fixed at the trap.

646

E.L.M. Paixão et al./Journal of Magnetism and Magnetic Materials 451 (2018) 639–646

We believe that the idea of replacing notches with magnetic impurities is advantageous, because it can solve one fundamental issue for the realization of the spintronic devices in which the control of the DW's motion is required. When adopting this strategy, we can ensure not only lower energy consumption but also prevent the degradation of the magnetic track by the Joule heating.

#### Acknowledgments

The authors would like to thank CAPES, CNPq, FAPEMIG and FINEP (Brazilian Agencies) for the support. Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

#### Appendix A. Supplementary data

Supplementary data associated with this article can be found, in the online version, at <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.117>.

#### References

- [1] K. Yamada, S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, A. Thiaville, T. Ono, *Nat. Mater.* 6 (2007) 269–273.
- [2] D.A. Allwood, G. Xiong, C.C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, R.P. Cowburn, *Science* 309 (2005) 1688.
- [3] A. Fert, V. Cros, J. Sampaio, *Nat. Nanotechnol.* 8 (2013) 152.
- [4] C.C. Faulkner, D.A. Allwood, M.D. Cooke, G. Xiong, D. Atkinson, R.P. Cowburn, *IEEE Trans. Magn.* 39 (2003) 2860–2862.
- [5] D. Atkinson, D.A. Allwood, C.C. Faulkner, G. Xiong, M.D. Cooke, R.P. Cowburn, *IEEE Trans. Magn.* 39 (2003) 2663–2665.
- [6] M.-Y. Im, L. Bocklage, P. Fischer, G. Meier, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 147204.
- [7] M. Hayashi, L. Thomas, Ya.B. Bazaliy, C. Rettner, R. Moriya, X. Jiang, S.S.P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 197207.
- [8] M. Vázquez, G.A. Basheed, G. Infante, R.P.D. Real, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 037201.
- [9] R.D. McMichael, M.J. Donahue, *IEEE Trans. Magn.* 33 (1997) 4167–4169.
- [10] Y. Nakatani, A. Thiaville, J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* 290–291 (2005) 750–753.
- [11] L. Berger, *J. Appl. Phys.* 55 (1984) 1954–1956.
- [12] L. Berger, *J. Appl. Phys.* 63 (1988) 1663–1669.
- [13] J.C. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* 159 (1996) L1–L7.
- [14] L. Berger, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 9353–9358.
- [15] M. Kläui, C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, W. Wernsdorfer, G. Faini, E. Cambril, L.J. Heyderman, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003) 105–107.
- [16] S.S.P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas, *Science* 320 (2008) 190–194.
- [17] M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, S.S. Parkin, *Nat. Phys.* 3 (2007) 21–25.
- [18] L.K. Bogart, D.S. Eastwood, D. Atkinson, *J. Appl. Phys.* 104 (2008) 033904.
- [19] L. Thomas, M. Hayashi, X. Jiang, R. Moriya, C. Rettner, S.S.P. Parkin, *Nature* 443 (2006) 197–200.
- [20] S.H. Huang, C.H. Lai, *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009) 032505.
- [21] H.Y. Yuan, X.R. Wang, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 054419.
- [22] A. Yamaguchi, T. Ono, S. Nasu, K. Miyake, K. Mibu, T. Shinjo, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 077205.
- [23] L. Thomas, M. Hayashi, X. Jiang, R. Moriya, C. Rettner, S. Parkin, *Science* 315 (2007) 1553–1556.
- [24] D. Atkinson, D.S. Eastwood, L.K. Bogart, *Appl. Phys. Lett.* 92 (2008) 022510.
- [25] K. Nagai, Y. Cao, T. Tanaka, K. Matsuyama, *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 07D130.
- [26] O.A. Tretiakov, Y. Liu, Ar. Abanov, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 247201.
- [27] D. Petit, A.-V. Jausovec, D. Read, R.P. Cowburn, *J. Appl. Phys.* 103 (2008) 114307.
- [28] R.D. McMichael, J. Eicke, M.J. Donahue, D.G. Port, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 7058–7060.
- [29] M. Kläui, U. Ehrke, U. Rüdiger, T. Kasama, R.E. Dunin-Borkowski, D. Backes, L.J. Heyderman, C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Faini, E. Cambril, W. Wernsdorfer, *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005) 102509.
- [30] D. Djuhana, H.-G. Piao, S.-H. Lee, D.-H. Kim, S.-M. Ahn, S.-B. Choe, *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010) 022511.
- [31] M.C. Sekhar, S. Goolaup, I. Purnama, W.S. Lew, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 44 (2011) 235002.
- [32] S.J. Noh, Y. Miyamoto, M. Okuda, N. Hayashi, Y.K. Kim, *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 07D123.
- [33] C. Chappert, H. Bernas, J. Ferré, V. Kottler, J.-P. Jamet, Y. Chen, E. Cambril, T. Devolder, F. Rousseaux, V. Mathet, H. Launois, *Science* 280 (1998) 1919–1922.
- [34] J. Fassbender, J. McCord, *J. Magn. Magn. Mater.* 320 (2008) 579–596.
- [35] D. Ozkaya, L. R.M. Langford, W.L. Chan, A.K. Petford-Long, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 9937–9942.
- [36] S. Konings, J. Miguel, J. Goedkoop, J. Camarero, J. Vogel, *J. Appl. Phys.* 100 (2006) 033904.
- [37] D. McGrouther, J.N. Chapman, *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005) 022507.
- [38] L. Folks, R.E. Fontana, B.A. Gurney, J.R. Childress, S. Maat, J.A. Katine, J.E.E. Baglin, A.J. Kelloc, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 36 (2003) 2601–2604.
- [39] J. Fassbender, J. McCord, *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 252501.
- [40] J. McCord, I. Mönch, J. Fassbender, A. Gerber, E. Quandt, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42 (2009) 055006.
- [41] V. Dasgupta, N. Litombe, W.E. Bailey, *J. Appl. Phys.* 99 (2006) 08G312.
- [42] T.A. Moore, P. Möhrke, L. Heyne, A. Kaldun, M. Kläui, D. Backes, J. Rhenius, L.J. Heyderman, J.-U. Thiele, G. Woltersdorf, A.F. Rodríguez, F. Nolting, T.O. Mendes, M.Á. Niño, A. Locatelli, A. Potenza, H. Marchetto, S. Cavilli, S.S. Dhisi, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 094445.
- [43] J. Fassbender, J. von Borany, A. Mücklich, K. Potzger, W. Möller, J. McCord, L. Schultz, R. Mattheis, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 184410.
- [44] J. Fassbender, T. Strache, M.O. Liedke, D. Markó, S. Wintz, K. Lenz, A. Keller, S. Fasco, I. Mönch, J. McCord, *New J. Phys.* (2009) 125002.
- [45] A. Vogel, S. Wintz, J. Kimling, M. Bolte, T. Strache, M. Fritzsche, M.-Y. Im, P. Fischer, G. Meier, J. Fassbender, *IEEE Trans. Magn.* 46 (2010) 1708–1710.
- [46] A. Vogel, S. Wintz, T. Gerhardt, L. Bocklage, T. Strache, M.-Y. Im, P. Fischer, J. Fassbender, J. McCord, G. Meier, *Appl. Phys. Lett.* 98 (2011) 202501.
- [47] M.A. Basith, S. McVitie, D. McGrouther, J.N. Chapman, *Appl. Phys. Lett.* 100 (2012) 232402.
- [48] D.M. Burn, D. Atkinson, *J. Appl. Phys.* 116 (2014) 163901.
- [49] M.J. Benitez, M.A. Basith, R.J. Lamb, D. McGrouther, S. McFadzean, D.A. MacLaren, A. Hrabec, C.H. Marrows, S. McVitie, *Phys. Rev. Appl.* 3 (2015) 034008.
- [50] V.A. Ferreira, D. Toscano, S.A. Leonel, P.Z. Coura, R.A. Dias, F. Sato, *J. Appl. Phys.* 114 (2013) 013907.
- [51] D. Toscano, V.A. Ferreira, S.A. Leonel, P.Z. Coura, F. Sato, R.A. Dias, B.V. Costa, *J. Appl. Phys.* 115 (2014) 163906.
- [52] D. Toscano, S.A. Leonel, P.Z. Coura, F. Sato, B.V. Costa, M. Vázquez, *J. Magn. Magn. Mater.* 419 (2016) 37–42.
- [53] S. Zhang, Z. Li, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 127204.
- [54] G.S.D. Beach, M. Tsoi, J.L. Erskine, *J. Magn. Magn. Mater.* 320 (2008) 1272–1281.
- [55] V. Vlaminck, M. Bailleul, *Science* 322 (2008) 410–413.
- [56] G. Tatara, H. Kohno, J. Shibata, *Phys. Rep.* 468 (2008) 213–301.
- [57] See the supplementary material: videos show the control of the magnetic domain wall position using an arrangement of magnetic impurities along the nanowire acting as pinning sites. In the video M1, we have used  $f/J = 0.7$  and current density  $j_c = 1.8 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>. We have applied three unipolar current pulses, duration 1 ns each, along the negative x-axis, separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns, which is the necessary time for the TDW to reach a new equilibrium position. In the video M2, we have used  $f/J = 0.7$  and current density  $j_c = 1.8 \times 10^{12}$  A/m<sup>2</sup>. We have applied two unipolar current pulse along the negative x-axis and one unipolar current pulse along the positive x-axis, duration 1 ns each. The current pulses are separated by an interval of  $\Delta T = 4.68$  ns, which is the necessary time for the TDW to reach a new equilibrium position.
- [58] V. Tsiantos, W. Scholz, D. Suess, T. Schrefl, J. Fidler, *J. Magn. Magn. Mater.* 242–245 (2002) 999–1001.
- [59] See the supplementary material: videos show that thermal fluctuations for temperatures smaller than the Curie temperature ( $T < T_c$ ) are not strong enough to depin the TDW from such magnetic defects. In the videos L1 and L2 we have used  $T = 300$  K and  $T = 600$  K, respectively. In these simulations, the pinning potential strength of DW traps was the same  $f/J = 0.7$ .

## 8 Perspectivas Futuras e Conclusões

Vamos discutir brevemente alguns resultados adicionais em que foram aplicados a metodologia desenvolvida nessa tese e que, ou serão expandidos em trabalhos futuros, ou ainda carecem de uma publicação revisada. Também iremos apresentar uma conclusão do que foi desenvolvido e dos resultados obtidos.

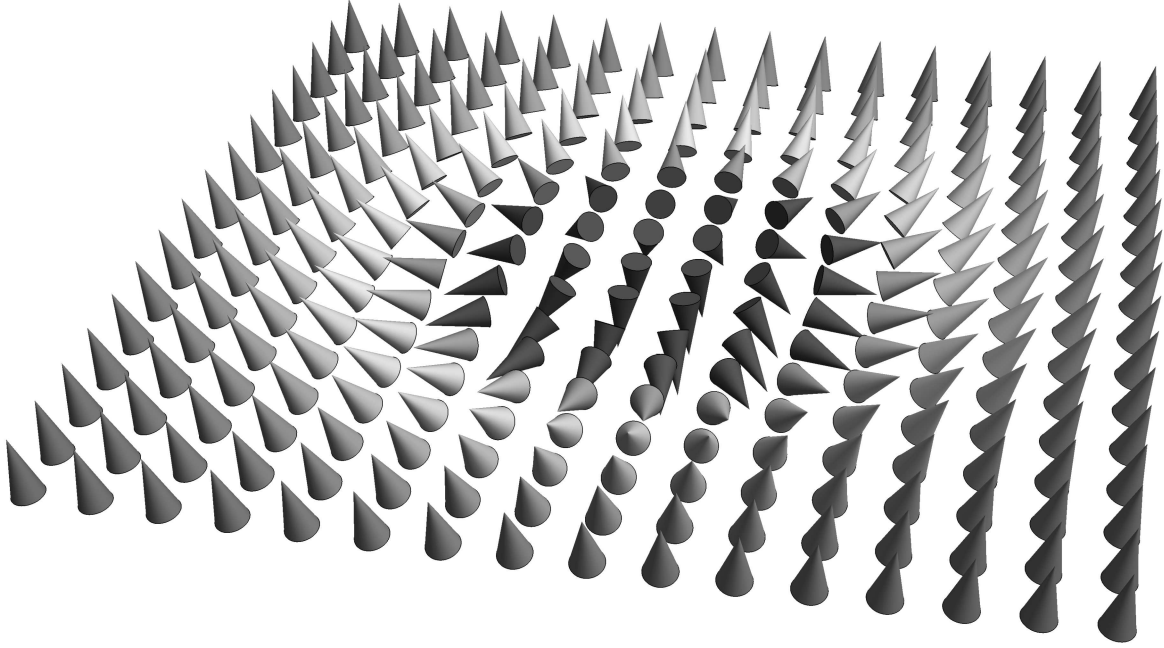
### 8.1 Análise Dinâmica de Cargas Topológicas

Vimos no decorrer do texto que quasipartículas com  $Q \in \mathbb{Z}$  (eq. 3.1) possuem uma interessante propriedade de estabilidade topológica, que pode ser aproveitada em aplicações diversas como dispositivos em spintrônica. Um exemplo de quasipartícula que emerge em sistemas magnéticos são *skyrmions*,<sup>9</sup> que são definidos exatamente como cargas  $Q$  bem localizadas em regiões de transição de momentos magnéticos em um ângulo de  $\pi$  como na fig. 35. Note que várias quiralidades e sentidos de rotação no plano diferentes resultam em uma mesma carga, com a propriedade geométrica definitiva sendo a presença de algum plano de inversão onde a simetria  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  é quebrada.

Essas excitações topológicas são observadas experimentalmente e também previstas com modelos contínuos, e surgem em sistemas magnéticos através de dois mecanismos. Primeiramente, temos sistemas que apresentam o chamado efeito magnético quiral (CME), representado pela geração de uma corrente no volume de um material de magnetização  $\mathbf{M}$ , que flui através das linhas de um Campo magnético externo aplicado ao material.<sup>99</sup> Essa corrente em si possui estabilidade topológica pois é gerada por uma anomalia quiral do material, sendo um efeito volumétrico. As transferências de momento resultantes desse efeito são capazes de gerar estados de redes triangulares de skyrmions com carga topológica  $Q = n$ , onde  $n$  é o número total de skyrmions.<sup>110</sup>

Em segundo lugar, skyrmions individuais podem ser criados em superfícies de sistemas através do acoplamento de Dzyaloshinskii-Moriya induzido como na eq. 2.44, sendo a eq. 2.45 um modelo apropriado para o caso volumétrico com CME. A interação de troca indireta e antissimétrica pode ser induzida em um ferromagneto (geralmente com anisotropia magnetocristalina  $K_1$  elevada) através de uma camada mediadora de metal com acoplamento spin órbita intenso, como é o caso de sistemas de CoPt dispostos em camadas finas.

Figura 35 – Skyrmion formado pela quebra da simetria de inversão em um Campo magnetização.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Diversas quiralidades e sentidos de rotação diferentes do caso mostrado resultam na mesma carga topológica  $Q = 1$ , que é estável por ser inteira.

Várias descrições são possíveis para os skyrmions, sendo esses estados resultados específicos da eq. de Euler para a energia da eq. 2.46 com os termos de anisotropia, troca, desmagnetização e DM. Assim como em vórtices de carga topológica fracionada, podemos propor um ansatz da forma  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{m}_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))$ , com o centro da quebra de simetria de inversão  $\mathbf{R}$  definido como centro do skyrmion. Isso leva a uma equação de Thiele com a presença de termos adicionais para a anisotropia e a interação DM. No caso de uma energia DM induzida em superfícies através de uma troca antissimétrica, podemos propor o seguinte ansatz:<sup>111</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_0 &= \sin\left(\frac{\pi}{2}\phi + \delta\right)\hat{z} + \cos\left(\frac{\pi}{2}\phi + \delta\right)\hat{\theta} \\ \phi(r) &= \frac{1 - \left(\frac{r}{R_S}\right)^{2/(1-s)}}{1 + \left(\frac{r}{R_S}\right)^{2/(1-s)}} \end{aligned} \quad (8.1)$$

Em que usamos coordenadas cilíndricas. Na eq. 8.1  $s \in [0; 1)$  é um parâmetro adimensional associado à intensidade das interações no material e  $R_S \in (0; \infty]$  é o raio do skyrmion, definido nesse caso como a distância entre o centro de cargas e a curva na



superfície do material onde  $\mathbf{m}_0^z = 0$  (constante para o modelo de Thiele).  $\delta$  é um ângulo de fase que pode ser considerado nulo para configurações como na fig. 35.

Com esse modelo a dinâmica de um sistema possuindo um skyrmion é completamente definida ao determinarmos a trajetória do skyrmion e seus graus internos, dados por  $\mathbf{R}(t) = x_S(t)\hat{x} + y_S(t)\hat{y}$ ,  $R_S(t)$  e  $s(t)$ . Como  $R_S$  e  $s$  fazem parte de um ansatz para um sistema estacionário, devemos assumir que algum desvio pode ser observado em casos fora do equilíbrio.

A princípio, podemos determinar a posição do skyrmion tratando a densidade de cargas  $n = \|G\|$  no sentido de distribuições e obtendo a posição de seu primeiro momento, que possui coordenadas:<sup>112</sup>

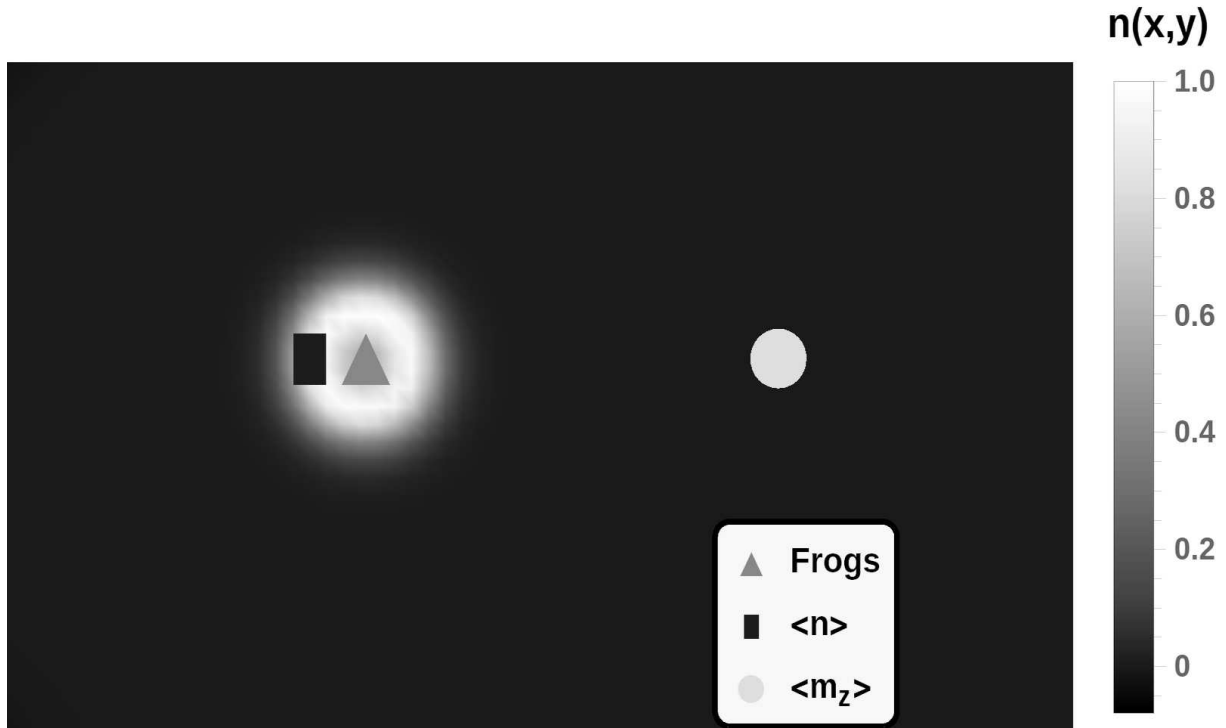
$$x_{\langle n \rangle} = \frac{\int x n dV}{\int n dV}; \quad y_{\langle n \rangle} = \frac{\int y n dV}{\int n dV}. \quad (8.2)$$

No entanto, há algumas limitações com essa abordagem, que é a mais utilizada. Primeiramente, o primeiro momento  $\langle n \rangle$  da densidade de cargas topológicas fornece apenas a posição da média da distribuição, não fornecendo nenhuma outra informação sobre seu formato ou localização real de picos. Dessa maneira a eq. 8.2 é incapaz de, por exemplo, descrever a posição detalhada de redes com 2 ou mais skyrmions. Além disso, a abordagem acima não fornece detalhes sobre a presença de cargas topológicas transientes devido à bordas do material e nem permite inferir sobre os graus de liberdade internos de maneira quantitativa, como o raio do skyrmion ou a intensidade do acoplamento  $s$ .

Para melhorar a análise de casos mais complexos e os detalhes sobre os graus internos da dinâmica de skyrmions foi desenvolvido um algoritmo de otimização bioinspirado baseado na otimização por enxame de partículas (PSO).<sup>113,114</sup> Uma otimização desse tipo consiste em considerar uma partícula virtual no espaço de configurações do problema (no caso, o espaço dos momentos magnéticos  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$ ) com posição dada em função das variáveis de interesse. Para sistemas com skyrmions a posição de uma partícula pode ser dada por  $\mathbf{x}^f(t) = (x_t^{1,f}, x_t^{2,f}, x_t^{3,f}, x_t^{4,f})$ , com  $x^1 := x_S$ ,  $x^2 := y_S$ ,  $x^3 := R_S$  e  $x^4 := s$ . Definindo um número  $N$  de partículas dessa maneira, vasculhamos o espaço de configuração através de passos  $x_{t+1}^{i,f} = x_t^{i,f} + v_t^{i,f}$ , com um tempo adimensional ( $\Delta t = 1$ ) que não tem correlação nenhuma com o parâmetro contínuo  $t$  da eq. LLG.

A determinação dos  $v_t^{i,f}$  dependem do critério de otimização escolhido e do tipo de estado que buscamos. Definido isso, a trajetória das partículas virtuais deve convergir em uma configuração  $\mathbf{x}^f$  que mais se assemelha com o estado procurado. Com base nessa abordagem, foi desenvolvido um trabalho baseado em partículas identificadas como “sapos” devido ao fato de que as partículas virtuais possuem termos cruzados que fornecem

Figura 36 – Localização do skyrmion segundo os primeiros momentos de  $\langle n \rangle$ ,  $\langle m_z \rangle$  e otimização via sapos, em uma nanofita finita de  $2\mu m$  de largura.



Fonte: Elaborada pelo autor.

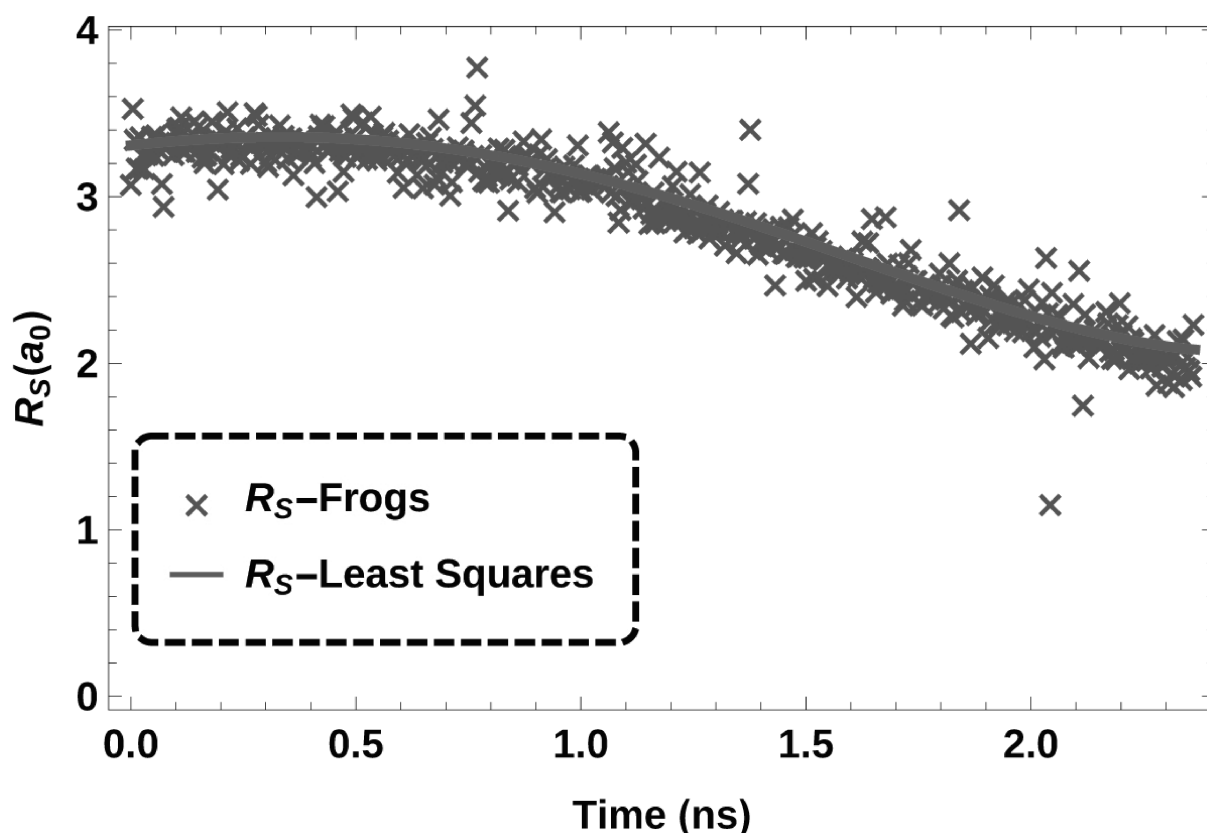
Nota: Observe que apenas os sapos coincidem sua posição prevista com o centro do skyrmion em si.

informação sobre o estado global da otimização. Um preprint do trabalho está disponível,<sup>115</sup> cuja contribuição do autor dessa tese foi nas simulações micromagnéticas em fitas de CoPt e na análise e justificativa dos resultados encontrados.

O método permite localizar a posição do skyrmion com alta precisão em sistemas com tamanho reduzido. Nesses casos, a presença de correntes elétricas ou Campos externos usados em aplicações deforma o skyrmion alterando também seus graus de liberdade internos. Também há uma interação entre a carga topológica do skyrmion e as bordas, o que dificulta o uso da eq. 8.2, uma vez que a posição da média deixa de coincidir com o centro do próprio skyrmion, como podemos ver na fig. 36.

Na figura, além do local da média  $\langle n \rangle$ , também fornecemos o valor da média da componente z dos momentos  $\langle m_z \rangle$ , que apesar de também ser utilizada para esse fim, mostramos ser ainda menos adequada para localizar a posição do skyrmion, coincidindo

Figura 37 – Raio do skyrmion em função do tempo durante aplicação de uma densidade de corrente.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: A linha sólida representa um ajuste de mínimos quadrados em torno das posições previstas pelas partículas  $\mathbf{x}^f$ , que estão todas sobrepostas com  $N = 10$  e um número de  $t = 50$  passos de busca pelo espaço de configurações em cada instante de tempo da simulação.

apenas em  $(x, y) = (0, 0)$ . Além disso, o método também é capaz de prever a configuração detalhada do raio do skyrmion. Este, assumido constante no ansatz 8.1, na verdade é alterado sob efeito de uma corrente e sua subsequente colisão com as bordas do material (via o chamado efeito Hall de skyrmion). Ele tende a encolher durante a dinâmica como mostrado na fig. 37. Com esse método, no futuro poderemos obter detalhes sobre os graus de liberdade de sistemas mais complexos de maneira automatizada, como pares de skyrmions ou skyrmions que se deformam durante sua dinâmica.

## 8.2 Reversão de Polaridade em Vórtices de Nanodiscos Modificados

Com as estruturas geometricamente modificadas das torres de Hanoi do capítulo 6 e da publicação lá anexada, um outro trabalho futuro é o de analisar processos de

inversão da polaridade de vórtices com seu tamanho total reduzido pela anisotropia da nova geometria.

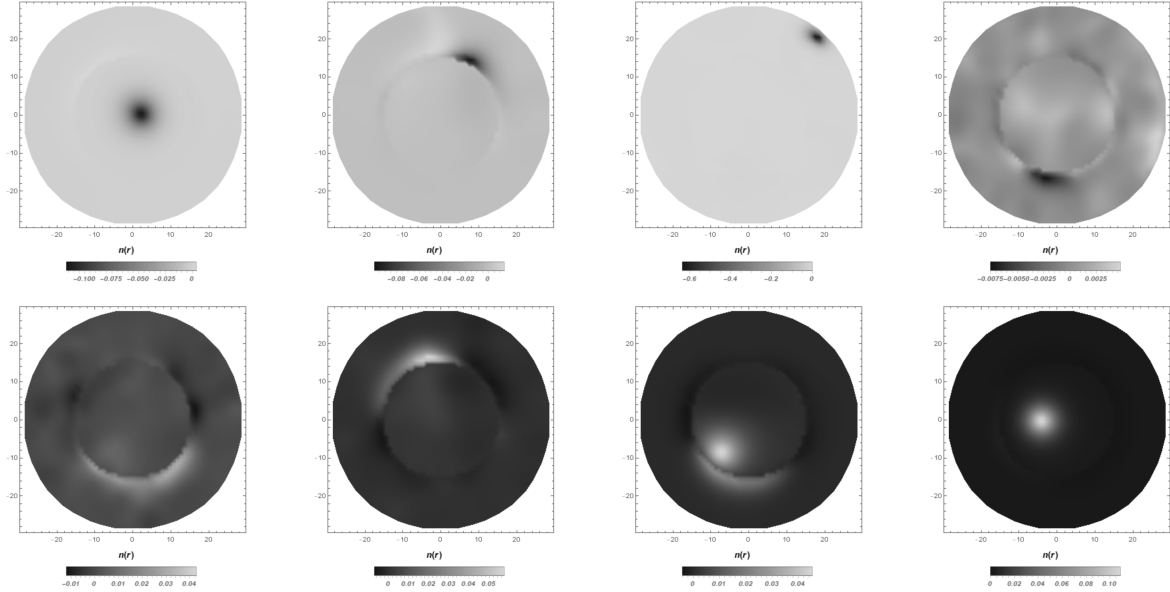
A troca de polaridade filmes finos acontece por uma transformação descontínua na carga topológica  $Q$  do sistema, após a geração de um par vórtice-antivórtice e a aniquilação do vórtice original com o antivórtice formado. Esse mecanismo pode ser ativado através de um Campo externo no plano perpendicular à direção da polaridade do vórtice. Nessa direção, o Campo externo favorece a excitação do modo girotrópico, causando uma oscilação no vórtice. Num regime de energias da faixa de  $E_{BP}$  (eq. 3.3), oscilações não-lineares no sistema irão criar uma partícula virtual que irá rapidamente decair em um par vórtice-antivórtice causando o processo descontínuo de alteração da carga  $Q$ . Em nanodiscos é um resultado conhecido que a energia de formação e aniquilação de vórtices é proporcional à intensidade da energia de troca,  $E_{BP} \sim 8\pi Ah$  para uma espessura  $h$  da amostra sendo considerada.<sup>56</sup>

Em qualquer condição de contorno considerada, essas interações entre quasipartículas deverão gerar ondas de spin que se propagam até as bordas do material, dissipando a energia de formação das mesmas. Além disso, caso uma carga  $Q$  não possua uma correspondente de sinal oposto para serem aniquiladas, a outra forma energeticamente favorável de se alterar o grau total do mapa  $\mathbf{m}$  no sistema, é através das bordas do material onde uma transformação descontínua é efetuada, como uma carga definida pela eq. 3.3 movida em uma superfície Gaussiana. Da mesma maneira, a formação de uma quasipartícula com carga  $Q \neq 0$  é modelada através da criação de uma quasipartícula com  $Q = 0$  que então decai em duas com cargas opostas  $Q = \pm 1$  (o que conserva a carga total), e uma consequente aniquilação - agora descontínua - de uma destas.

No entanto, realizando dinâmicas preliminares da inversão da polaridade de vórtices em nanodiscos do tipo torre de Hanoi, identificamos um mecanismo alternativo de inversão da polaridade. Ao invés da usual criação de uma partícula virtual que decai em duas cargas opostas, seguido de um estado final de vórtice com polaridade contrária à original, a presença de discos de diâmetro menor anexados na estrutura induz uma formação mais dispersa e estável de densidades de cargas topológicas no sistema.

Vamos explicitar esse mecanismo com um exemplo. Simulamos o caso de um nanodisco com diâmetro  $D = 70nm$  e espessura  $H = 5nm$ , com dois discos menores anexados acima e abaixo de maneira que possuam o mesmo eixo de rotação  $z$ . Os discos menores possuem, cada um, diâmetro  $d = 20nm$  e espessura  $h = 10nm$ . Para realizar a dinâmica de inversão da polaridade dessa estrutura, iniciamos com uma condição inicial de um vórtice com polaridade no sentido negativo do eixo fora do plano dos discos (com quiralidade anti-horária, sem perda de generalidade). Um pulso de Campo externo aplicado

Figura 38 – Evolução dinâmica da inversão da polaridade em um nanodisco torre de Hanoi.



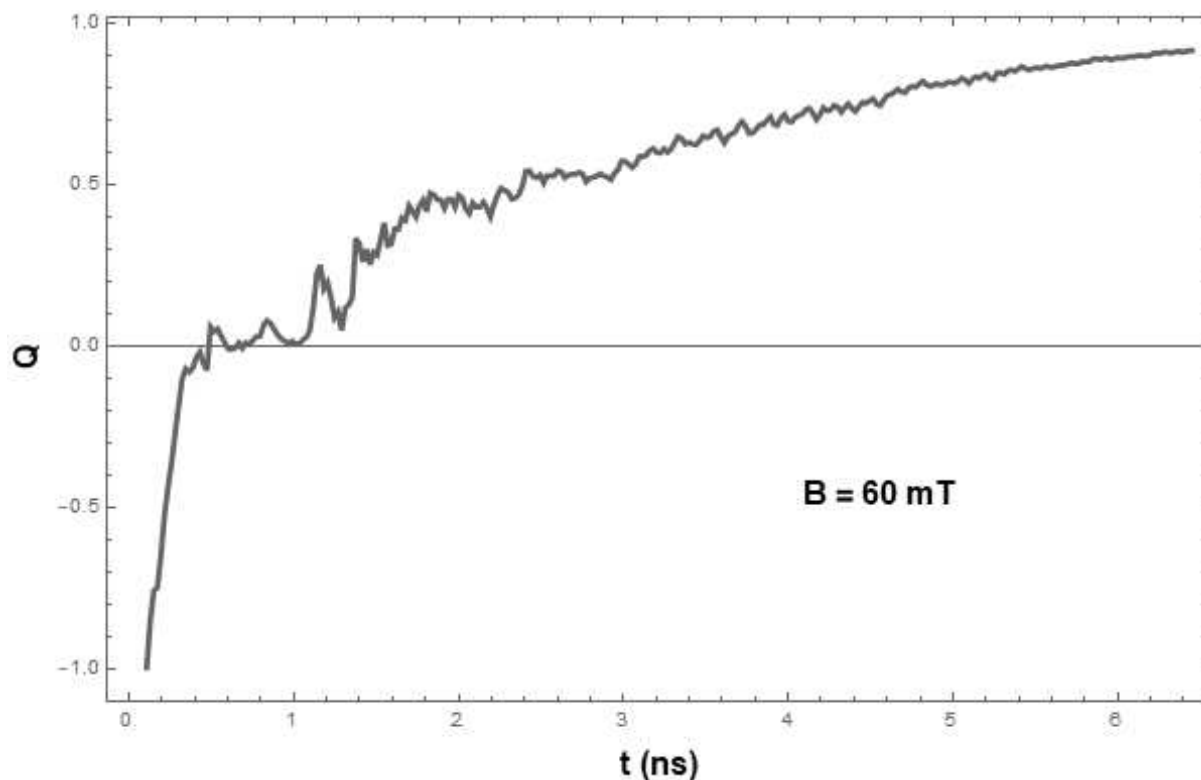
Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: A figura é mostrada a partir de  $n(\mathbf{r})$ , com um pulso de Campo externo na direção do eixo-x positivo de valor  $\mathbf{B}_{zee} = (60, 0, 0)mT$  ligado durante 1 ns. Da esquerda à direita, aniquilação do vórtice original ( $n = 1, p = -1, Q = -1/2$ ) nas bordas, com concentração de densidades de carga na interface entre discos (quadros acima), e o consequente surgimento de um vórtice com polaridade inversa ( $n = 1, p = 1, Q = 1/2$ ) que adentra para a região central da estrutura em um movimento girotrópico (quadros abaixo). Perspectiva do plano da quiralidade dos vórtices.

com período único de  $10^{-9}s$  e intensidade uniforme de  $B_{zee} = 60mT$  na direção do eixo-x positivo é mais que o suficiente para causar o efeito de reversão da polaridade nesse sistema. Usamos o integrador do ponto médio esférico das eqs. 5.35 e 5.34, com os parâmetros típicos do Py de  $\mu_0 M_s = 1.005T$  e  $A = 1.3 \times 10^{-11} J/m$ . Uma rede discretizada de células com volume  $a_0^3 = 2.5 \times 2.5 \times 2.5nm^3$  foi gerada, com o sistema possuindo apenas os termos de Campos Zeeman, magnetostático e de troca, sendo assim dominado pela anisotropia de forma e com domínios definidos pelo comprimento de troca  $\lambda_{ex} \approx 5.2nm$ . Um passo temporal de  $\Delta t = 43$  fs foi usado na integração numérica.

Na fig. 38 temos o estado da densidade de cargas topológicas para várias etapas da dinâmica, desde a precessão e aniquilação do vórtice original com polaridade  $p = -1$  até o surgimento do vórtice com  $p = 1$  e sua precessão lenta até o centro do nanodisco. Na fileira superior da figura, note a movimentação do vórtice até a borda e sua consequente eliminação. Em vórtices de nanodiscos regulares, durante esse movimento já seria gerada uma concentração virtual que se decomporia em um par vórtice-antivórtice.<sup>56</sup> Com a presença da estrutura do tipo torre de Hanoi porém, o vórtice rapidamente se desloca até a parede “interna” entre discos onde a espessura tem uma diminuição brusca, redistribuindo

Figura 39 – Dinâmica da carga topológica definida pela eq. 3.1.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: Observe que a inversão se dá num período da ordem do ns com uma precessão mais longa de equilíbrio do vórtice resultante com polaridade inversa. Note que a mudança no sinal da carga não necessariamente representa uma troca de polaridade, coincidindo nesse caso em particular apenas pois  $Q = np/2$  com  $n = 1$  em ambas as etapas  $Q = 1$  e  $Q = -1$  da simulação.

a densidade topológica  $n(\mathbf{r})$  mas recuperando seu caráter de vórtice ao longo do resto da trajetória. Eventualmente, o vórtice reduz seu tamanho até ser anulado pelo contato com as bordas externas do nanodisco de maior diâmetro, gerando ondas de spin que se propagam no material com uma carga topológica transiente e próxima de zero.

Diferentemente do caso de um nanodisco usual, onde nessa fase já haveria a presença bem definida do vórtice com  $p = 1$  após a aniquilação do par vórtice-antivórtice, as ondas de spin se concentram nas paredes internas onde ocorre a mudança de espessura, e em um movimento gradual de precessão concentram uma densidade  $n$  que eventualmente forma um vórtice com polaridade inversa da inicial, que então se acopla à região com espessura maior e precessiona em torno do centro da estrutura até repousar na posição de equilíbrio global. Essa dinâmica é consistente com o caso próximo à origem do modelo de energia polinomial da eq. 6.10, com a quasipartícula formada próxima aos pontos críticos de instabilidade sendo deslocada de volta à origem, no mínimo geral do sistema.

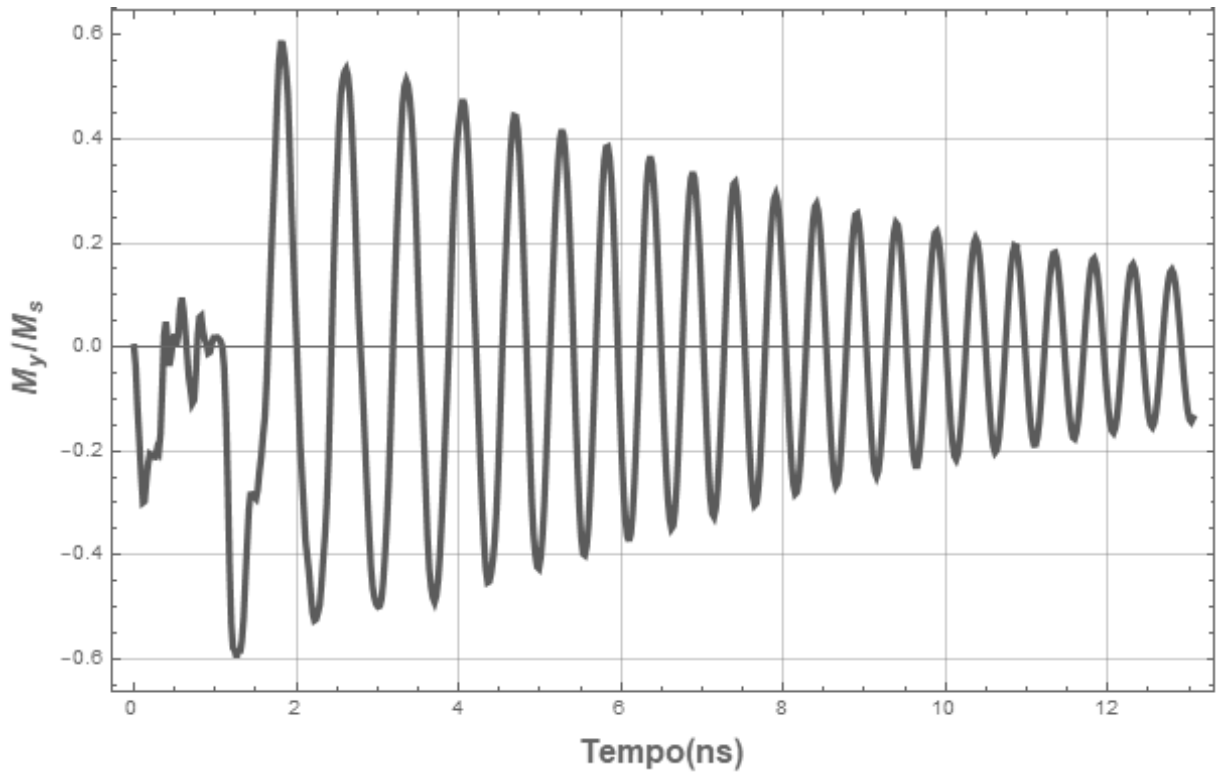
A formação da carga topológica é então dada pela interação entre as bordas internas (no plano) do sistema, onde ocorre a mudança de espessura, com as ondas de spin provenientes da aniquilação do vórtice original na borda do disco maior. Podemos analisar a evolução temporal da carga  $Q$  em função do tempo  $t$  decorrido no sistema a partir do gráfico da fig. 39. Num período da ordem do ns - mesma ordem de grandeza típica de trocas de *bits* em memórias magnéticas,<sup>116</sup> a carga topológica  $Q$  é anulada e subsequentemente vai até 1 com o surgimento de um novo vórtice nas bordas entre espessuras da estrutura. Após a dispersão das ondas de spin transientes, a concentração de cargas se inicia na marca de  $t \approx 1$  ns, com uma flutuação rápida de carga se estabilizando na borda dos discos menores. Esse momento está representado pela parte inferior esquerda da fig. 38 mostrando a densidade de carga em todo o sistema na oscilação rápida com pico em  $t \approx 1.2$  ns.

É importante ressaltar que o modelo micromagnético não é capaz de descrever a transição exata (e descontínua) entre os estados com polaridades opostas do vórtice. Durante a dinâmica, a energia fornecida pelo Campo externo que causa o evento de inversão da polaridade é dissipada em escalas de tempo e espaço menores do que  $\Delta t$  e  $a_0$  respectivamente, tornando a duração da formação do vórtice em si uma função do tamanho dos intervalos de diferenças finitas que escolhemos para a simulação. No entanto, as escalas nos regimes próximos à  $Q = 1$  e  $Q = -1$  representam pontos no espaço de fase suficientemente próximos ao equilíbrio para que seja válida a hipótese micromagnética da eq. 2.19, de maneira que apenas ambos os regimes da magnetização  $\mathbf{m}$  são bem descritos quantitativamente.

De toda forma, o modelo micromagnético reproduz qualitativamente a transformação, inclusive indicando o mecanismo de geração do vórtice com polaridade oposta através das bordas dos discos menores. De fato, a energia medida na simulação e fornecida pelo Campo externo,  $E_{Zee}$ , durante a geração das ondas de spin na faixa  $t = 1$  ns é proporcional à energia de formação de pontos de Bloch em nanodiscos  $\Delta E = E_{BP} \approx 8\pi Ah$ . Temos que  $E_{Zee} = 0.02 \times 10^{-21} J$  e  $\Delta E = 0.008 \times 10^{-21} J$ . A discrepância observada entre os dois valores, a princípio, poderia ser explicada pelo fato de que a condição de contorno modificada pode implicar em um novo valor para a energia de formação de pontos de Bloch (o que é reforçado pelo mecanismo de geração ser diferente do usual). Outro fato é o de que o Campo externo aplicado pode ser maior do que o mínimo necessário para estimular ondas de spin com energia para aniquilar o vórtice original e gerar um com polaridade oposta.

Finalmente, podemos observar a validade da transição simulada também na convergência ao equilíbrio, com a precessão do vórtice de polaridade oposta à inicial retornando ao centro do disco através de um modo girotrópico amortecido. Na fig. 40 podemos observar uma medida da oscilação do núcleo do vórtice em torno do centro do material - o que é

Figura 40 – Modo girotrópico do vórtice chegando ao estado de equilíbrio no interior da estrutura de torre de Hanoi.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nota: A formação do vórtice através da inversão da polaridade é dada no início da dinâmica, e os demais comprimentos de onda representam a oscilação do núcleo do vórtice em torno do centro do disco. A posição  $(x, y)$  e as magnetizações  $(M_x, M_y)$  coincidem em escala nesse caso pois no centro da estrutura temos  $M_x = M_y = 0$ , de maneira que um deslocamento nos valores esperados da magnetização representa uma porcentagem de deslocamento do vórtice no plano.

possível com o valor esperado da magnetização  $M_y$  (com um resultado análogo para a componente x). A posição  $(x, y)$  do núcleo vórtice pode ser identificada de forma escalonada pelo par  $(M_x, M_y)$  devido ao caráter rotacional do vórtice no plano do nanodisco. No centro, temos que  $M_x = M_y = 0$ , com desvios na posição causando consequentemente um desvio no valor esperado da magnetização em alguma direção do plano. A componente  $M_z$  por sua vez depende da região onde está localizado o núcleo do vórtice sendo alterada apenas na região de transição entre espessuras (o que também altera de forma significativa a carga topológica).

Com o modo girotrópico ocorrendo exclusivamente na região de maior espessura da estrutura, esse movimento pode ser tratado como um modo normal regular de um disco com a espessura somada  $h$  de todo o empilhamento. Com essa hipótese, podemos medir a frequência dessa vibração fundamental com uma transformada de Fourier do gráfico da



fig. 40, chegando a um valor de frequência (um único pico) de  $\nu \approx 2.5$  GHz. Esse valor é compatível com os resultados experimentais assim como simulações para nanodiscos nessa faixa de diâmetro e espessura.<sup>33</sup>

Para fins de aplicação tecnológica, essa precessão estável em escalas de tempo apreciáveis, combinada com a proteção topológica adicional das bordas externas do disco e o tamanho total reduzido das estruturas, pode ser aproveitada em dispositivos que utilizam osciladores. Em aplicações como Junções de Tunelamento Magnético (MTJ), usados em spintrônica,<sup>116</sup> é desejável que o amortecimento durante a inversão da polaridade do disco aconteça de forma mais acelerada.

Isso pode ser feito com um Campo externo senoidal ou ainda com uma corrente alternada através do efeito de torque de spin-transferência (apêndice B), de maneira que a polaridade seja invertida ao mesmo tempo em que o modo girotrópico seguinte seja suprimido, favorecendo o termo de amortecimento da equação LLG. Para que tais aplicações sejam concretizadas, uma perspectiva futura é analisar com diagramas de fase os valores de Campo externo e correntes elétricas mínimos para a ocorrência de uma troca de polaridade, em função dos tamanhos relativos dos nanodiscos do empilhamento, e também em função do material que compõe a geometria da estrutura, otimizando os tempos de inversão de acordo com a necessidade em questão. Além disso, esse trabalho também aponta uma direção de pesquisa onde podemos alterar a geometria, a topologia e a simetria de materiais, gerando padrões e dinâmicas de magnetização mais interessantes para diversos tipos de aplicação, potencialmente miniaturizando dispositivos conhecidos ou até mesmo gerando aplicações diferenciadas para estados de magnetização com proteção topológica assistida pela geometria.

## Conclusões

Nessa tese de doutorado buscamos uma abordagem dupla. Em primeiro lugar, partimos da teoria micromagnética que descreve através de uma teoria de Campos clássicos as interações fundamentais que regem a dinâmica de momentos magnéticos em um material. Desenvolvemos uma metodologia numérica original para o tratamento dos sistemas complexos típicos que são pertinentes ao micromagnetismo. Analisamos seus limites e capacidades de reproduzir a física de sistemas magnéticos, sua performance e particularidades com respeito a alguns outros métodos usados previamente na literatura, possíveis extensões para descrições de termos adicionais não considerados aqui, e também testamos a metodologia em um problema bem definido expondo suas vantagens em potencial nessa e em outras situações. Em conclusão, a metodologia (combinando a Hamiltoniana micromagnética com o método do ponto médio esférico modificado para a eq. LLG) descreve de maneira adequada toda a diversidade de sistemas mostrados aqui, com o potencial de descrever também sistemas além daqueles tipicamente tratáveis com os métodos mais comumente usados, particularmente quando desejamos simulações em escalas de tempo mais longas e com fenômenos mais abruptos como transformações de cargas topológicas. Até a escrita deste texto e nosso conhecimento, o método do ponto médio esférico aplicado aqui para o modelo micromagnético é um dos primeiros algoritmos simpléticos para o espaço de fase da equação LLG que foi implementado, e o mais simples por ser desenvolvido de maneira similar aos integradores de Verlet e o método do ponto médio clássico para espaços com Hamiltonianas canônicas.

Em segundo lugar, aplicamos diretamente a metodologia que desenvolvemos, em duas situações particulares que resultaram em publicações originais, de interesse tecnológico e também fundamental. Por um lado, o desenvolvimento do método inteiramente em placas GPU possibilitou uma maior abrangência de número de simulações e ordens de grandeza de coleta de dados para obtermos informações diversas como diagramas de fase e dinâmicas de modo vibracional em longos tempos, por exemplo. Por outro lado, também mostramos que o método é mais adequado para lidar com problemas onde é necessário e plausível introduzir uma descrição dos ruídos térmicos inerentes ao sistema e que afetam a topologia do mesmo. Outras possibilidades como descrever geometrias complicadas e interações em sistemas com mais de um centro de carga topológica também se apresentam no futuro.

## REFERÊNCIAS

- 1 SPINTRONICS-INFO. <<http://www.spintronics-info.com/>>. Acessa por último em: 30-01-2016.
- 2 TATAROV, I. et al. *Comp. Med.*, v. 61, p. 339–345, 2011.
- 3 HILBERT, M.; LÓPEZ, P. The world’s technological capacity to store, communicate, and compute information. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 332, n. 6025, p. 60–65, 2011. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/332/6025/60>>.
- 4 IBM history: the first Hard Drive. <<http://www.research.ibm.com/research/gmr/history.htm>>. Acessado por último em: 30-01-2016.
- 5 Wang, P. et al. Perpendicular stt-mram for high speed non-volatile embedded memory application. In: *2015 IEEE International Magnetics Conference (INTERMAG)*. [S.l.: s.n.], 2015. p. 1–1.
- 6 MELCHER, C.; PTASHNYK, M. Landau–Lifshitz–Slonczewski equations: Global weak and classical solutions. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, v. 45, 01 2013.
- 7 COWBURN, R. P.; KOLTSOV, D. K.; TRICKER, M. D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 83, p. 5, 1999.
- 8 SHINJO, T.; OKUNO, T.; HASSDORF, R. *Science*, v. 289, p. 390, 2000.
- 9 SKYRME, T. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, Elsevier BV, v. 31, p. 556–569, mar 1962. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0029-5582\(62\)90775-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(62)90775-7)>.
- 10 JENA, J. et al. Elliptical bloch skyrmion chiral twins in an antiskyrmion system. *Nature Communications*, v. 11, n. 1, p. 1115, Feb 2020. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41467-020-14925-6>>.
- 11 HJORTH-JENSEN, M. *Computational Physics*. [S.l.]: University of Oslo, 2003.
- 12 FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. 1*. [S.l.]: Addison-Wesley, 1963.
- 13 BALLENTINE, L. E. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. Singapura: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000.
- 14 MESSIAH, A. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: North Holland, 1962.
- 15 MACHADO, K. D. *Teoria do Eletromagnetismo*. Ponta Grossa, Paraná, Brasil: Editora UEPG, 2002.
- 16 SIMON, M.; GEIM, A. *J. Applied Physics*, v. 87, p. 6200, 2000.

- 17 EISBERG, R. M. *Quantum Physics: Of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. [S.l.]: Wiley, 2006.
- 18 COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics, Volume 2*. [S.l.]: Wiley, 1991.
- 19 S.B.CRAMPTON; KLEPPNER, D.; N.F.RAMSEY. *Phys. Rev. Lett.*, v. 11, p. 338, 1963.
- 20 SCHECK, F. *Quantum Physics*. [S.l.]: Springer, 2007.
- 21 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.: s.n.], 1994.
- 22 LANDEROS, P.; ARIAS, R.; MILLS, D. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 214405, 2008.
- 23 KAMBERSKY, V. *Czech. J. Phys. B*, v. 26, p. 1366, 1976.
- 24 KAMBERSKY, V. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 134416, 2007.
- 25 NAKABAYASHI, N. et al. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 014403, 2010.
- 26 COSTA, A. T. et al. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 014428, 2010.
- 27 SANTOS, D. L. R. et al. *Phys. Rev. B*, v. 88, p. 054423, 2013.
- 28 HE, P. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 110, p. 077203, 2013.
- 29 URBAN, R.; WOLTERS DORF, G.; HEINRICH, B. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, p. 217204, 2001.
- 30 GERRITS, T.; SCHNEIDER, M. L.; SILVA, T. *J. App. Phys.*, v. 99, p. 023901, 2006.
- 31 MIZUKAMI, S. et al. *App. Phys. Lett.*, v. 96, p. 152502, 2010.
- 32 BOONE, C. T. et al. *J. App. Phys.*, v. 113, p. 153906, 2013.
- 33 TOSCANO, D.; LEONEL, S. *J. App. Phys.*, v. 109, p. 014301, 2011.
- 34 MCCONNELL, J. J. *Analysis of Algorithms*. Sudbury: Jones and Barlett Publishers, 2007.
- 35 JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. [S.l.]: Wiley, 1999.
- 36 NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2009.
- 37 BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2003.
- 38 DIRAC, P. A. M. *Proc. of the Royal Soc. of London, Series A*, v. 112 reissued 762, p. 661–677, 1926.
- 39 WEISS, P. *J. de Phys.*, v. 6, p. 661–690, 1907.
- 40 SCHWABL, F. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2006.
- 41 BROWN, W. F. J. *Magnetoelastic Interactions*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1966.

- 42 BROWN, W. F. J. *Micromagnetics*. [S.l.]: Interscience Publishers, 1963.
- 43 MA, L.; LI, X.; LIU, C. From generalized langevin equations to brownian dynamics and embedded brownian dynamics. *The Journal of Chemical Physics*, v. 145, n. 11, p. 114102, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4962419>>.
- 44 PARKIN, S. S. P.; HAYASHI, M.; THOMAS, L. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 320, n. 5873, p. 190–194, 2008. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/320/5873/190>>.
- 45 BORIE, B. et al. Reliable propagation of magnetic domain walls in cross structures for advanced multiturn sensors. *Phys. Rev. Applied*, American Physical Society, v. 8, p. 044004, Oct 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.8.044004>>.
- 46 SCHECK, F. *Mechanics: From Newton's Law to Deterministic Chaos*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2010.
- 47 BRUNO, P. *Phys. Rev. B*, v. 52, p. 411, 1995.
- 48 ZHOU, S. M.; LIU, K.; CHIEN, C. L. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. R14 717, 1998.
- 49 ABERT, C. Micromagnetics and spintronics: models and numerical methods. *The European Physical Journal B*, v. 92, n. 6, p. 120, Jun 2019. ISSN 1434-6036. Disponível em: <<https://doi.org/10.1140/epjb/e2019-90599-6>>.
- 50 BROWN, W. *Micromagnetics*. Interscience Publishers, 1963. (Interscience tracts on physics and astronomy). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=KvuXnAEACAAJ>>.
- 51 LEON, A. O. et al. Manipulation of the rkky exchange by voltages. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, p. 014403, Jul 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.014403>>.
- 52 EXL, L. A magnetostatic energy formula arising from the l2-orthogonal decomposition of the stray field. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v. 467, n. 1, p. 230 – 237, 2018. ISSN 0022-247X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022247X18306000>>.
- 53 XIA, K. et al. Noncollinear interlayer exchange coupling caused by interface spin-orbit interaction. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 55, p. 12561–12565, May 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.12561>>.
- 54 BERNAND-MANTEL, A.; MURATOV, C. B.; SIMON, T. M. Unraveling the role of dipolar versus dzyaloshinskii-moriya interactions in stabilizing compact magnetic skyrmions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 101, p. 045416, Jan 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.045416>>.
- 55 PAIGE, D.; SZPUNAR, B.; TANNER, B. The magnetocrystalline anisotropy of cobalt. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 44, n. 3, p. 239 – 248, 1984. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885384902488>>.

- 56 DZYALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, v. 4, n. 4, p. 241 – 255, 1958. ISSN 0022-3697. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369758900763>>.
- 57 GILBERT, T. L. *Phys. Rev.*, v. 100, p. 1243, 1945.
- 58 OHMI, T.; MACHIDA, K. Bose-einstein condensation with internal degrees of freedom in alkali atom gases. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 67, n. 6, p. 1822–1825, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.67.1822>>.
- 59 REID, A. H. et al. Beyond a phenomenological description of magnetostriction. *Nature Communications*, v. 9, n. 1, p. 388, Jan 2018. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41467-017-02730-7>>.
- 60 WANG, D.; ZHANG, J.; XU, K. *Surf. Sci.*, v. 600, p. 2990, 2006.
- 61 WANG, X.; GARCÍA-CERVERA, C. J.; WEINAN, E. *J. Comp. Phys.*, v. 171, p. 357 – 372, 2001.
- 62 ZHANG, W. et al. Engineering gilbert damping by dilute gd doping in soft magnetic fe thin films. *Journal of Applied Physics*, v. 115, n. 17, p. 17A308, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4862091>>.
- 63 DONAHUE, M. J. *OOMMF user’s guide, version 1.0*. [S.l.], 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.6028/nist.ir.6376>>.
- 64 VANSTEENKISTE, A. et al. The design and verification of mumax3. *AIP Advances*, v. 4, n. 10, p. 107133, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4899186>>.
- 65 KRAVCHUK, V. P. et al. Topologically stable magnetization states on a spherical shell: Curvature-stabilized skyrmions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 94, p. 144402, Oct 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.144402>>.
- 66 DONNELLY, R.; Hollis Hallett, A. Periodic boundary layer experiments in liquid helium. *Annals of Physics*, v. 3, n. 3, p. 320 – 345, 1958. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000349165890023X>>.
- 67 MOORE, J. E. The birth of topological insulators. *Nature*, v. 464, n. 7286, p. 194–198, Mar 2010. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature08916>>.
- 68 SAU, J. D. et al. Chiral rashba spin textures in ultracold fermi gases. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 83, p. 140510, Apr 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.140510>>.
- 69 WENG, H. Lighting up weyl semimetals. *Nature Materials*, v. 18, n. 5, p. 428–429, May 2019. ISSN 1476-4660. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41563-019-0330-7>>.
- 70 SASTRY, S. S. et al. Liquid crystal parameters through image analysis. *Liquid Crystals*, Taylor & Francis, v. 39, n. 12, p. 1527–1537, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/02678292.2012.725870>>.
- 71 BEG, M. et al. Stable and manipulable bloch point. *Scientific Reports*, v. 9, n. 1, p. 7959, May 2019. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-019-44462-2>>.

- 72 HOWARD, E. Topology and physics. *Contemporary Physics*, Taylor & Francis, v. 60, n. 4, p. 323–324, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00107514.2019.1684372>>.
- 73 PAO, P. S. The topological structure of 4 manifolds with effective torus actions (ii). *Illinois J. Math.*, Duke University Press, v. 21, n. 4, p. 883–894, 12 1977. Disponível em: <<https://doi.org/10.1215/ijm/1256048937>>.
- 74 Mees, A.; Chua, L. The hopf bifurcation theorem and its applications to nonlinear oscillations in circuits and systems. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, v. 26, n. 4, p. 235–254, 1979.
- 75 KRÜGER, B. et al. Vortices and antivortices as harmonic oscillators. *Journal of Applied Physics*, v. 103, n. 7, p. 07A501, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2830011>>.
- 76 TOSCANO, D. et al. Building traps for skyrmions by the incorporation of magnetic defects into nanomagnets: Pinning and scattering traps by magnetic properties engineering. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 480, p. 171 – 185, 2019. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885318335686>>.
- 77 ELÍAS, R. G.; VIDAL-SILVA, N.; CARVALHO-SANTOS, V. L. Winding number selection on merons by gaussian curvature's sign. *Scientific Reports*, v. 9, n. 1, p. 14309, Oct 2019. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-019-50395-7>>.
- 78 DUBROVIN, B. Geometry and integrability of topological-antitopological fusion. *Comm. Math. Phys.*, Springer, v. 152, n. 3, p. 539–564, 1993. Disponível em: <<https://projecteuclid.org:443/euclid.cmp/1104252517>>.
- 79 BLOCH, A. et al. *Comm. in Math. Phys.*, v. 175, p. 1–42, 1996.
- 80 DENISOV, K. S. et al. General theory of the topological hall effect in systems with chiral spin textures. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 98, p. 195439, Nov 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.195439>>.
- 81 HAILE, J. M. *Molecular Dynamics Simulation - Elementary Methods*. New York: Wiley & Sons, Inc., 1992.
- 82 RAPAPORT, D. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. The Edinburgh Building, Cambridge CB2 2RU, UK: Cambridge University Press, 2001.
- 83 SANDERS, J.; KANDROT, E. *CUDA by example: an introduction to general purpose GPU programming*. Boston: Pearson Education, Inc., 2010.
- 84 CUDA C Best Practices Guide. <<http://developer.nvidia.com/nvidia-gpu-computing-documentation>>. Acessado por último em: 30-01-2016.
- 85 GRIEBER, M.; KNAPEK, S.; ZUMBUSCH, G. *Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications*. [S.l.]: Springer, 2007.
- 86 NVIDIA. <<http://www.nvidia.com/page/home.html>>. Acessado por último em: 30/01/2016.
- 87 M.RESCH et al. *High Performance Computing on Vector Systems*. Berlin: Springer-Verlag, 2010.

- 88 SATO, F. *Introdução a Métodos Computacionais Aplicados à Física*. Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, <<http://www.fisica.ufjf.br/~sjsfsto/fiscomp1/index.html>>. Acessado por último em: 30-01-2016.
- 89 EVANS, R. F. L. et al. *J. Phys. Condens. Matter*, v. 26, p. 103202, 2014.
- 90 MATHEW, T. *Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations*. [S.l.]: Springer, 2008.
- 91 NGUYEN, H. *GPU gems 3*. [S.l.]: Pearson Education Inc., 2008.
- 92 D'AQUINO, M. et al. *J. Comp. Phys.*, v. 228, p. 6130 – 6149, 2009.
- 93 CUDA C Programming Guide. <<http://developer.nvidia.com/nvidia-gpu-computing-documentation>>. Acessado por último em: 30-01-2016.
- 94 HAMMING, R. *Numerical Methods for Scientists and Engineers*. New York: McGraw-Hill Book Company, Inc., 1962.
- 95 CHOI, J. O.; SHIN, Y. S.; HONG, B. H. *Springer published at* <<https://www.cs.indiana.edu/~shiny/pubs/dexa99.pdf>>, 1999.
- 96 TOSCANO, D. et al. *J. App. Physics*, v. 115, p. 163906, 2014.
- 97 MANOHARAN, P.; RAY, B. K. An improved circle drawing algorithm on a hexagonal grid. *Journal of Graphics Tools*, Taylor & Francis, v. 17, n. 1-2, p. 5–15, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/2165347X.2013.865004>>.
- 98 HUANG, K.-F. et al. Magnetic patterning: local manipulation of the intergranular exchange coupling via grain boundary engineering. *Scientific Reports*, v. 5, n. 1, p. 11904, Jul 2015. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep11904>>.
- 99 NAGAOSA, N.; TOKURA, Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 12, p. 899, 2013.
- 100 MARSDEN, J. E.; WEST, M. *Acta Numerica*, v. 10, p. 1–158, 2001.
- 101 HAIRER, E.; LUBICH, C.; WANNER, G. *Geometric numerical integration. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*. [S.l.]: Springer, 2002.
- 102 BOARDMAN, R. P. *Computer Simulation Studies of Magnetic Nanostructures*. [Http://www.southampton.ac.uk/~rpb/thesis/thesis.html](http://www.southampton.ac.uk/~rpb/thesis/thesis.html).
- 103 VAMPIRE. <<http://vampire.york.ac.uk/>>. Acessado por último em: 30/01/2016.
- 104 MCLACHLAN, R. I.; MODIN, K.; VERDIER, O. *Phys. Rev. E*, v. 89, p. 061301(R), 2014.
- 105 CROSS, R. The rise and fall of spinning tops. *American Journal of Physics*, v. 81, n. 4, p. 280–289, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.4776195>>.
- 106 D.C.RALPH; STILES, M. *J. of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 320, p. 1190, 2008.



- 107 LEE, T. *Phys. Lett. B*, v. 122, p. 217–220, 1983.
- 108 FERREIRA, V. A. et al. *J. App. Phys.*, v. 114, p. 013907, 2013.
- 109 MICROMAGNUM. <<http://micromagnum.informatik.uni-hamburg.de/>>. Acessado por último em: 30/01/2016.
- 110 DAI, Y. Y. et al. Skyrmion ground state and gyration of skyrmions in magnetic nanodisks without the dzyaloshinsky-moriya interaction. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 054403, Aug 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.054403>>.
- 111 BAZEIA, D.; DORIA, M.; RODRIGUES, E. Topological excitations in magnetic materials. *Physics Letters A*, v. 380, n. 22, p. 1947 – 1952, 2016. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960116300640>>.
- 112 MOUTAFIS, C.; KOMINEAS, S.; BLAND, J. A. C. Dynamics and switching processes for magnetic bubbles in nanoelements. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 79, p. 224429, Jun 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.224429>>.
- 113 CLERC, M. Beyond standard particle swarm optimisation. In: *Innovations and Developments of Swarm Intelligence Applications*. [S.l.]: IGI Global, 2012. p. 1–19.
- 114 BRATTON, D.; KENNEDY, J. Defining a standard for particle swarm optimization. In: IEEE. *Swarm Intelligence Symposium, 2007. SIS 2007. IEEE*. [S.l.], 2007. p. 120–127.
- 115 MENDONÇA, J. P. A. de et al. The frogs method: A bioinspired algorithm for micromagnetic dynamics skyrmion data extraction. 2019.
- 116 XU, Z. et al. Compact modeling of stt-mtj devices. *Solid-State Electronics*, v. 102, p. 76 – 81, 2014. ISSN 0038-1101. Selected papers from ESSDERC 2013. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038110114001361>>.
- 117 HAIRER, E.; NORSETT, S.; WANNER, G. *Solving ordinary differential equations I, nonstiff problems*. [S.l.]: Springer, 1993.
- 118 HAIRER, E.; NORSETT, S.; WANNER, G. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, v. 18, p. 257–269, 1997.
- 119 LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Phys. Z. Sowietunion*, v. 8, p. 153, 1935.

# APÊNDICE A - Erros na integração de métodos discretos

## O Caso Geral

Vamos exibir brevemente o caso geral do erro para integradores de um passo (que se utilizam apenas das grandezas em um tempo  $t_n$  e um tempo inicial  $t_0$ ) como a regra do ponto médio esférico, omitindo demonstrações.

Podemos reescrever a equação LLG na seguinte forma, derivada da função Hamiltoniana de Heisenberg  $\mathcal{H}$ :

$$\dot{\vec{q}} = \nabla_{\vec{p}}\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}), \quad \dot{\vec{p}} = -\nabla_{\vec{q}}\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) \quad (\text{A.1})$$

para coordenadas do espaço de fase de posições  $\vec{q}$  e momenta generalizados  $\vec{p}$ . No caso da equação LLG, estes podem ser por exemplo os valores de magnetização  $\vec{m}$  e torques definidos pela eq. 2.47,  $\frac{d\vec{m}}{dt}$ .

**Erro Local.** Em geral, um método de passo simples para a integração temporal das equações A.1 pode ser escrito na forma:<sup>85,101</sup>

$$\begin{pmatrix} \vec{q}(t_{n+1}) \\ \vec{p}(t_{n+1}) \end{pmatrix} = \Psi(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t) := \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t) \\ \Psi_2(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t) \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Com a função  $\Psi$  especificando o método, e  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  (exemplos de método são Runge-Kutta, Adams, Euler, etc.). Se a dupla  $(\vec{q}, \vec{p})$  representa a solução exata das equações A.1, que intercepta o ponto  $(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n))$  no instante de tempo  $t_n$ , então a função de propagação que aproxima o próximo ponto de forma exata pode ser definida como:<sup>117</sup>

$$\Phi(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t) := \begin{pmatrix} \vec{q}(t_n + \Delta t) \\ \vec{p}(t_n + \Delta t) \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Então, para um método de integração de ordem  $k$  e uma função apropriada

$(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ , vale a estimativa:

$$\|\Psi(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t) - \Phi(\vec{q}(t_n), \vec{p}(t_n), \Delta t)\| = \mathcal{O}(\Delta t^{k+1}) \quad (\text{A.4})$$

E o erro local em cada passo portanto é da ordem de  $\Delta t^{k+1}$  para posições e momenta. Assim, podemos aproximar as equações de movimento muito bem através de um **único** passo temporal de  $\Delta t$ . A acurácia pode ser melhorada tanto se aumentando a ordem  $k$  do método, quanto se diminuindo o tamanho do passo. Valores derivados das posições e momenta como energia também podem ser obtidos com boa precisão após um passo temporal.

**Erro Global.** Consideremos agora um intervalo de tempo fixo de  $t_0$  até  $t_{final} = t_0 + n\Delta t$ . Iniciando a partir de  $t_0$ ,  $n$  passos de tamanho  $\Delta t$  são necessários para se alcançar  $t_{final}$ . Consideramos novamente um método de integração  $\Psi$  de ordem  $k$ , e um propagador da solução exata  $\Phi$  ao qual deve ser possível definir uma constante de Lipschitz  $M^1$ . Seja  $(\vec{q}, \vec{p})$  a solução exata que contém o ponto  $(\vec{q}(t_0), \vec{p}(t_0))$ . Então, obtemos para o erro global na integração temporal entre  $t_0$  e  $t_{final}$ :<sup>85,118</sup>

$$\|\vec{q}(t_0) - \vec{q}(t_{final})\| \leq C \cdot \Delta t^k \cdot \frac{e^{M(t_{final}-t_0)} - 1}{M} \quad (\text{A.5})$$

Onde temos também um resultado completamente análogo para o erro global do momentum  $\vec{p}$ . Novamente, a acurácia da solução depende da nossa escolha do passo temporal  $\Delta t$  e da ordem de convergência  $k$  do método, mas aqui com um detalhe chave: um  $\Delta t$  pequeno, dessa vez, pode acabar *diminuindo* a qualidade dos resultados, uma vez que os erros de arredondamento de pontos flutuantes crescem com o número de passos.

Chegamos finalmente em uma questão fundamental: o erro global de integração cresce *exponencialmente* com  $t_{final}$ . Em muitos casos, estamos interessados em simulações através de longos tempos, onde  $t_{final}$  é consideravelmente maior do que a constante  $M$  (que depende, dentre outros fatores, das oscilações de maior frequência no sistema). Assim, uma pequena perturbação nos dados iniciais podem se amplificar exponencialmente com  $t_{final}$  e, ao fim da simulação, só os efeitos da perturbação serão visíveis. Isso indica que a maioria das simulações apresentem *comportamento caótico* num tempo simulado finito, mesmo em sistemas determinísticos.<sup>46,82</sup> Como consequência direta, os resultados de uma simulação

<sup>1</sup> Uma função  $f$  definida em um domínio  $\mathbb{D}$  é dita Lipschitz contínua, se existe pelo menos uma constante  $M \in \mathbb{R}_*^+$  tal que, para todos  $x, y \in \mathbb{D}$ :

$$\|f(x) - f(y)\| \leq M \cdot \|x - y\|$$

E o menor desses valores  $M$  é chamado constante de Lipschitz de  $f$ .

não mais dependeriam dos dados iniciais fornecidos, e todas as grandezas derivadas como energia e momentum iriam divergir com a passagem do tempo  $t$ . O fato desse resultado ser geral, *independentemente do integrador escolhido*, ilustra a irrelevância de tentarmos utilizar a dinâmica molecular, ou a dinâmica de spins, ou algum método de soluções de equações dinâmicas, na tentativa de se ter uma ferramenta que descreve fielmente trajetórias de partículas e entes físicos para tempos longos.<sup>82</sup>

Apesar do fato de que uma trajetória calculada numericamente para um sistema dinâmico difere substancialmente da trajetória exata  $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$  após um curto tempo, e diverge completamente para tempos longos, a simulação numérica ainda pode obter resultados significativos de maneira estatística. Pode-se observar que certas médias da simulação como energia total são possíveis de se obter com considerável precisão em um ensemble de condições iniciais. Ou seja, valores confiáveis de observáveis macroscópicos podem ser obtidos até em simulações em grandes intervalos de tempo através de outros métodos, desde que o sistema apresente ergodicidade dentro do espaço de fase considerado.<sup>101, 117, 118</sup>

Por fim, vamos explicitar a vantagem de usarmos um método de integração simplético como a regra do ponto médio esférico ou o velocity verlet da dinâmica molecular. Ignorando erros de ponto flutuante, podemos interpretar uma trajetória numericamente calculada por um integrador simplético, por definição, como a solução exata de uma hamiltoniana levemente perturbada com relação ao sistema real  $\mathcal{H}$ :<sup>85</sup>

$$\tilde{\mathcal{H}}(\vec{q}, \vec{p}) = \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) + \Delta t \mathcal{H}_1(\vec{q}, \vec{p}) + \Delta t^2 \mathcal{H}_2(\vec{q}, \vec{p}) + \dots \quad (\text{A.6})$$

Com a trajetória calculada numericamente, portanto, sendo uma solução exata de  $\tilde{\mathcal{H}}$ . Dessa maneira, as grandezas conservadas  $\tilde{A}$  de  $\tilde{\mathcal{H}}$  são conservadas através dessa trajetória aproximada. Se  $\tilde{\mathcal{H}}$  difere muito pouco de  $\mathcal{H}$ , ou seja,  $\tilde{\mathcal{H}} \approx \mathcal{H}$ , então temos que as grandezas  $\tilde{A}$  obtidas, correspondem a menos de uma perturbação com aquelas pertencentes ao sistema original  $\mathcal{H}$ . Naturalmente, na maioria dos casos é muito difícil obter  $\tilde{\mathcal{H}}$  explicitamente, ou conhecer suas grandezas conservadas, então a utilidade dessa análise retrógrada é limitada.

Mesmo com essa limitação, para longos tempos, note que é possível estimar o erro em se obter médias de alguma grandeza  $A$  com respeito a um ensemble de sistemas, comparando os valores numéricos com aqueles pertencentes a trajetória exata (e se utilizando da hipótese ergódica<sup>40</sup>). Podemos esperar de um integrador simplético, que conserva certas estruturas do sistema sendo apenas uma perturbação do mesmo, uma certa

estabilidade. De fato, para essa classe de integradores vale que:

$$\|\langle \tilde{A}(\vec{q}(t_1), \dots, \vec{q}(t_n)) \rangle - \langle A(\vec{q}(t)) \rangle\| \leq C \cdot \Delta t^k \quad (\text{A.7})$$

Para um método de ordem  $k$ . Na prática, a propriedade simplética de um integrador  $\Psi$  significa que este é capaz de aproximar de maneira eficiente e previsível o critério de continuidade uniforme do propagador  $\Phi$  do sistema dinâmico exato. Dependendo então de nossa escolha de passo temporal, a acurácia de médias calculadas através da simulação é alta mesmo para tempos longos, bastando nos preocuparmos com os erros de arredondamento e com as aproximações usadas ao se calcular os Campos envolvidos. Por essa razão, integradores simpléticos são de extremo interesse na Matemática Aplicada e na Física.<sup>104</sup>

## APÊNDICE B - Equações Precessionais do Micromagnetismo

Iremos descrever as várias equações fenomenológicas utilizadas no Micromagnetismo. Essencialmente, todas são uma derivação do modelo original proposto por Landau e Lifshitz, e retratado por Brown.<sup>41,119</sup>

### Precessão Giromagnética

O resultado fundamental em 2.1 relaciona o momento magnético atômico ao momento angular total atômico via uma frequência de precessão (a razão giromagnética). Ao aplicarmos o teorema de conservação do momento angular - ou de forma ainda mais geral, aplicarmos o teorema de Noether ao caso da simetria de rotação de um momento magnético, conseguimos relacionar a taxa de variação do momento angular ao torque exercido no elétron pelo Campo magnético  $\vec{H}$ :

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{H} \quad (\text{B.1})$$

Utilizando a relação 2.1 chegamos a um modelo que descreve a precessão do momento magnético em torno do Campo:

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\vec{\mu} \times \vec{H} \quad (\text{B.2})$$

A frequência de precessão é denominada *frequência de Larmor*

$$f_L = \frac{\gamma H}{2\pi} \quad (\text{B.3})$$

E para cada um dos momentos em uma região do espaço temos:

$$\frac{d\vec{\mu}_i}{dt} = -\gamma\vec{\mu}_i \times \vec{H}_i \quad (\text{B.4})$$

Ou, se supormos que  $\sum_i \vec{H}_i = \vec{H}$  é suficientemente uniforme, e tomarmos a média por volume da última equação, chegamos a equação giromagnética fundamental:

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{d \sum_i \vec{\mu}_i}{dt} = -\gamma \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{\mu}_i \times \vec{H}_i$$

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H} \quad (\text{B.5})$$

## A Equação de Landau-Lifshitz

O primeiro modelo dinâmico para o movimento de precessão da Magnetização é devido a Landau e Lifshitz nos anos 30. Sua proposta consiste de uma equação da forma B.5, na presença de efeitos quânticos de troca e anisotropia introduzidos fenomenologicamente, correspondendo a um Campo efetivo  $\vec{H}_l$ , Ou seja:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_l \quad (\text{B.6})$$

Quando a variação da Magnetização no tempo é nula, temos as chamadas equações de Brown que descrevem a precessão conservativa de uma magnetização e podem ser usadas para minimizar caminhos no espaço de fase. Note que, introduzindo um parêntese de Poisson da forma:

$$\{F, G\}(\vec{M}) = \vec{M} \cdot [\nabla F(\vec{M}) \times \nabla G(\vec{M})] \quad (\text{B.7})$$

Podemos usar o gerador:

$$S = \gamma \vec{M} \cdot \vec{H}_l \quad (\text{B.8})$$

E mostrarmos assim que a equação B.6 é um modelo *Hamiltoniano* e, em particular, conservativo.<sup>79</sup>

$$\frac{dM_i}{dt} = \{M_i, S\} = \epsilon_{ijk} M_k (\nabla S)_j \quad (\text{B.9})$$

Note que como o espaço de fase de  $\vec{M}$  é um múltiplo da n-esfera  $\|\vec{M}\|(S^2)^N$ , a equação de Landau-Lifshitz é um modelo Hamiltoniano *não-canônico*, que possui invariantes adicionais e não precisa corresponder exatamente à forma das equações de Hamilton, porém mantendo uma estrutura simplética.<sup>104</sup>

Esse resultado é importante pois, na escolha de um integrador numérico, gostaríamos de também preservar a estrutura Hamiltoniana da precessão. Note também a semelhança

entre a eq. B.7 e a definição do vetor de giroacoplamento  $\vec{G}$  na eq. 3.1. Essa ligação é razoável pois o parêntese de Poisson definido assim possui uma estrutura que preserva a conectividade do espaço de configuração do Campo  $\vec{M}$ , e portanto sua classe de homotopias.

Seguindo o modelo acima, Landau e Lifshitz observaram que no decorrer dos processos dinâmicos da Magnetização, ocorrem eventos dissipativos que, como citado antes, ainda são uma questão em aberto. Então, estes introduziram de maneira fenomenológica um termo de torque adicional e dissipativo, que empurra a magnetização na direção do Campo efetivo. Assim, a equação de Landau-Lifshitz se torna:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_l - \frac{\alpha_L}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_l) \quad (\text{B.10})$$

onde  $\alpha_L$  é característico do material. A observação importante feita pelos autores ao introduzir esse termo é a de que a magnitude da Magnetização é preservada de acordo com o vínculo Micromagnético  $\|\vec{M}\| = M_s$ . Note também que o sistema ainda possui uma estrutura Hamiltoniana com a dissipação se apresentando de forma perturbativa.

## A Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Uma abordagem diferente foi proposta por Gilbert<sup>57</sup> nos anos 50, que observou que, como a equação conservativa em B.6 pode ser derivada de uma Lagrangiana, o modo mais natural de se introduzir uma dissipação fenomenológica seria a introdução de um "termo de viscosidade" cujos componentes são proporcionais a derivada temporal das coordenadas generalizadas (i.e, as "Velocidades"). Ele então introduziu o termo:

$$\frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (\text{B.11})$$

Correspondendo ao torque produzido por um campo  $-\alpha/\gamma M_s \dot{\vec{M}}$ , sendo  $\alpha$  o parâmetro de damping de Gilbert. Assim temos a equação:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_l + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (\text{B.12})$$

Apesar de similares, há diferenças substanciais entre as equações LLG e a equação de Landau Lifshitz (LL). Podemos chegar a uma versão modificada da equação LL aplicando o produto vetorial por  $\vec{M}$  em ambos os lados da equação LLG:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_l) + \vec{M} \times \left( \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) \quad (\text{B.13})$$



Usando  $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot (\vec{c} \times \vec{d}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})(\vec{b} \cdot \vec{d}) - (\vec{a} \cdot \vec{d})(\vec{b} \cdot \vec{c})$  e  $\vec{M} \cdot \dot{\vec{M}} = 0$ , obtemos:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times (\vec{M} \times H_l) + \alpha M_s \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (\text{B.14})$$

Substituindo essa equação no lado direito da equação LLG e rearranjando os termos, chegamos a:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \vec{M} \times \vec{H}_l - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \frac{|\gamma|}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_l) \quad (\text{B.15})$$

Essa equação mostra que, mesmo com uma semelhança matemática, as duas equações representam a mesma física apenas no limite de damping muito baixo, pois a razão giromagnética em um caso é diferente no outro. Outro detalhe é que, no limite de damping infinito, temos outra diferença entre LL e LLG, respectivamente:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \rightarrow \infty \quad , \quad \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \rightarrow 0 \quad (\text{B.16})$$

O segundo resultado está em concordância com nossa intuição de que uma dissipação extrema resulta em um movimento muito lento. Portanto, esta expressão reafirma nossa escolha pela Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert.

Vamos enunciar as propriedades mais importantes da equação LLG:

## Conservação da Magnetização

Seja  $\vec{m} = \vec{M}/M_s$  e  $\vec{H}_l/M_s = \vec{h}$ , e  $\tau = \gamma M_s t$ , temos que:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial \tau} = -\vec{m} \times \vec{h} + \alpha \vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial \tau} \quad (\text{B.17})$$

O produto escalar de ambos os lados da equação acima por  $\vec{m}$  é:

$$\begin{aligned} \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{d\tau} &= \frac{d(\vec{m} \cdot \vec{m})}{d\tau} - \frac{d\vec{m}}{d\tau} \cdot \vec{m} \\ \implies \frac{1}{2} \frac{d\|\vec{m}\|^2}{d\tau} &= \vec{m} \cdot \left( -\vec{m} \times \vec{h} + \alpha \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{d\tau} \right) \\ \implies \frac{1}{2} \frac{d\|\vec{m}\|^2}{d\tau} &= -(\vec{m} \times \vec{m}) \cdot \vec{h} + (\vec{m} \times \alpha \vec{m}) \cdot \frac{d\vec{m}}{d\tau} \\ \implies \frac{1}{2} \frac{d\|\vec{m}\|^2}{d\tau} &= 0 \iff \|\vec{m}\| = \text{const.} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Onde usamos a regra do produto para a derivada temporal do lado esquerdo e a regra de permutação circular do produto triplo para os termos de torque. Note que os dois termos (torques) no lado direito do segundo passo são perpendiculares a  $\vec{m}$ .

Isso implica que, para todo  $t, t_0$  e  $\vec{r} \in \Omega$ , sendo  $\Omega$  a região magnetizada do espaço, temos:

$$\|\vec{m}(\vec{r}, t)\| = \|\vec{m}(\vec{r}, t_0)\| \quad (\text{B.19})$$

O que expressa o fato de que a equação LLG é um mapeamento da esfera unitária,  $S^2$ , em si.<sup>104</sup>

## Estrutura da Função de Energia

A energia  $\mathcal{E}$  que associamos à magnetização na eq. 2.46, é conservativa a não ser por Campos externos que dependam explicitamente do tempo ou devido ao mecanismo de amortecimento do termo de damping. Para o caso de um campo efetivo  $\vec{H}_l$  que não dependa explicitamente do tempo, podemos escrever a derivada no tempo da energia como:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{E}}{dt} &= \int_V \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\vec{M}} \cdot \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} d\vec{r} \\ &= -\mu_0 \int_V \vec{H}_l \cdot \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} d\vec{r} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Aqui usamos a definição do Campo efetivo na eq. LLG em 2.47 e também a regra da cadeia generalizada para a derivada funcional de  $\mathcal{E}$ . Podemos substituir, na expressão anterior, a equação LLG diretamente, na sua forma extensa em B.15:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{E}}{dt} &= \mu_0 \int_V \vec{H}_l \cdot \left[ \frac{\gamma}{1+\alpha^2} \vec{M} \times \vec{H}_l + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \frac{|\gamma|}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_l) \right] d\vec{r} \\ &= \mu_0 \int_V \frac{\alpha|\gamma|}{M_s(1+\alpha^2)} \vec{H}_l \cdot \left[ \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_l) \right] d\vec{r} \\ &= \mu_0 \int_V \frac{\alpha|\gamma|}{M_s(1+\alpha^2)} \vec{H}_l \cdot \left[ (\vec{M} \cdot \vec{H}_l) \vec{M} - (\vec{M} \cdot \vec{M}) \vec{H}_l \right] d\vec{r} \\ &= \mu_0 \int_V \frac{\alpha|\gamma|}{M_s(1+\alpha^2)} \left[ (\vec{M} \cdot \vec{H}_l)^2 - \|\vec{M}\|^2 \|\vec{H}_l\|^2 \right] d\vec{r} \\ &= -\mu_0 \int_V \frac{\alpha|\gamma|}{M_s(1+\alpha^2)} \|\vec{M} \times \vec{H}_l\|^2 d\vec{r} \leq 0 \quad \forall \alpha \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Onde usamos dois casos particulares da fórmula de Cauchy-Binet:

$$\begin{aligned}\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2 &= \|\vec{a}\|^2\|\vec{b}\|^2 - (\vec{a} \cdot \vec{b})^2 \\ \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) &= (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}\end{aligned}\tag{B.22}$$

O valor da integral da eq. B.21 é nulo no caso de um mínimo de energia, e positivo em todos os outros casos de constantes não nulas. Em outras palavras, a energia do sistema é uma função estritamente decrescente do tempo (devido ao sinal negativo precedendo a expressão). Essa propriedade é chamada *estrutura de Lyapunov* da equação LLG. observe que, para  $\alpha = 0$ , a energia de fato é conservada (a equação LLG tem a estrutura Hamiltoniana de uma precessão giromagnética).

As propriedades acima são de sumária importância e servem como verificação de nossos modelos numéricos, pois são intrínsecas à simetria natural da formulação da equação LLG.

## A Equação de Langevin

As equações de precessão derivadas de forma variacional com a energia da eq. 2.46 são todas válidas estritamente apenas no caso de temperatura nula,  $T = 0$ . Para valores finitos de temperatura, além dos mecanismos de damping e de precessão de Campo, também ocorrem flutuações locais dos momentos magnéticos, via transferências de momento e energia com a rede cristalina local.

A maneira estabelecida de modelar essas flutuações dentro do modelo Micromagnético foi mostrada por Brown.<sup>42,50</sup> Vamos adicionar um termo ao Campo efetivo da eq. LLG em 2.47, não advindo das interações internas entre momentos magnéticos, mas sim do contato com um banho térmico com energia e momento próprios. O Campo resultante desse contato com o sistema corresponde a um termo de *ruído branco*, de natureza estocástica, que promove uma precessão aleatória dos momentos magnéticos de maneira similar ao movimento Browniano dinâmico. A equação resultante é conhecida como equação de Langevin. A introdução de um termo aleatório dessa forma é comum em aplicações que descrevem perturbações de sistemas com períodos curtos de correlação (e.g pulsos aleatórios e ultrarrápidos na intensidade de corrente em um condutor, induzidos pelo contato entre elétrons de condução e o banho térmico efetivo da rede).

Um processo estocástico (i.e, uma família de variáveis aleatórias)  $X(t)$  é chamado de ruído branco quando sua densidade espectral é constante. Isso significa que, em sua

decomposição espectral, dada por:

$$X(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda t} dw(\lambda) \quad (\text{B.23})$$

os termos  $e^{i\lambda t} dw(\lambda)$  - que correspondem ao espectro de vibrações linearmente independentes geradoras do processo  $X(t)$  - possuem o mesmo valor esperado de intensidade para todas as frequências  $\lambda$ . De fato, essa amplitude é dada em função de uma largura média de vibrações  $\sigma$  através da expressão:

$$\left\langle dw(\lambda) \right\rangle^2 = \frac{\sigma^2}{2\pi} d\lambda \quad , \forall \quad \lambda \in \mathbb{R} \quad (\text{B.24})$$

Esse fato tem duas consequências interessantes. Primeiramente, significa que num ruído branco todas as variáveis aleatórias básicas do processo estocástico não possuem correlação entre si independentemente do tempo ou posição considerados, efetivamente correspondendo a um processo sem memória:

$$\left\langle e^{i\lambda_j t} dw(\lambda_j(\vec{r}_m)), e^{i\lambda_k t'} dw(\lambda_k(\vec{r}_n)) \right\rangle = \delta_{jk} \delta_{mn} \delta(t - t') \left\langle dw(\lambda_k) \right\rangle^2 \quad (\text{B.25})$$

Em segundo lugar, a decomposição da forma B.24 nos indica que, para qualquer função quadraticamente integrável  $\phi(t) \in L^2$ :

$$\left\langle X, \phi \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t) X(t) dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(\lambda) dw(\lambda) \quad (\text{B.26})$$

Onde  $\tilde{\phi}(\lambda)$  é a transformada de Fourier de  $\phi(t)$ . Podemos nos aproveitar dessa propriedade para definir a ação do processo estocástico  $X(t)$  sob a função  $\phi(t)$  através de uma medida estocástica  $d\eta(t)$ , que tem propriedades próximas (em particular, é a transformada de Fourier) de  $dw(\lambda)$ :

$$\left\langle X, \phi \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t) d\eta(t) \quad (\text{B.27})$$

Se considerarmos um ruído branco  $X(t)$  na forma de uma distribuição Gaussiana, esse passa a ser exatamente a derivada do movimento Browniano  $\eta(t)$  no sentido de distribuições, isso é,  $X(t) = \eta'(t)$ , que podemos usar como base para construir equações de difusão estocásticas do tipo:<sup>117, 118</sup>

$$dY(t) = \alpha(t, Y(t))dt + \sigma(t, Y(t))d\eta(t) \quad (\text{B.28})$$

que é exatamente a classe de equações onde se encaixará a equação de Langevin do Micromagnetismo.

Vamos definir portanto um Campo que atua na magnetização contida em um volume  $V$ , através de um processo estocástico de forma Gaussiana em três dimensões linearmente independentes  $\vec{H}_{th}(\vec{r}, t)$ , que cumpre a seguinte condição:

$$\left\langle H_{th}^k(\vec{r}_i, t), H_{th}^l(\vec{r}_j, t') \right\rangle = 2D\delta_{ij}\delta_{kl}\delta(t - t') \quad (\text{B.29})$$

Na qual os índices  $(k, l)$  correspondem a diferentes vibrações fundamentais e  $(i, j)$  a diferentes sítios de momento magnético no espaço.  $D$  é a intensidade das flutuações térmicas, que pode ser obtida através do teorema da flutuação-dissipação.<sup>57</sup> Em palavras, o teorema aponta o fato de que todo mecanismo de dissipação de um sistema (e.g resistência elétrica, perda de energia cinética para o meio num movimento Browniano, amortecimento via viscosidade) gera uma flutuação, efetivamente oposta à dissipação, que retroalimenta energia de forma estocástica para o sistema dinâmico. No caso Micromagnético:

$$D = \frac{\alpha k_B T}{\gamma M_s a_0^3} \quad (\text{B.30})$$

Com  $a_0^3$  representando um volume característico no qual cada flutuação básica é uniforme - pode ser diretamente relacionado ao tamanho de células de elementos finitos numa implementação numérica.

Assim a equação de Langevin, equivalente à equação LLG com o Campo estocástico  $\vec{H}_{th} = D\vec{X}$  adicionado, se resume a:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times (\vec{H}_l + \vec{H}_{th}) + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (\text{B.31})$$

Resta apenas comentarmos sobre a validade da equação B.31 para descrever fenômenos magnéticos em temperaturas finitas. A hipótese fundamental do modelo é a ausência de correlações nas escalas de tempo consideradas, da eq. B.25. Entretanto, as flutuações térmicas e de momento angular estão correlacionadas ao nível eletrônico, a partir da interação dinâmica entre átomos, fônons e elétrons do sistema. O tempo de correlação observado tipicamente está na ordem de 1 fs,<sup>49,102</sup> da mesma ordem típica de passos temporais numéricos usados. Portanto, para fenômenos relevantes na escala maior ou igual ao fs, assim como temperaturas baixas o suficiente, esse modelo é capaz de descrever adequadamente flutuações não correlacionadas nesses sistemas. Em regimes próximos da transição de fase, ou em fenômenos ultrarrápidos porém, a equação LLG deixa de ser válida e passa a ser necessário uma modelagem direta dos mecanismos microscópicos de flutuação-dissipação.

## Torque de Spin-Transferência (STT)

Na abordagem semiclássica do modelo Micromagnético, a polarização dos elétrons de condução causadas pela passagem de uma corrente elétrica através de um material anisotrópico é descrita por um Campo vetorial  $\vec{p}$ . Os elétrons de condução são parcialmente polarizados na direção dos eixos fáceis do material, com uma taxa maior ou menor de polarização a depender do seu livre caminho médio no material, tempo de passagem, temperatura e anisotropia da rede. Quando essa corrente atravessa uma região ferromagnética, os spins localizados do material sofrem um efeito de torque chamado *torque de spin*.

Esse torque é similar ao exercido por um Campo, e pode ser separado em duas contribuições exatamente como na figura 8. Isto é, a passagem da corrente gera um torque com uma componente  $\vec{\tau}_{field}$  que age no sentido de precessionar os spins de sítio em torno da polarização  $\vec{p}$ , e outra componente  $\vec{\tau}_{damp}$  que causa um relaxamento dos momentos magnéticos na direção da polarização. Ao contrário do caso do Campo efetivo  $\vec{H}_l$  porém, em que  $\alpha \ll 1$  em geral, no caso do torque de spin a dinâmica é dominada pela rotação direta da magnetização na direção de  $\vec{p}$ , com o torque do tipo Campo sendo uma contribuição precessional menor. Caso a origem da corrente polarizada seja a passagem direta de uma corrente elétrica chamamos o efeito de torque de *torque de spin-transferência*. Mas pode ser que o torque seja causado indiretamente pela conversão da corrente de cargas em uma corrente de spins, fluindo através do espalhamento de elétrons de condução polarizados em impurezas ou assimetrias. Essa conversão se dá através da interação spin-órbita e é chamada de efeito Hall de spin (com um efeito Hall de spin inverso análogo), e o torque gerado é chamado *torque de spin-órbita*.<sup>60</sup>

Existem vários modelos diferentes para se descrever a física altamente complexa e diversa contida nos fenômenos de torque de spin, que funcionam em situações e regimes específicos, e grande parte destes fogem do escopo do nosso presente esforço. Vamos então focar no modelo de Zhang-Li<sup>60</sup> que descreve de forma apropriada o torque de spin-transferência em meios ferromagnéticos contínuos com as interações básicas da eq. 2.46. Iremos descrever muito brevemente a sequência do trabalho original que pode ser consultado para detalhes maiores.

O princípio do modelo consiste em separar a estrutura eletrônica de um ferromagneto em dois tipos de elétrons, aqueles no nível de Fermi ou próximos, responsáveis pelo transporte de carga e spin através do circuito, e elétrons abaixo dos últimos níveis ocupados do mar de Fermi, que serão responsáveis pela dinâmica da Magnetização de momentos localizados, como tratamos até o momento.

A interação de troca entre esses dois tipos de elétrons pode ser modelada de forma

quase ingênua por um operador Hamiltoniano "s-d" dado por:

$$\hat{H}_{sd} = -J_{ex}\hat{s} \cdot \hat{S} \quad (\text{B.32})$$

onde  $\hat{s}$  e  $\hat{S}$  são, respectivamente, os operadores adimensionais de spins itinerantes e spins localizados, com uma integral de troca  $J_{ex}$ . Apesar de extremamente simples, Zhang e Li demonstraram que esse modelo descreve a maior parte da física envolvida na interação entre spins de condução e os spins localizados que formam a magnetização usual. O procedimento usado para isso é o de separar as dinâmicas de cada spin na eq. B.32 em diferentes níveis de tratamento:  $\hat{S}$  passa a ser tratado como uma magnetização clássica reduzida  $\hat{S}/S \approx \vec{M}/M_s$ , enquanto a dinâmica dos spins itinerantes continua sendo tratada como um operador governado por uma equação de transporte:

$$\hat{H}_{sd} = \frac{SJ_{ex}}{M_s}\hat{s} \cdot \vec{M}(\vec{r}, t) \quad (\text{B.33})$$

O restante consiste em usar a teoria da resposta linear para, uma vez determinada a densidade de spin induzida por  $\vec{M}(\vec{r}, t)$ , derivar a resposta da densidade de spin induzida na magnetização.

O operador de spins itinerantes cumpre a seguinte equação de continuidade generalizada:

$$\frac{\partial \hat{s}}{\partial t} + \nabla \cdot \hat{J}_s = \frac{1}{i\hbar}[\hat{s}, \hat{H}_{sd}] - \Gamma_{rx}(\hat{s}) \quad (\text{B.34})$$

Onde  $\hat{J}_s$  é o operador corrente de spin, e  $\Gamma_{rx}(\hat{s})$  representa o relaxamento dos spins devido à espalhamentos com a rede em geral. Seja a densidade de spins definida pela média dos spins através de todos os estados eletrônicos e estados de spin ocupados,  $\vec{m}(\vec{r}, t) = \langle \hat{s} \rangle_{Fermi}$  e a densidade de corrente de spin  $\vec{J}_s(\vec{r}, t) = \langle \hat{J}_s \rangle_{Fermi}$ . A densidade de spins de condução possui uma (versão clássica da) equação de Bloch dada por:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_s = -\frac{1}{\tau_{ex}M_s}\vec{m} \times \vec{M} - \langle \Gamma(\hat{s}) \rangle \quad (\text{B.35})$$

Onde o comutador está explicitado e  $\tau_{ex} = \hbar/SJ_{ex}$ . Agora podemos aplicar a teoria da resposta linear, expandindo a densidade de spin em dois termos:

$$\vec{m} = \vec{m}_0 + \delta\vec{m} = \frac{n_0}{M_s}\vec{M} + \delta\vec{m} \quad (\text{B.36})$$

com  $n_0$  sendo a densidade de spins de equilíbrio, i.e, cuja direção é paralela à magnetização  $\vec{M}$ . Na prática o primeiro termo representa a densidade adiabática de

spins, quando os elétrons de condução relaxam de forma instantânea para um estado de equilíbrio em um único instante  $t$  - uma aproximação válida se a dinâmica da magnetização é muito mais lenta que a dos elétrons itinerantes, estes assim se equilibrando quase instantaneamente, de forma adiabática, na direção da magnetização. O segundo termo representa o desvio desse processo. A densidade de corrente de spin pode ser expandida da mesma forma:

$$\begin{aligned}\vec{J}_s &= \vec{J}_{s_0} + \delta\vec{J} \\ &= -\frac{\mu_B P}{eM_s} \vec{J} \otimes \vec{M} + \delta\vec{J}_s\end{aligned}\tag{B.37}$$

Em que  $P$  é a porcentagem adimensional de polarização dos elétrons de condução,  $\mu_B$  o magneton de Bohr, e  $e$  a carga do elétron. A corrente de spin é na verdade um tensor com duas componentes vetoriais separadas, um sendo a corrente de cargas  $\vec{J}$  (a corrente elétrica convencional) e outro sendo a polarização de spins nessa corrente. O primeiro termo representa portanto, a corrente de spin cuja polarização está completamente paralela à magnetização de elétrons localizados  $\vec{M}$ .

Os demais passos consistem em modelar o relaxamento como  $\langle \Gamma \rangle = \delta\vec{m}/\tau_{sf}$ , onde  $\tau_{sf}$  é o tempo médio de relaxamento entre dois flips de um spin. Com essa aproximação, e considerando também apenas os termos de resposta lineares na corrente elétrica  $\vec{J}$  em  $\delta\vec{m}$  e lineares na derivada da magnetização  $\partial\vec{M}/\partial t$ , ao final chegamos a um torque de spin:

$$\vec{T} = -b\vec{M} \times (\vec{M} \times (\vec{J} \cdot \nabla)\vec{M}) - b\beta\vec{M} \times (\vec{J} \times \nabla)\vec{M}\tag{B.38}$$

Onde  $\beta$  determina o grau de não-adiabaticidade e  $b$  é dado por:

$$b = \frac{P\mu_B}{eM_s(1 + \beta^2)}\tag{B.39}$$

O modelo pode ser redefinido em termos da velocidade de arrasto de spins  $v_j = bJ$  com dimensões de [m/s]. O modelo de Zhang-Li assume implicitamente (contendo só a primeira derivada da magnetização) que a escala de transportes de spin é muito menor que o comprimento característico dos domínios magnéticos. Caso a magnetização sofra alguma mudança abrupta ou o sistema se trate de várias camadas de materiais diferentes, o modelo falha pois as derivadas de segunda ordem e maiores passam a ser relevantes no tratamento dessas não-homogeneidades da magnetização local, no que diz respeito aos processos não-adiabáticos.



## APÊNDICE C - Métodos Preditor-Corretores (PC)

Métodos PC (Preditor-Corretores) se usam de grandezas calculadas em um ou mais passos temporais anteriores. As duas formas mais familiares do método se distinguem por uma escolha entre se usar valores das "acelerações" (derivadas até a segunda ordem) em passos temporais anteriores (método de Adams), ou usar derivadas de ordens superiores, em um mesmo passo temporal (método de Nordsieck). Ambos os métodos são de ordem  $\geq 4$  e requerem um custo computacional mais elevado assim como memória adicional para armazenar variáveis associadas a cada elemento da simulação. O método que usa derivadas de ordem maior é usado principalmente quando queremos alterar o tamanho do passo  $\Delta t$  durante os cálculos (métodos adaptativos<sup>61</sup>); não iremos considerar essa possibilidade nesse trabalho, então mostraremos somente o método de Adams.<sup>82,94</sup>

Nosso objetivo é solucionar a equação diferencial geral da forma:

$$\frac{d^i x}{dt^i} = f(x, \frac{d^i x}{dt^i}, t) \quad , \quad i = 1, 2 \quad (\text{C.1})$$

Para isso vamos proceder em dois passos - um *preditor* e um *corretor*, denotados  $P(x)$  e  $C(x)$  respectivamente. No passo preditor para o tempo  $t_{n+1}$ , simplesmente incorporamos valores de  $f$  calculados em passos temporais  $t_n, t_{n-1}, \dots$ , da seguinte maneira:

$$P(x) : x_i(t_{n+1}) = x(t_n) + \Delta t \frac{dx_i}{dt}(t_n) + \Delta t^2 \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j f(t_{n+(1-j)}) \quad (\text{C.2})$$

Em que  $t_{n+(1-j)} = [n + (1 - j)]\Delta t$ . Essa forma é conhecida como *fórmula de Adams-Bashforth*. Ela contém a mesma informação que os coeficientes da expansão de Taylor, e fornece um resultado exato para o caso especial  $x(t) = t^q$ , dado que  $q \leq k$ . No caso geral para  $x$ , o erro local na integração é de  $\mathcal{O}(\Delta t^{k+1})$ . Os  $\alpha_j$  são determinados pelo seguinte conjunto de  $k - 1$  equações:

$$\sum_{j=1}^{k-1} (1 - j)^q \alpha_j = \frac{1}{(q + 1)(q + 2)} \quad , \quad q = 0, \dots, k - 2 \quad (\text{C.3})$$

Da mesma forma, podemos obter as derivadas primeiras aproximadamente a partir de:

$$P\left(\frac{dx}{dt}\right) : \Delta t \frac{dx_i}{dt}(t_{n+1}) = x(t_{n+1}) - x(t_n) + \Delta t^2 \sum_{j=1}^{k-1} \alpha'_j f(t_{n+(1-j)}) \quad (\text{C.4})$$

Onde os coeficientes  $\alpha'_j$  são encontrados através das equações:

$$\sum_{j=1}^{k-1} (1-j)^q \alpha'_j = \frac{1}{q+2} \quad , \quad q = 0, \dots, k-2 \quad (\text{C.5})$$

Usando os valores previstos de  $x$  e  $dx/dt$ , o passo corretor é feito da seguinte maneira:

$$C(x) : x_i(t_{n+1}) = x(t_n) + \Delta t \frac{dx_i}{dt}(t_n) + \Delta t^2 \sum_{j=1}^{k-1} \beta_j f(t_{n+(2-j)}) \quad (\text{C.6})$$

$$C\left(\frac{dx}{dt}\right) : \Delta t \frac{dx}{dt}(t_{n+1}) = x(t_{n+1}) - x(t_n) + \Delta t^2 \sum_{j=1}^{k-1} \beta'_j f(t_{n+(2-j)}) \quad (\text{C.7})$$

Onde os coeficientes são obtidos através das equações:

$$\sum_{j=1}^{k-1} (2-j)^q \beta_j = \frac{1}{(q+1)(q+2)} \quad , \quad \sum_{j=1}^{k-1} (2-j)^q \beta'_j = \frac{1}{q+2} \quad , \quad q = 0, \dots, k-2 \quad (\text{C.8})$$

A expressão C.6 é chamada fórmula de *Adams-Moulton*. Calculados os coeficientes para a ordem  $k$  escolhida para a simulação, a integração a cada passo temporal procede aplicando-se o passo preditor em todas as variáveis (e.g momentos magnéticos), seguido do cálculo dos Campos locais efetivos baseado nesses valores previstos, e então a aplicação do passo corretor.

Métodos PC potencialmente solucionam uma classe maior de problemas, e também apresentam uma maior acurácia em potencial, então a princípio são mais adequados quando buscamos resultados mais precisos por passo temporal. Porém, mencionamos que é irrelevante buscar acurácia absoluta quanto às trajetórias, devido aos erros locais de arredondamento se acumulando muito mais do que o próprio erro de integração.<sup>85</sup> Ainda assim, seria possível se usar um  $\Delta t$  maior no caso de um integrador de ordem superior, alcançando a mesma acurácia nos valores médios de grandezas após um certo número de passos. Nossas simulações, no entanto, adotam um  $\Delta t \sim 10^{-15}s$ , e a não linearidade da equação LLG possui pouca ou nenhuma sinergia com um método PC que não preserve

propriedades originais da equação.<sup>101</sup> Por isso, nesse trabalho usamos um método PC que alternativamente se deriva de um método implícito que já incorpora as propriedades simpléticas dos espaços de fase típicos em micromagnetismo - o que não retira a utilidade da análise acima, uma vez que a parte preditora do método ainda pode ser aproveitada, devido à convergência excelente de métodos implícitos.

## APÊNDICE D - Propriedades da Eq. LLG via Método do Ponto Médio Esférico

Vamos brevemente demonstrar que o método simplético da eq. 5.24 possui as mesmas propriedades da eq. LLG em 2.47 e 5.22, sendo essas a conservação da norma da magnetização e a estrutura de Lyapunov da energia.

### Norma da magnetização

Vamos escrever explicitamente o método do ponto médio esférico aplicado na eq. LLG, isto é, substituindo as derivadas em diferenças finitas e escrevendo por extenso o torque  $\mathbf{f}_i$  como na eq. 5.22:

$$\frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} = \left( \frac{\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}}{\|\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}\|} \right) \times \left( -\gamma \mathbf{B}_i \left( \frac{\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}}{\|\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}\|} \Big|_j \right) + \alpha \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \right) \quad (\text{D.1})$$

Em que  $(\mathbf{m}_{j,n}|_j)$  é a sequência  $(\mathbf{m}_{1,n}, \dots, \mathbf{m}_{N,n})$ . Vamos multiplicar ambos os lados da eq. D.1 por  $(\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1})$ , resultando em:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \cdot (\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}) &= \frac{\|\mathbf{m}_{i,n+1}\|^2 - \|\mathbf{m}_{i,n}\|^2}{\Delta t} \\ &= (\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}) \cdot \left( \frac{\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}}{\|\mathbf{m}_{i,n} + \mathbf{m}_{i,n+1}\|} \right) \times \\ &\times \left( -\gamma \mathbf{B}_i \left( \frac{\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}}{\|\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}\|} \Big|_j \right) + \alpha \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \right) \\ &= 0 \implies \|\mathbf{m}_{i,n+1}\| = \|\mathbf{m}_{i,n}\|, \quad \forall(i, n) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Em que usamos que  $\mathbf{a} \cdot \left( \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \times \mathbf{b} \right) = 0$ . Portanto, diferentemente dos métodos RK como na eq. 4.17, a norma dos momentos magnéticos é conservada incondicionalmente pelo método do ponto médio esférico.

Outra observação importante é que, mesmo em contraste com a regra do ponto médio clássica, não só a norma dos momentos é conservada, como também em particular é mantida

sempre unitária ( $\|\mathbf{m}_{i,n}\| = 1, \quad \forall(i, n)$ ), inclusive quando usamos a dimensionalidade do Campo vetorial  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$  ou  $\mathbf{s}_i$  das equações originais ao invés dos momentos previamente unitários. Esse fato tem relação com o caráter simplético do integrador no espaço de fase  $(S^2)^N$ , sendo esse método equivalente a uma representação do grupo  $SU(2) \sim SO(3)$  (o grupo das rotações em três dimensões).

## Estrutura de Lyapunov

Para analisar as propriedades de balanço energético do método do ponto médio esférico aplicado na eq. LLG, vamos primeiro considerar que o Campo efetivo  $\mathbf{B}_i$  das eqs. D.1 e 5.22 pode incluir uma contribuição externa com dependência explícita no tempo, isso é:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{B}(\mathbf{r}_i) + \mathbf{B}_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i, t_n) = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \mathbf{m}} + \mathbf{B}_{\text{ext}} = \mathbf{B}_i + \mathbf{B}_{i,n} \quad (\text{D.3})$$

Com esse Campo efetivo local, podemos multiplicar (via produto escalar) ambos os lados da eq. LLG em 2.47 pelos termos de Campo e damping da própria equação, que aparecem no torque como  $\mathbf{W}$  em  $\mathbf{f}_{i,n} = \mathbf{m}_{i,n} \times \mathbf{W}$ . Vamos também considerar a versão normalizada da eq. LLG com  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$ ,  $\mathbf{b} = \mathbf{B}/M_s$ , e o tempo medido em unidades de  $(\gamma M_s)^{-1}$ . Como demonstrado na ref.<sup>92</sup> e também no apêndice B, isso resulta no seguinte balanço de energia para o Campo  $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$ :

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = -\int_V \alpha \left| \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right|^2 d\mathbf{r} - \int_V \mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{b}_{\text{ext}}}{\partial t} d\mathbf{r} \quad (\text{D.4})$$

Em que lembramos que para  $\mathbf{b}_{\text{ext}} = \mathbf{0}$ , a energia é uma função monotonicamente decrescente do tempo, e conservada para  $\alpha = 0$ .

A discretização espacial do volume  $V$  em células micromagnéticas resulta no modelo Hamiltoniano da eq. 5.22, e o balanço de energia do novo sistema discreto equivalente será:

$$\frac{dH}{dt} = -\alpha \sum_i \left| \frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} \right|^2 - \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{b}_{\text{ext}}}{\partial t} \quad (\text{D.5})$$

A regra de balanço de energia subsequente pode ser obtida a partir da discretização temporal dos intervalos  $dt$  de acordo com algum método de integração. Vamos então aplicar o método do ponto médio esférico à eq. D.5. Começamos multiplicando a eq. LLG

pelo termo entre parênteses em sua forma dada pelo método (eq. D.1), chegando a:

$$\frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \cdot \left( -\mathbf{b}_i \left( \frac{\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}}{\|\mathbf{m}_{j,n} + \mathbf{m}_{j,n+1}\|} \right) \right) - \partial_t \mathbf{b}_{i,n} + \alpha \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} + \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} = \mathbf{0} \quad (\text{D.6})$$

Em que novamente usamos  $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = 0$ . Devemos generalizar para o caso onde o Campo externo não necessariamente possui uma forma analítica explícita, e.g pode ser um conjunto de valores fixos por unidade de tempo correspondendo à estimativas experimentais ou uma tabela de números aleatórios ou não gerada previamente. Então vamos aproximar a derivada temporal do Campo externo (que depende explicitamente do tempo, porém não diretamente dos momentos magnéticos), da seguinte forma:

$$\partial_t \mathbf{b}_{i,n} = \frac{\mathbf{b}_{i,n+1} - \mathbf{b}_{i,n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (\text{D.7})$$

Em que usamos diferenças centrais e lembramos que  $n \pm 1 = t_n \pm \Delta t$ . Usamos uma aproximação com erro de ordem 2 para fins de equiparação com o erro da regra esférica. Notemos agora que  $-\mathbf{m}_{i,n+1} \cdot \mathbf{b}_i \approx H_{i,n+1}$  e  $-\mathbf{m}_{i,n} \cdot \mathbf{b}_i \approx H_{i,n}$ , de maneira que a eq. D.6 resulta em:

$$\frac{H_{i,n+1} - H_{i,n}}{\Delta t} = -\alpha \left| \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \right|^2 + \frac{\mathbf{m}_{i,n+1} - \mathbf{m}_{i,n}}{\Delta t} \cdot \frac{\mathbf{b}_{i,n+1} - \mathbf{b}_{i,n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (\text{D.8})$$

A soma de todas as células no índice  $i$  da eq. D.8 demonstra que o balanço de energia no método esférico é igual ao do modelo contínuo até segunda ordem.

Mais importante, podemos observar dois fatos: primeiramente, se o Campo externo for linear em partes, em particular dentro de intervalos de tamanho  $\Delta t$ , então o balanço de energia fornece uma resposta exata (a série da eq. D.7 só possuirá termos lineares). Em segundo lugar, caso o Campo externo seja nulo ou não dependa explicitamente do tempo, a eq. D.8 representa de maneira exata a estrutura de Lyapunov do micromagnetismo, ou seja, o método reproduz de forma exata o caráter monotonicamente decrescente da energia.

A última observação importante é o contraste entre os métodos esférico e clássico no cálculo do balanço de energia da eq. D.8. Apesar de ambos possuírem uma estrutura de Lyapunov, as Hamiltonianas discretas correspondentes ao balanço em cada caso são estritamente diferentes. Para cada um dos casos os argumentos da função equivalem a

uma combinação específica dos momentos em  $(n, n + 1)$ :

$$\begin{aligned} H_{i,k}^{\text{clássico}} &:= H \left( \mathbf{m}_{i,k}, \frac{\mathbf{m}_{j,n+1} + \mathbf{m}_{j,n}}{2} \Big|_j \right) \\ H_{i,k}^{\text{esférico}} &:= H \left( \mathbf{m}_{i,k}, \frac{\mathbf{m}_{j,n+1} + \mathbf{m}_{j,n}}{\|\mathbf{m}_{j,n+1} + \mathbf{m}_{j,n}\|} \Big|_j \right) \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Em que  $k = (n, n + 1)$ . No método clássico, as energias são avaliadas num espaço de fase apenas aproximado de  $(S^2)^N$ , em pontos médios entre pares de momentos magnéticos que não necessariamente coincidem com a curvatura do espaço original do problema.

No entanto, para o método esférico, o espaço de fase de  $H^{\text{esférico}}$  corresponde a uma versão fielmente discretizada do modelo contínuo, cujos pontos são um subconjunto  $S_{disc} \subset (S^2)^N$ . Isso é um fator importante na propriedade simplética do método, pois  $H^{\text{esférico}}$  representa uma perturbação do modelo original, enquanto  $H^{\text{clássico}}$  não, apesar de também possuir uma geometria própria que preserva algumas das boas propriedades da equação LLG (e.g preservar a norma dentro desse espaço de fase alternativo em particular). Essa propriedade está diretamente relacionada com a divisão do vetor na segunda eq. em D.9 pela sua própria norma. Métodos explícitos em contrapartida a ambos, não possuem uma geometria global e divergem em longos tempos de simulação. Note que ambos os vetores de integração da eq. D.9 respeitam a desigualdade do triângulo e conservam a sua norma entre passos temporais, mas só no caso esférico a norma é unitária independentemente da dimensionalidade dos momentos magnéticos escolhida ou da precisão escolhida na aproximação.