

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

Henrique Santiago de Assis

**ANÁLISE DA ESTABILIDADE DE SKYRMIONS EM FILME
ANTIFERROMAGNÉTICO ($KMnF_3/Pt$) CONTENDO IMPUREZAS
MAGNÉTICAS.**

Juiz de Fora

2023

Henrique Santiago de Assis

ANÁLISE DA ESTABILIDADE DE SKYRMIONS EM FILME
ANTIFERROMAGNÉTICO ($KMnF_3/Pt$) CONTENDO IMPUREZAS
MAGNÉTICAS.

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

Orientador: Pablo Zimmermann Coura

Juiz de Fora

2023

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

Assis, Henrique Santiago de.

ANÁLISE DA ESTABILIDADE DE SKYRMIONS EM FILME ANTI-FERROMAGNÉTICO ($KMnF_3/Pt$) CONTENDO IMPUREZAS MAGNÉTICAS. / Henrique Santiago de Assis. – 2023.

73 f. : il.

Orientador: Pablo Zimmermann Coura

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2023.

1. Simulação micromagnética. 2. Skyrmion antiferromagnético. 3. Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert. I. Coura, Pablo Zimmermann, orient. II. Título.

Henrique Santiago de Assis

“Análise da estabilidade de skyrmions em filme antiferromagnético (KMnF₃/Pt) contendo impurezas magnéticas”

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

Aprovada em 12 de julho de 2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Universidade Federal de Minas Gerais

Prof. Dr. Fernando Sato

Universidade Federal de Juiz de Fora

Juiz de Fora, 06/07/2023.



Documento assinado eletronicamente por **Bismarck Vaz da Costa, Usuário Externo**, em 12/07/2023, às 15:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fernando Sato, Professor(a)**, em 12/07/2023, às 15:52, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Pablo Zimmermann Coura, Professor(a)**, em 12/07/2023, às 15:52, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Uffj (www2.uffj.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1355340** e o código CRC **6E3F0333**.

AGRADECIMENTOS

Agradeço inicialmente aos meus pais, Juarez e Vânia por todo apoio e incentivo a minha educação. Agradeço à minha noiva Cyntia por toda compreensão, suporte e carinho durante essa etapa, não tenho palavras para descrever o quanto sou grato por isso. Agradeço ao meu irmão Rubens pelo apoio, ao meu primo Carlos Henrique pelos encontros aos domingos e toda minha família pelo suporte a apoio em toda minha trajetória. Agradeço a minha tia Dionizia que me deu total suporte, moradia e estabilidade em seu lar. Agradeço aos meus amigos Isaac e Robson, companheiros de jornada acadêmica, ao Alessandro e Ícaro que conheci nessa nova caminhada, e aos demais amigos que fiz ao longo dessa jornada. Agradeço aos professores e funcionários do departamento de física da universidade de Juiz de fora, e especialmente agradeço ao meu orientador, prof. Pablo pela paciência e por estar comigo na etapa final do meu estudo e trabalho. Agradeço ao prof. Sidiney, por me apresentar ao grupo e me introduzir nessa linha de pesquisa, no qual foi uma etapa fundamental. Agradeço às agências de fomento FAPEMIG, CAPES e CNPq pelo suporte e auxílio oferecido, para que eu pudesse contribuir para a ciência no Brasil.

“Diga-me e eu esquecerei; ensina-me e eu poderei lembrar; envolva-me e eu aprenderei.”

Benjamin Franklin

RESUMO

Skyrmions magnéticos tiveram sua previsão teórica em 1989, sendo descrita como uma quase-partícula que apresenta propriedades interessantes, que os tornam promissores para aplicações em spintrônica. Isso é devido ao fato de não ser aniquilado facilmente por agitação, variação de temperatura, campo elétrico ou magnético externo. Dentre os skyrmions, temos os skyrmions antiferromagnéticos onde destacam por não apresentarem Efeito Hall de skyrmion em seu movimento e sendo possível controlar sua dinâmica através de uma corrente de spin polarizada, onde alcançam altas velocidades sem ocorrer nenhuma deformação em sua estrutura. Diante disso, realizamos simulações computacionais micromagnéticas para investigar o comportamento de um skyrmion antiferromagnético estabilizado em uma bicamada formada por material trifluoreto de potássio manganês sobre platina $KMnF_3/Pt$. O software utilizado para obter os resultados foi desenvolvido pelo próprio grupo de pesquisa. Preliminarmente, estudamos sua estabilidade e seu comportamento variando determinados parâmetros magnéticos do material, no qual focamos nas seguintes interações: Dzyaloshinskii-Moriya (DM), rigidez de troca (A) e a magnetização de saturação (M_S). Com o resultado das simulações, foi modelado uma nanofita onde ocorre variação de suas propriedades magnéticas localmente, como também variamos sua área e investigamos a resposta do skyrmion a estas modificações. Desta forma, observamos não apenas a fixação do skyrmion, mas também a dispersão para determinados ajustes. E por fim, mostramos que a eficiência de uma armadilha para o skyrmion está ligada diretamente a escolha das propriedades do defeito magnético e de sua área.

Palavras-chave: Simulação micromagnética. Skyrmion antiferromagnético. Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert.

ABSTRACT

Magnetic skyrmions had their theoretical forecast in 1989, being described as a quasi-particle that presents interesting properties, which make them promising for applications in spintronics. This is due to the fact that it isn't easily annihilated by agitation, temperature variation, electric field or external magnetic. Among the skyrmions, we have the antiferromagnetic skyrmions, which drafts because they don't present a skyrmion Hall Effect in their movement and it's possible to control their dynamics through a polarized spin current, where they reach high speeds without any deformation in their structure. Therefore, we performed micromagnetic computational simulations to investigate the behavior of an antiferromagnetic skyrmion stabilized in a bilayer formed by potassium manganese trifluoride material on platinum $KMnF_3/Pt$. The software used to obtain the results was developed by the research group itself. First, we study its stability and behavior, varying certain magnetic parameters of the material we focus on, in the following interactions: Dzyaloshinskii-Moriya (DM), stiffness exchange (A) and the saturation magnetization (M_S). With the result of the simulations, a nanotracks was modeled where variation of its magnetic properties occurs locally, we also varied its area and investigated the response of the skyrmion to these modifications. In this way, we observe not only skyrmion fixation, but also dispersion for certain adjustments. Finally, we showed that the efficiency of a skyrmion trap is directly linked to the choice of magnetic defect properties and its area.

Keywords: Micromagnetic simulation. Antiferromagnetic Skyrmion. Landau-Lifshitz-Gilbert Equation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1 – Representação da orientação dos dipolos magnéticos de um material paramagnético. A direita demonstra a orientação sem campo magnético e a esquerda temos com campo magnético. 21
- Figura 2 – Representação esquemática de domínios magnéticos gerados em um material ferromagnético. As setas na cor azul representam a orientação preferencial dos momentos magnéticos naquela região delimitada. A região ampliada é ilustrada o comportamento dos momentos magnéticos quando a orientação dos momentos é alterada para se alinhar ao domínio vizinho, isso gera o que é conhecido na literatura como parede de domínio. 22
- Figura 3 – Representação da configuração do dipolo magnético, onde a) para um material ferromagnético, e b) para um material antiferromagnético. . . 23
- Figura 4 – Representação da curva de histerese típica para materiais diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos e antiferromagnéticos. 23
- Figura 5 – Representação dos pares de momentos magnéticos que interagem no processo de troca em uma rede ferromagnética. Em preto representa um spin aleatório na rede e em vermelho seus primeiros vizinhos no qual ocorre a interação. 25
- Figura 6 – Representação estrutural em a) célula primitiva $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ e em b) da célula unitária hexagonal. 26
- Figura 7 – Representação esquemática da interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre filmes finos compostos por uma bicamada, onde um é o material ferromagnético (cor cinza) e o outro é um metal com forte acoplamento spin-órbita (cor azul). Observamos que o vetor D_{12} é perpendicular ao plano do triângulo onde é formado por dois sítios magnéticos e um átomo com grande SOC. 28
- Figura 8 – Representação da interação entre dois momentos de dipolo magnético. . 29
- Figura 9 – Imagem representativa do torque de dissipação \vec{T}_D e do toque de precessão \vec{T} agindo sobre o momento magnético de um elétron em torno de um campo magnético externo estático H 34

Figura 10 – Imagem representativa da precessão do momento magnético de um elétron em torno de um campo magnético efetivo \vec{B}^{ef} . Em a) temos a dinâmica não dissipativa $\alpha = 0$. em b) temos a dinâmica dissipativa $\alpha > 0$	35
Figura 11 – Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. a) Sistema real constituído por diversos momentos magnéticos atômicos. b) Sistema reordenado pela aproximação micromagnética.	37
Figura 12 – Representação gráfica do mapeamento da textura do skyrmion ferromagnético. Os spins rotacionam do centro até a borda da textura somente uma vez com quiralidade fixa.	42
Figura 13 – Representação de skyrmions magnéticos com $Q = 1, Q_v = 1$, mas com valores diferentes de helicidade, Q_h . No qual a) e b) são do tipo Néel e c) e d) são do tipo Bloch. Portanto, a) Para $Q_h = 0$, b) Para $Q_h = \pi$, c) Para $Q_h = \pi/2$ e d) Para $Q_h = -\pi/2$	44
Figura 14 – Representação de skyrmions magnéticos com diferentes cargas topológicas, número de vorticidade e número de helicidade, (Q, Q_v, Q_h) . A seta define a direção do momento magnético.	45
Figura 15 – Evolução temporal do skyrmion do tipo Néel em uma fita de Co/Pt . A dimensão da nanofita é 200 nm comprimento por 100 nm de largura. Pelas imagens de a) até d) podemos observar que o movimento do skyrmion é constituído por uma componente perpendicular a corrente aplicada, onde o traço amarelo representa a distância entre o skyrmion e a borda. A densidade de corrente é $j_e = -5 \times 10^{12} A/m^2$	46
Figura 16 – Representação de um skyrmion antiferromagnético. Pode ser visto como a união de dois skyrmions ferromagnéticos de cargas topológicas $Q = +1$ e $Q = -1$	47
Figura 17 – Evolução temporal do skyrmion do tipo Néel em uma fita de $KMnF_3/Pt$. A dimensão da nanofita é 200 nm comprimento por 100 nm de largura. Pelas imagens de a) até c) podemos observar que o movimento do skyrmion não apresenta uma componente perpendicular a corrente aplicada, à vista disso o skyrmion antiferromagnético apresenta um movimento retilíneo. A densidade de corrente é $j_e = -5 \times 10^{12} A/m^2$	48

Figura 18 – Estrutura Cristalina do Trifluoreto de Potássio Manganês. A cor preta representa o elemento K (Potássio), a cor roxa representa o Mn (Manganês) e em azul é o elemento F (Ferro).	50
Figura 19 – Vista esquemática um skyrmion antiferromagnético magnético do tipo Néel estabilizado com os parâmetros de referência do material. A cor verde representa os momentos magnéticos que compõe o skyrmion e em roxo o filme antiferromagnético. O seu raio é de aproximadamente de $5nm$. As imagens da simulação foram geradas através doprograma <i>POV – Ray</i>	51
Figura 20 – Representação gráfica da definição do raio de um skyrmion antiferromagnético	52
Figura 21 – Vista esquemática de um skyrmion antiferromagnético do tipo Néel estabilizado com o parâmetro D alterado. O valor adotado é de $D = 10.0 \times 10^{-4} J/m^2$. Neste caso, o raio é de aproximadamente $10 nm$. . .	52
Figura 22 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro da constante de rigidez de troca (A).	53
Figura 23 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro de magnetização de saturação (M_S).	54
Figura 24 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro de Dzyaloshinskii-Moriya D	54
Figura 25 – Diagrama de fase do skyrmion antiferromagnético em função dos parâmetros K e D . A nanofita tem dimensões de $300 nm$ de comprimento e $100 nm$ de largura. Os pontos em verde representam os valores que o skyrmion é gerado e permanece estável. Os pontos em cor roxa representam os valores onde o skyrmion é gerado, mas ocorre seu colapso. Os pontos em cor azul representam os valores onde ocorre a evolução de skyrmion para texturas magnéticas. Para valores próximos ao de referência foi feito uma variação mais detalhada com o intuito de obter valores que podem auxiliar para ser utilizados para aplicações.	55

- Figura 26 – Evolução temporal do comportamento dos momentos magnéticos em uma nanofita a constante de Dzyaloshinskii-Moriya no valor de $D = 35 \times 10^{-4} J/m^2$ e $K = 9 \times 10^5 J/m^3$. Em a) a configuração em $t = 5ps$. Em b) a configuração em $t = 70ps$. Em c) a configuração em $t = 180ps$. Em d) a configuração em $t = 290ps$. Em e) a configuração em $t = 510ps$. Em f) temos a configuração final da evolução temporal estabilizada de textura magnética aberta, em $t = 810ps$. Essa estrutura gerada, é também conhecida como *wormdomain*. 56
- Figura 27 – Evolução temporal do comportamento dos momentos magnéticos em uma nanofita a constante de Dzyaloshinskii-Moriya no valor de $D = 35 \times 10^{-4} J/m^2$ e $K = 2 \times 10^5 J/m^3$. Em a) a configuração em $t = 5ps$. Em b) a configuração em $t = 15ps$. Em c) a configuração em $t = 25ps$. Em d) a configuração em $t = 35ps$. Em e) a configuração em $t = 50ps$. Em f) temos a configuração final da evolução temporal estabilizada de textura magnética aberta, dada em $t = 810ps$ 57
- Figura 28 – Representação esquemática da condição inicial do skyrmion entre duas regiões magnéticas distintas. Do lado esquerdo representa os parâmetros referentes à $KMnF_3$, do lado direito representa a região que ocorre a alteração dos parâmetros magnéticos A'' , D'' e M_g'' 58
- Figura 29 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região mais escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da magnetização de saturação. Em a) o valor adotado em módulo para a Dzyaloshinskii-Moriya é $D'' = 6 \times 10^{-4} J/m^2$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado em módulo para a Dzyaloshinskii-Moriya é $D'' = 10 \times 10^{-4} J/m^2$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência. 59

Figura 30 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da constante de troca. Em a) O valor adotado em módulo para a constante de troca em módulo no meio 2 é de $A'' = 4,94 \times 10^{-12} J/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado para a constante de troca em módulo é de $A'' = 8,23 \times 10^{-12} J/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência. 59

Figura 31 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região mais escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da magnetização de saturação. Em a) o valor adotado em módulo para a magnetização de saturação em módulo no meio 2 é de $M_s'' = 2,82 \times 10^5 A/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado em módulo para a magnetização de saturação em módulo no meio 2 é de $M_s'' = 4,7 \times 10^5 A/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência. 60

Figura 32 – Representação esquemática da configuração inicial de interação entre um skyrmion e um defeito magnético. Todos os defeitos utilizados apresentam a forma quadrática, para este caso em particular é com área de $529nm^2$ 61

- Figura 33 – Representação esquemática da armadilha de atração para um skyrmion antiferromagnético. A distância centro a centro é dada por $25nm$ e o defeito tem o parâmetro alterado em $A'' = 0.75A$ com área de $529nm^2$. Em a) a configuração inicial é dada com $t = 2ps$. Em b) ilustra a configuração com $25 ps$. Em c) ilustra a configuração com $50 ps$. Em d) ilustra a configuração em $102 ps$. Após esse intervalo, o skyrmion permanece fixado e estabilizado na região do defeito. 62
- Figura 34 – Representação esquemática da armadilha de repulsão para um skyrmion antiferromagnético. A distância centro a centro é dada por $19nm$ e o defeito tem o parâmetro alterado em $A'' = 1.75A$ com área de $529nm^2$. Em a) a configuração inicial é dada com $t = 2ps$. Em b) ilustra a configuração com $25 ps$. Em c) ilustra a configuração com $50 ps$. Em d) ilustra a configuração em $102 ps$. Após esse intervalo, o skyrmion permanece afastado, mas não ocorre mais espalhamento uma vez que a interação magnética não é suficiente para isso. 63
- Figura 35 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. A área do defeito é de $441 nm$ e a dimensão da nanofita de $200 nm$ de comprimento por 100 de largura. Em a) A variação ocorre para o parâmetro D'' . Em b) a variação ocorre para o parâmetro M_S'' . Em c) a variação ocorre para o parâmetro A'' . O intervalo de alteração dos parâmetros foi o mesmo para todos. 65
- Figura 36 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético D em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em a) apresenta um tem carácter repulsivo, enquanto para b) apresenta um carácter atrativo 66
- Figura 37 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético M_S em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em a) apresenta um tem carácter atrativo, enquanto para b) apresenta um carácter repulsivo. 67

Figura 38 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético A em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em *a*) apresenta um tem carácter atrativo, enquanto para *b*) apresenta um carácter repulsivo. 68

SUMÁRIO

1	Introdução	15
2	Fundamentação Teórica	17
2.1	Momento magnético	17
2.2	Propriedades magnéticas dos materiais	19
2.3	Interações em Materiais Magnéticos	24
2.3.1	Interação de Troca de Heisenberg	24
2.3.2	Interação de Dzyaloshinskii-Moriya (IDM)	26
2.3.3	Interação Dipolar	29
2.3.4	Interação de Zeeman	30
2.4	Anisotropia Magnetocristalina	31
2.5	Hamiltoniana do Sistema e Campo Efetivo	31
2.6	Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)	33
3	Simulação Micromagnética	37
4	Skyrmions	42
5	Resultados e Discussões	50
5.0.1	Parâmetros do Material	50
5.0.2	Estudo da Estabilização e do Raio do Skyrmion em Função dos Parâmetros	51
5.0.3	Skyrmion antiferromagnético posicionado entre duas regiões magnéticas	57
5.0.4	Nanofita com um defeito magnético	60
6	Conclusões e Perspectivas Futuras	69
	REFERÊNCIAS	71

1 Introdução

Na história da humanidade, um dos primeiros indícios da aplicação de fenômenos magnéticos foi registrado em 2637 a.C, quando o exército do imperador chinês Huangti utilizava uma carruagem com uma estátua no formato de mulher de braços abertos que girava livremente sempre apontando para o Sul, como uma bússola[1]. Mas, foi somente após dois milênios que Tales de Mileto, filósofo e cientista, estudou os efeitos das propriedades magnéticas de uma pedra, chamada magnetita, dando início aos estudos sobre magnetismo presente em alguns materiais. Dessa maneira, com a contribuição de inúmeros cientistas temos como resultado diversas aplicações em diferentes campos da ciência [2, 3, 4].

Em particular, no campo de armazenamento de dados, o primeiro equipamento feito a partir de gravação magnética, foi criado pela IBM em 1952 [5]. Esse fato marcou a transição das calculadoras de cartão perfurado para computadores eletrônicos, se tornando uma tecnologia indispensável. Isso desencadeou um salto no avanço de dispositivos magnéticos voltados para leitura e gravação de informação, sendo usada como referência até hoje.

Com a evolução das técnicas de síntese e análise de materiais, temos a possibilidade de construção de nanoestruturas magnéticas que dão origem a diversos comportamentos e fenômenos diferentes. Isso gera a possibilidade de diversas propostas para armazenamento e leitura de dados, uma delas é a utilização de skyrmions magnéticos. Estudados inicialmente por Tony H. R Skyrme em um problema física de partículas, ele desenvolveu uma teoria de campo não linear para píons interagentes, e obteve como resultado configurações topologicamente estáveis, chamadas de skyrmions [6, 7]. Em 2009 foi registrado a primeira observação experimental dos skyrmions magnéticos [8], onde a temperatura do material era muito baixa, em torno de -250°C e sob o efeito de um campo magnético externo. No entanto, já é possível gerar e estabilizar skyrmions em temperatura ambiente [9, 10, 11, 12]. Isso o torna um candidato promissor para novos métodos de gravação magnética. Além disso, já existem propostas de aplicação de skyrmions para outras áreas, como computação neuromórfica [13, 14].

Neste trabalho, estudamos algumas propriedades de skyrmions antiferromagnéticos gerados em uma bicamada de Trifluoreto de Potássio Manganês crescido sobre Platina

KMnF₃/Pt. Analisamos como sua estabilização e seu comportamento se dão quando geramos e posicionamos impurezas de forma intencional na nanotrilha. No segundo capítulo, abordaremos uma revisão em torno dos principais conceitos sobre materiais magnéticos e mostraremos as interações necessárias para o surgimento e estabilização do skyrmion magnético. Além disso, obteremos a hamiltoniana que representa o sistema, e usaremos a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) cuja integração descreve a evolução temporal dos momentos magnéticos.

No capítulo três, introduziremos o modelo de simulação micromagnética, sendo forma uma utilizada para descrever materiais em dimensões em escala muito pequena. No capítulo seguinte, faremos uma abordagem geral sobre os skyrmions magnéticos. No capítulo cinco, apresentaremos os resultados obtidos em relação à estabilização dos skyrmions antiferromagnéticos e sua interação com impurezas magnéticas. Por fim, no capítulo seis apresentamos as nossas conclusões.

2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo, iniciaremos abordando os conceitos fundamentais relacionados ao momento magnético e os diferentes tipos de materiais magnéticos. Em seguida, descreveremos as principais interações magnéticas que ocorrem nos materiais e o campo magnético efetivo em cada sítio do material. Por fim, apresentaremos a equação de Landau-Lifstz-Gilbert que descreve a dinâmica de um momento magnético.

2.1 Momento magnético

O magnetismo é um fenômeno, com origem na escala atômica, relacionado aos elétrons que compõem os átomos do material. Para compreender melhor essa definição, considere um elétron carregado que se desloca em movimento circular em torno do núcleo atômico. Assim, podemos definir uma corrente i associada a esse elétron como:

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

onde T é o período da órbita do elétron, e representa o módulo da carga do elétron, r o raio da órbita e v a velocidade linear. O período pode ser reescrito como $T = 2\pi/\omega$, onde ω é a velocidade angular, definida por $\omega = v/r$. Logo, a equação 2.1 pode ser reescrita como,

$$i = -\frac{e\omega}{2\pi}. \quad (2.2)$$

O dipolo magnético de uma espira de área A , sendo percorrido por uma corrente i é definido por:

$$\vec{\mu}_l = iA\hat{n}, \quad (2.3)$$

onde \hat{n} é o versor perpendicular à área. Por analogia, através da órbita gerada pelo movimento do elétron e usando a equação 2.2, o módulo do momento de dipolo magnético orbital pode ser reescrito como:

$$\mu_l = iA = \frac{-e\omega}{2\pi}\pi r^2 = \frac{-e\omega r^2}{2}. \quad (2.4)$$

Classicamente, o momento angular é definido como $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. O termo $\vec{p} = m_e\vec{v}$ representa o vetor momento linear e, como estamos tratando de uma trajetória circular do

elétron, ele será perpendicular ao vetor posição \vec{r} . Dessa maneira, o módulo do momento angular \vec{L} é dado por:

$$L = rp = rm_e v = rvm_e = \omega r^2 m_e. \quad (2.5)$$

Para encontrar uma relação entre o momento magnético orbital e o momento angular, multiplicamos a equação 2.4 por m_e/m_e , e chegamos na seguinte expressão,

$$\mu_l = -\frac{e\omega r^2 m_e}{2 m_e} = -\frac{e\omega r^2 m_e}{2 m_e} = -\frac{e}{2m_e} L. \quad (2.6)$$

Vetorialmente a equação 2.6 é escrita como,

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}. \quad (2.7)$$

A componente orbital do momento angular do elétron em uma direção arbitrária é quantizada, no qual pode assumir valores de $n\hbar$ para $(n=1,2,3,\dots)$ [15]. Associando a direção do momento angular à direção z, o menor valor possível de L , é $L_z = \hbar$, onde \hbar é a constante de Planck reduzida. O módulo com menor valor para μ_l é conhecido como magneton de Bohr [16], é definida por,

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}. \quad (2.8)$$

O elétron também possui um momento angular intrínseco, conhecido como momento angular de spin \vec{S} . A relação entre o momento angular de spin e o momento de dipolo magnético é definida como,

$$\vec{\mu}_s = -g \frac{e}{2m_e} \vec{S} = -\gamma \vec{S}, \quad (2.9)$$

onde g é o fator de Landé e γ é a proporcionalidade giromagnética, definida como $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar}$. O fator de Landé, também conhecido como fator giromagnético ou fator g , é uma grandeza física que descreve a relação entre o momento angular orbital e intrínseco de uma partícula. Neste caso, para o elétron é $g \approx 2$. Diante disso, o momento angular total é dado pela soma individual de cada momento angular \vec{L} e \vec{S} e pode ser expressa como,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (2.10)$$

Portanto, podemos escrever que a relação geral entre o momento magnético atômico e o momento angular total é dada por:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J}. \quad (2.11)$$

2.2 Propriedades magnéticas dos materiais

A capacidade de um material em gerar ou responder a um campo magnético, é determinada pela presença de dipolos magnéticos, que podem ser induzidos pela presença de um campo externo ou por orientação dos elétrons em sua estrutura atômica. Entre as principais propriedades magnéticas estão a suscetibilidade magnética, a magnetização, a permeabilidade magnética e a coercividade. A compreensão dessas propriedades magnéticas é fundamental para o desenvolvimento de novos materiais e tecnologias mais eficientes e avançadas. As equações de Maxwell conseguem descrever todos os fenômenos observados hoje na natureza. A partir delas, temos uma relação entre o campo magnético \vec{H} , campo magnético induzido \vec{B} e a magnetização \vec{M} dada por,

$$\vec{B} = (\vec{M} + \vec{H})\mu_0, \quad (2.12)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. A magnetização é a densidade de momentos magnéticos por unidade de volume, descrita pela equação,

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{m}_i. \quad (2.13)$$

Como podemos perceber, na equação 2.13 utilizamos a letra m para representar os momentos magnéticos, essa mudança é feita para evitar confusão com a constante de permeabilidade magnética do meio μ , por esse motivo, daqui em diante usaremos somente a letra m para representar os momentos magnéticos. Se um determinado material apresentar meio linear, homogêneo e isotrópico (as propriedades físicas independem da direção observada), a magnetização em seu interior é escrita da seguinte maneira,

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}, \quad (2.14)$$

onde a constante χ_m é chamada de susceptibilidade magnética. Utilizando a equação 2.14, podemos reescrever a equação 2.12, ficando da seguinte forma,

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{M} + \vec{H}) = (\chi_m \vec{H} + \vec{H})\mu_0 = (\chi_m + 1)\mu_0 \vec{H} = \vec{H}\mu, \quad (2.15)$$

tal que μ é definido como,

$$\mu = (\chi_m + 1)\mu_0, \quad (2.16)$$

onde μ é conhecida como permeabilidade magnética do meio. O comportamento de um material magnético é determinado por suas interações. Sabendo disso, é classificado cada amostra conforme o comportamento predominante, onde os mais conhecidos são: diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo e o antiferromagnetismo.

O fenômeno diamagnético ocorre em todo material, uma vez que o momento de dipolo induzido (orbital) se alinha antiparalelamente ao campo magnético externo. Isso gera uma diminuição no módulo do campo magnético no interior do material. A susceptibilidade magnética tem um valor muito pequeno e negativo $\chi_m < 0$, chegando a ordem de (10^{-5}) . Vale ressaltar que este efeito pode ser mascarado pelo ferromagnetismo e paramagnetismo, por isso o material só é classificado nessa classe caso não apresente nenhuma outra propriedade predominante.

Já o paramagnetismo ocorre em materiais que contêm átomos com elétrons desemparelhados e, ao contrário do diamagnetismo, os dipolos magnéticos se orientam na mesma direção do campo magnético externo aplicado. A susceptibilidade magnética é positiva, mas muito pequena $\chi_m \ll 1$. Desta forma, entende-se que o paramagneto somente irá manifestar uma magnetização líquida caso haja um campo externo. Não existindo campo, os momentos magnéticos tem orientação aleatória, conforme ilustrado na figura 1.

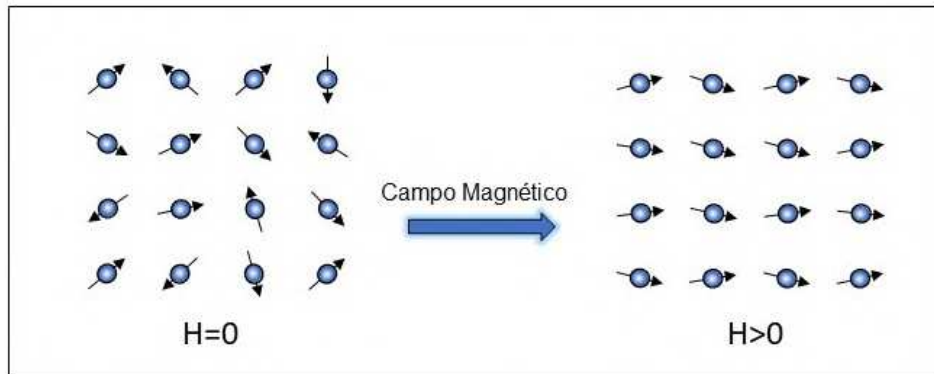


Figura 1 – Representação da orientação dos dipolos magnéticos de um material paramagnético. A direita demonstra a orientação sem campo magnético e a esquerda temos com campo magnético.

Imagem adaptada da fonte [17]

Outra classe de materiais, é a dos ferromagnéticos, os quais apresentam magnetização líquida. Isso provém da interação de troca que é de curto alcance e intensa, fazendo com que os momentos magnéticos se alinhem paralelamente se sobrepondo em relação as outras interações. Mas devido à competição com a interação dipolar que é de longo alcance e fraca, e dependendo da temperatura, é possível a formação de domínios magnéticos, conforme ilustrado na figura 2. A susceptibilidade magnética dessa classe de materiais é alta $\chi_m \gg 1$, em comparação aos outros tipos.

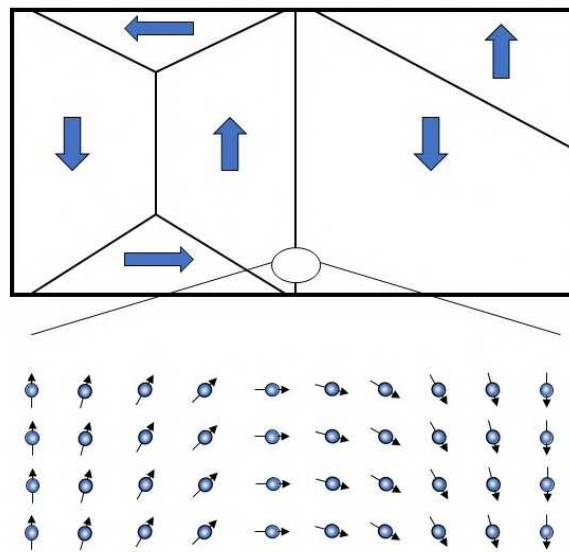


Figura 2 – Representação esquemática de domínios magnéticos gerados em um material ferromagnético. As setas na cor azul representam a orientação preferencial dos momentos magnéticos naquela região delimitada. A região ampliada é ilustrada o comportamento dos momentos magnéticos quando a orientação dos momentos é alterada para se alinhar ao domínio vizinho, isso gera o que é conhecido na literatura como parede de domínio.

Imagem adaptada da fonte [18]

Uma característica dos ferromagnetos é que, à medida que sua temperatura é elevada, chega um momento que ele deixa de apresentar características ferromagnéticas e começa a se comportar como um paramagneto, pois o seu ordenamento magnético é dissolvido. A temperatura que provoca essa transição de fase magnética é conhecida como temperatura de Curie T_c .

Por último, temos a classe dos materiais antiferromagnéticos. Seu comportamento é ditado pelo ordenamento dos momentos magnéticos vizinhos que estão alinhados de forma antiparalela, sem a necessidade de um campo externo para definir sua orientação. Para a situação de elevadas temperaturas ocorre o caso semelhante ao dos materiais ferromagnéticos, onde há a transição para o comportamento paramagnético. Porém, a temperatura de transição é conhecida como temperatura de Néel T_s . A figura 3 ilustra, de forma comparativa, o comportamento ferromagnético e antiferromagnético sem a presença de um campo magnético externo.

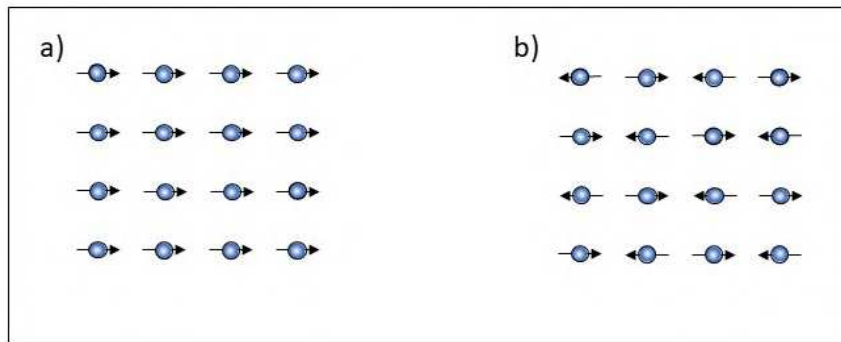


Figura 3 – Representação da configuração do dipolo magnético, onde a) para um material ferromagnético, e b) para um material antiferromagnético.

Imagem adaptada da fonte [17].

Um resultado importante desses comportamentos magnéticos é como ele responde mediante um campo externo até ocorrer uma saturação da magnetização pois, após essa saturação, mesmo aumentando o campo externo, não ocorre nenhum aumento da magnetização. Uma forma de descrever esse comportamento é através da curva de histerese. A figura 4 ilustra o comportamento para todas as classes comentadas.

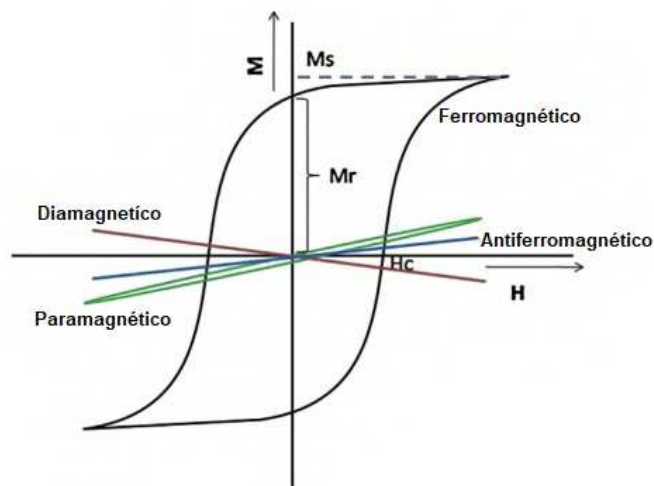


Figura 4 – Representação da curva de histerese típica para materiais diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos e antiferromagnéticos.

Imagem adaptada da fonte [17].

Na figura 4 temos três parâmetros: a magnetização de saturação M_s , que representa o estado onde não se pode mais aumentar a magnetização; a magnetização remanescente

M_r , é a magnetização resultante depois que é retirado o campo externo; e a coercitividade H_c , é o campo magnético necessário para anular sua magnetização.

2.3 Interações em Materiais Magnéticos

2.3.1 Interação de Troca de Heisenberg

Descoberta em 1926 por Heisenberg e Dirac, a interação de troca ou "exchange", é caracterizada por ser uma consequência direta da repulsão coulombiana entre elétrons e o princípio de exclusão de Pauli. Essa interação é responsável pelo ordenamento local dos momentos magnéticos, e é definida por,

$$U^{tr} = -\frac{J_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.17)$$

onde o termo J_{12} é a constante de acoplamento de troca, apresentando dimensão de energia e S_1 e S_2 os momentos angulares intrínsecos dos elétrons. No entanto, em um sistema real não temos apenas dois sítios e sim N sítios, portanto para um sistema geral, a equação pode ser reescrita da seguinte maneira

$$U^{tr} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.18)$$

também conhecida como modelo de Heisenberg. Os termos \vec{S}_i e \vec{S}_j são os momentos angulares de spin localizados nos sítios i e j , respectivamente. Inicialmente, o termo $1/2$ foi inserido com a finalidade de não contar a mesma interação duas vezes. O índice $\langle i, j \rangle$, representa, exclusivamente, a soma dos primeiros vizinhos. Isso se dá porque a definição do termo J_{ij} , que representa a superposição das autofunções de elétrons, decaem rapidamente a zero, à medida que aumenta a distância entre os vizinhos [19]. A figura 5 representa a interação que ocorre entre um spin aleatório na nanofita e seu vizinho em uma rede ferromagnética.



Figura 5 – Representação dos pares de momentos magnéticos que interagem no processo de troca em uma rede ferromagnética. Em preto representa um spin aleatório na rede e em vermelho seus primeiros vizinhos no qual ocorre a interação.

Portanto, consideramos apenas duas situações possíveis:

$$J_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{além dos primeiros vizinhos.} \\ J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos.} \end{cases} \quad (2.19)$$

Para reescrever a equação 2.18 em termos do momento magnético utilizamos a equação 2.9 e assumimos que o momento magnético tem o mesmo módulo para qualquer sítio da rede. Logo, o versor do momento magnético é definido como:

$$\hat{m}_i = \frac{\vec{m}_i}{|\vec{m}_i|} = \frac{\vec{m}_i}{m_i}. \quad (2.20)$$

Desta forma, ao substituir o termo na equação 2.18, a energia de interação de troca é escrita da seguinte maneira,

$$U^{tr} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J}{\hbar^2} \left(\frac{\vec{m}_i}{\gamma} \right) \cdot \left(\frac{\vec{m}_j}{\gamma} \right) = -\frac{J}{2} \left(\frac{m}{\hbar\gamma} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.21)$$

O termo $\frac{m}{\hbar\gamma}$ é adimensional, então estabelecemos a seguinte relação,

$$\sigma = \frac{m}{\hbar\gamma}, \quad (2.22)$$

onde este parâmetro se refere ao módulo do momento magnético normalizado. Portanto, a energia de troca em função dos momentos magnéticos é dada como:

$$U^{tr} = -\frac{J\sigma^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.23)$$

É usual absorver o fator adimensional na constante de acoplamento de troca $J\sigma^2 \rightarrow J$ [20]. Logo, a equação fica reescrita como:

$$U^{tr} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.24)$$

Para o caso $J < 0$ os momentos se alinham antiparalelamente, caracterizando um material antiferromagnético. Para o caso $J > 0$, a energia do sistema será mínima, favorecendo o alinhamento paralelo dos momentos. No entanto, se considerar apenas esta equação não é possível especificar uma direção preferencial para os momentos magnéticos.

2.3.2 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya (IDM)

Em 1957, Dzyaloshinskii observou que o material antiferromagnético $\alpha - Fe_2O_3$, e os carbonatos $CoCO_3$ e $MnCO_3$ apresentavam magnetização espontânea. Contudo, o momento magnético apresentado era excepcionalmente pequeno[21]. Este fenômeno levou o nome de ferromagnetismo fraco, que por sua vez, tem como origem somente fundamentos simétricos, sendo inerentemente fenomenológico. Isso era devido à falta de simetria de inversão espacial apresentado por esses materiais, onde é possível explicar esta origem através da rotação das estruturas magnéticas provenientes de acoplamentos anti-simétricos. Uma forma para compreender a quebra de simetria é observando a figura 6, ela representa a ilustração das células primitivas romboédricas de uma hematita e das células trigonal-hexagonais do material $\alpha - Fe_2O_3$ [7].

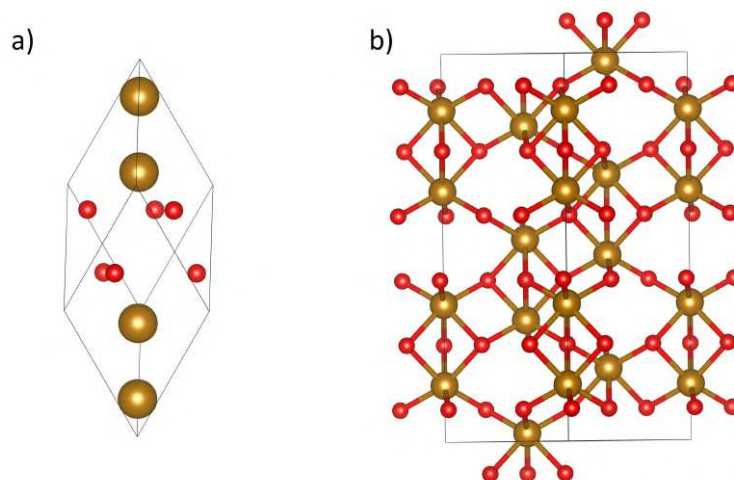


Figura 6 – Representação estrutural em a) célula primitiva $\alpha - Fe_2O_3$ e em b) da célula unitária hexagonal.

Posteriormente, Tôru Moriya em seu estudo sobre a interação de supertroca anisotrópica e o ferromagnetismo fraco [22], explicou a razão desse fenômeno através de acoplamento spin-órbita. No mesmo trabalho, propôs a equação energia de troca antissimétrica entre spins da rede, definida por:

$$U^{IDM} = -\vec{D}_{ij}^{dzy} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_j), \quad (2.25)$$

onde \vec{D} é um vetor de acoplamento constante dependente da simetria do material, \vec{m}_1 é o momento magnético adimensional situado no sítio 1 e \vec{m}_2 é o momento magnético adimensional situado no sítio 2. Essa simetria coloca limitações no vetor \vec{D} , e Moriya desenvolveu cinco regras para definir a direção do vetor \vec{D} [22, 23]. Ele considerou dois íons situados na mesma rede posicionados nos pontos A e B, respectivamente, e que o ponto médio entre eles seja dado por C. Pelas regras, temos as seguintes possibilidades:

1. Quando o centro de inversão estiver localizado em C,

$$\vec{D}_{ij}^{dzy} = 0.$$

2. Quando há um plano de reflexão perpendicular a A e B que passa por C,

$$\vec{D}_{ij}^{dzy} \text{ é } \perp \text{ ao plano ou } \vec{D}_{ij} \text{ é } \parallel \text{ a AB.}$$

3. Quando há um plano de reflexão que passa por A ou B,

$$\vec{D}_{ij}^{dzy} \text{ é } \perp \text{ ao plano.}$$

4. Quando há um eixo de dupla rotação perpendicular a AB que passa por C,

$$\vec{D}_{ij}^{dzy} \text{ é } \perp \text{ a este eixo.}$$

5. Quando há um eixo de n rotações, com $n > 2$ ao longo de AB,

$$\vec{D}_{ij}^{dzy} \text{ é } \parallel \text{ a AB.}$$

É importante ressaltar, que para materiais que possuem uma alta simetria cristalo-gráfica, o vetor de acoplamento é nulo. Além disso, a IDM pode ser induzida na interface de filmes finos magnéticos. Isso é devido à troca indireta de três sítios distintos, onde dois sítios são referentes aos momentos magnéticos m_1 e m_2 pertencentes ao material

ferromagnético ou antiferromagnético, e o terceiro sítio é do átomo vizinho (outra camada) com um forte acoplamento spin-órbita (SOC), gerando um vetor D_{ij} perpendicular a m_1 e m_2 . Uma representação esquemática dessa interação é dada pela figura 7.

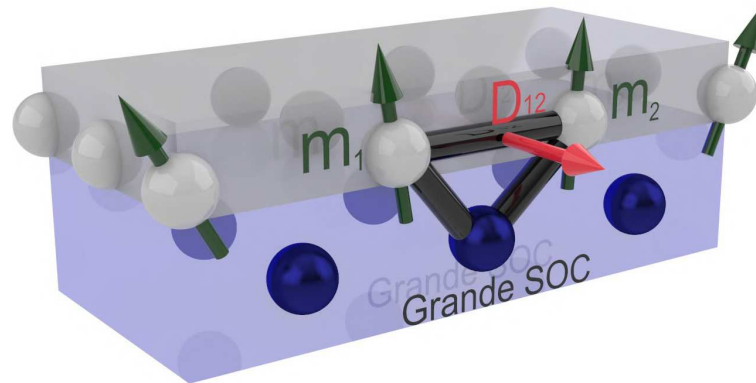


Figura 7 – Representação esquemática da interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre filmes finos compostos por uma bicamada, onde um é o material ferromagnético (cor cinza) e o outro é um metal com forte acoplamento spin-órbita (cor azul). Observamos que o vetor D_{12} é perpendicular ao plano do triângulo onde é formado por dois sítios magnéticos e um átomo com grande SOC.

Para calcular a energia total da IDM em um material com N sítios, a equação é expressa da seguinte maneira:

$$U^{IDM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij}^{dzy} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_j). \quad (2.26)$$

O somatório engloba somente os spins vizinhos dentro da mesma camada e os pares intercalares para camadas acima ou abaixo. Reiteramos que o termo $1/2$ impede a contagem da mesma interação duas vezes. É possível observar que a energia será minimizada quando a orientação dos spins forem ortogonais, ou seja, a IDM tende desalinhar os momentos magnéticos, mas a interação de troca tende a alinhá-los. Desta forma há uma competição entre interações, gerando texturas magnéticas rotacionais de quiralidade definida como, por exemplo, os skyrmions. A IDM é usualmente escrita em função dos versores dos momentos magnéticos, logo a energia total é reescrita como,

$$U^{IDM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} |\vec{D}_{ij}| \{ \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j) \}, \quad (2.27)$$

onde $\vec{D}_{ij} = |\vec{D}_{ij}| \hat{d}_{ij}$. O vetor \hat{d}_{ij} é igual a $\hat{r}_{ij} \times \hat{z}$, em que \hat{r}_{ij} é o vetor unitário que liga os sítios i e j na mesma camada e \hat{z} é o versor perpendicular a superfície da multicamada.

mada determinado pela regra de Moriya. O termo $|\vec{D}_{ij}|$ é a magnitude de interação de Dzyaloshinskii-Moriya para um material que varia com sua espessura. Com o controle de espessura do filme fino com grande acoplamento spin-órbita, é possível ajustar a interação quiral interfacial e ter um domínio sobre o tamanho do skyrmion, se tornando um dos mecanismos mais importantes para sua estruturação.

2.3.3 Interação Dipolar

De origem clássica, a interação dipolar ocorre entre dois momentos magnéticos que estão separadas por uma determinada distância. Inicialmente, considere um dipolo magnético localizado em \vec{r}_i , ele gera uma indução magnética em um ponto aleatório \vec{r}_j dada por,

$$\vec{B}_i(\vec{r}_j) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij}}{r_{ij}^3} - \frac{\vec{m}_i}{r_{ij}^3} \right], \quad (2.28)$$

onde consideramos que,

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|}. \quad (2.29)$$

Se o momento de dipolo magnético \vec{m}_i interagir com um momento \vec{m}_j localizado em \vec{r}_j , como é visto na figura 8, a energia de interação entre eles é definida como:

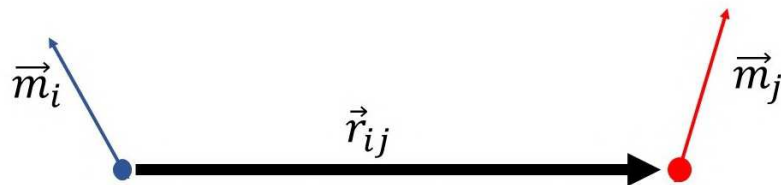


Figura 8 – Representação da interação entre dois momentos de dipolo magnético.

$$U^{par} = -\vec{m}_j \cdot \vec{B}_i(\vec{r}_j). \quad (2.30)$$

Portanto, a energia de interação entre dois momentos magnéticos \vec{m}_i e m_j explicitamente é

$$U^{par} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{m}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{m}_j)}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.31)$$

A energia de interação entre o momento \vec{m}_i e os demais momentos \vec{m}_j do material é representada por,

$$U^{dip} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{m}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{m}_j)}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.32)$$

Esta é a equação que representa a energia dipolar total do sistema. O termo $1/2$ foi adicionado para evitar contar a mesma interação duas vezes. A distância entre dois dipolos pode ser reescrita em função do parâmetro de rede a , onde ele representa a menor distância entre dois sítios atômicos situados na rede. Desta forma, r_{ij} pode ser definido como,

$$r_{ij} = \rho_{ij}a, \quad (2.33)$$

onde ρ_{ij} é a distância relativa adimensional. Substituindo a equação 2.33 na equação 2.32, obtemos a expressão geral da interação dipolar em função do parâmetro de rede,

$$U^{dip} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^3} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} - 3 \frac{(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_j)}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (2.34)$$

Como já dito anteriormente, esta interação ocorre entre todos os pares de momentos que constituem a rede. Portanto, ela é considerada uma interação de longo alcance que decai com o inverso de r_{ij}^3 . Ao analisar separadamente cada termo da equação 2.34, para ocorrer a minimização de energia, observamos que o primeiro termo tende a alinhar os momentos magnéticos antiparalelamente e o segundo termo, devido ao produto escalar, tende a alinhar os momentos na direção que une esses momentos, ficando paralelos entre si.

2.3.4 Interação de Zeeman

A interação de Zeeman é proveniente de um fator externo, isto é, causada por um campo magnético externo \vec{H}^{ext} que interage com os momentos magnéticos do material. A energia é calculada através da contribuição de cada momento magnético individual que interage com o campo externo,

$$U^{zee} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} = -\mu_0 \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_i^{ext}. \quad (2.35)$$

também conhecida como energia de interação Zeeman. Vale ressaltar, para se obter a minimização de energia, os momentos magnéticos devem estar o mais alinhado possível em relação ao campo. Os momentos magnéticos só poderão se alinhar totalmente com o caso se a temperatura do material for $T = 0$, caso contrário, a temperatura gera oscilações que faz os momentos magnéticos saírem da condição de equilíbrio. Quanto maior for a temperatura, menor será a magnetização induzida pelo campo externo.

2.4 Anisotropia Magnetocristalina

A anisotropia magnetocristalina é um fenômeno intrínseco dos materiais, no qual é responsável por manter uma tendência na orientação dos momentos magnéticos em uma direção específica. Essa direção é dependente das características estruturais da rede cristalina. Para os materiais que exibem a predominância em algum eixo são conhecidos como de materiais magnéticos duros, e aqueles que apresentam anisotropia muito baixa ou nenhuma, são chamados de materiais magnéticos macios. Para descrever a energia de um sistema discreto, temos que:

$$U^{ani} = - \sum_{\langle i \rangle}^N K_i (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (2.36)$$

onde K_i representa a constante uniaxial e \hat{n} tem a direção do eixo fácil, que para o nosso caso será o eixo z [7, 24].

2.5 Hamiltoniana do Sistema e Campo Efetivo

A Hamiltoniana do sistema é dada pela soma de todas as interações magnéticas entre os momentos do material, em particular, no material trabalhado estão contidas as interações de troca, Dzyaloshinskii-Morya (IDM), dipolo-dipolo e anisotropia magnética. A energia de interação Zeeman não entra, pois o nosso sistema não levamos em consideração o efeito de um campo magnético externo. Logo a Hamiltoniana em função do vetor momento magnético situado no sítio i é dada por,

$$\mathcal{H} = U^{IDM} + U^{tr} + U^{ani} + U^{dip}. \quad (2.37)$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -\frac{1}{2m^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N [\vec{m}_i \cdot (\vec{m}_j \times \vec{d}_{ij})] \\
& -\frac{J}{2m^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N (\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) \\
& -\frac{1}{m^2} \sum_{\langle i \rangle}^N K_i (\vec{m}_i \cdot \hat{z})^2 \\
& + \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \tag{2.38}
\end{aligned}$$

onde foi aplicado a identidade vetorial,

$$\vec{d}_{ij} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_j) = \vec{m}_i \cdot (\vec{m}_j \times \vec{d}_{ij}). \tag{2.39}$$

Como vimos, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya é primordial para a estabilização do skyrmion magnético. No entanto, ela não é suficiente para isso. Para compensar essa deficiência, é possível de duas maneiras. A primeira é quando o material contém uma forte anisotropia magnetocristalina de eixo. A segunda seria ter um campo magnético externo que force o alinhamento dos momentos magnéticos perpendicularmente à superfície do filme. Para determinar o campo efetivo local no qual o momento magnético \vec{m}_i está submetido, podemos encontrar calculado a derivada das contribuições individuais das interações na Hamiltoniana, logo,

$$\vec{B}_i^{ef} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{m}_i}. \tag{2.40}$$

Substituindo a equação 2.38 na relação acima, chegamos que o campo efetivo local pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\vec{B}_i^{ef} = & +\frac{1}{m^2} \sum_{\langle j \rangle}^N (\vec{m}_j \times \vec{d}_{ij}) \\
& +\frac{J}{m^2} \sum_{\langle j \rangle}^N (\vec{m}_j) \\
& +2K_i \hat{z} (\vec{m}_i \cdot \hat{z}) \\
& +\frac{\mu_0}{4\pi a^3} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[3 \frac{(\vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} - \frac{\vec{m}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \tag{2.41}
\end{aligned}$$

Como estamos tratando apenas de uma interação de um único sítio, o terceiro termo não utiliza um somatório, pois a contribuição é associada ao próprio sítio.

2.6 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert é uma equação diferencial que descreve a evolução temporal da magnetização de um material magnético. É usada para modelar o comportamento sob a influência de campos magnéticos internos e até externos. Para o nosso trabalho, a equação de *LLG* é a que utilizamos para investigar o comportamento e a estabilidade dos skyrmions na nanofita. Inicialmente, o comportamento de precessão de magnetização pode ser descrita através da dinâmica clássica. A equação que descreve o movimento de rotação de um corpo rígido é expressa por,

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}, \quad (2.42)$$

onde \vec{L} é o momento angular do corpo rígido e \vec{T} é o torque exercido sobre ele. Essa equação é igualmente válida na mecânica quântica, de forma que \vec{L} e \vec{T} podem ser reinterpretados como operadores no espaço de Hilbert [25]. Deste modo, podemos substituir o momento angular \vec{L} pelo operador de spin \vec{S} ,

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T}. \quad (2.43)$$

Na presença de um campo magnético, o momento magnético é afetado por um torque dado por $\vec{m} \times \vec{B}^{ef}$, onde o campo \vec{B}^{ef} representa o campo efetivo local, obtida na equação 2.41, e usando a relação entre o momento magnético e o momento angular de spin visto na equação 2.9, obtemos a seguinte expressão,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\vec{m} \times \vec{B}^{ef}. \quad (2.44)$$

Essa equação retrata a precessão magnética circular contínua do momento magnético, uma vez que ela não descreve o alinhamento do momento com o campo. A fim de considerar os mecanismos de dissipação, Landau e Lifshitz (*LL*) no trabalho "On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies"[26], introduziram um termo puramente fenomenológico, que retratava o alinhamento do momento magnético com o campo magnético efetivo [27, 28, 29], representada por,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\vec{m} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \left[\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{B}^{ef}) \right] (LL). \quad (2.45)$$

No entanto, ela condiz somente para a classe de materiais com um parâmetro de amortecimento de Gilbert (*damping*) muito pequeno ($\alpha \ll 1$). Esse parâmetro de *damping* representa o amortecimento característico do material. Embora a equação 2.45 descreva bem a dinâmica para determinados casos, ela não consegue prever o alinhamento completo do momento magnético com o campo. Gilbert em 1955 [25], para resolver essa questão, propôs alterar o termo que representa o torque de amortecimento, definindo como,

$$\vec{T}_D = \frac{\alpha}{\gamma|\vec{m}|} \left[\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right]. \quad (2.46)$$

Esse torque descreve o alinhamento entre \vec{m} com \vec{B}^{ef} , no qual ele é perpendicular ao torque de precessão e o momento magnético, conforme mostrado na figura 9.

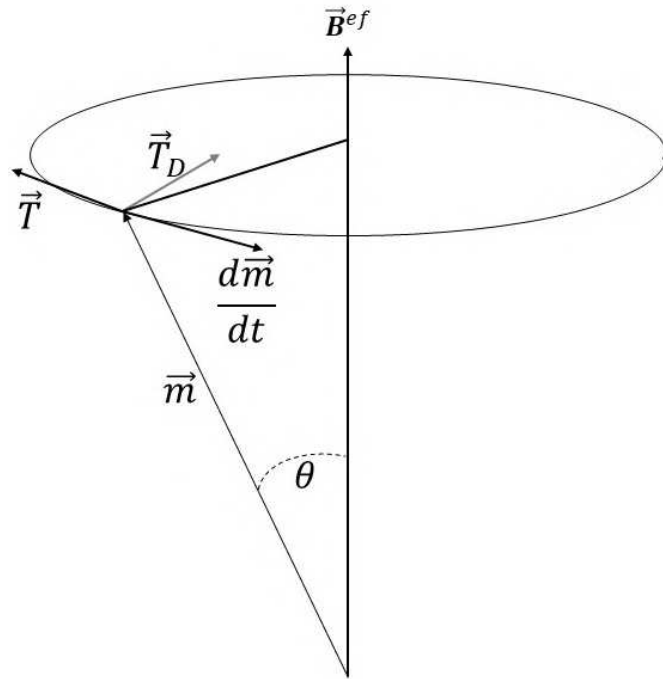


Figura 9 – Imagem representativa do torque de dissipação \vec{T}_D e do torque de precessão \vec{T} agindo sobre o momento magnético de um elétron em torno de um campo magnético externo estático H.

Portanto, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (*LLG*) é dada por,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = -\vec{m} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\gamma|\vec{m}|} \left[\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right] \quad (LLG). \quad (2.47)$$

Ao olharmos a evolução temporal do momento magnético com dissipação ($\alpha > 0$) em torno de um campo, o momento magnético descreve uma precessão amortecida, espiralando em torno do campo até ficar no mesmo sentido. Contudo, se não houver dissipação ($\alpha = 0$),

o momento magnético apenas faz um movimento de precessão. Esse comportamento é ilustrado na figura 10.

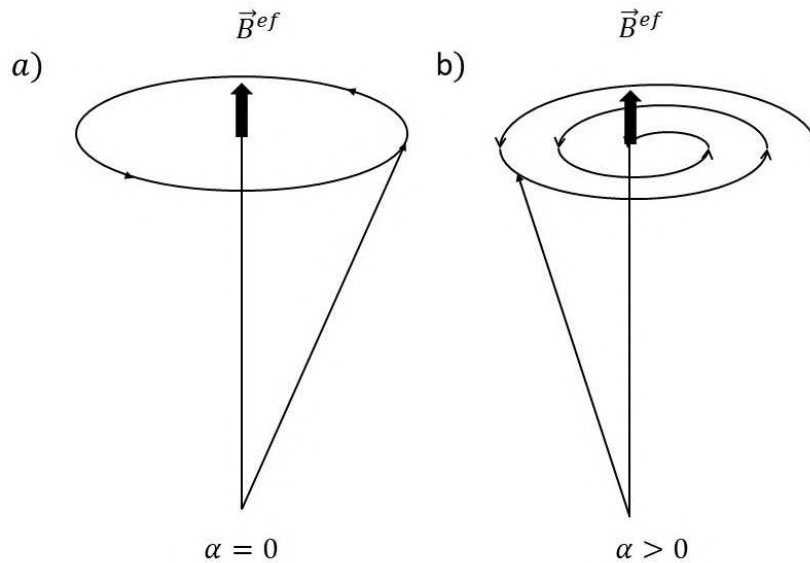


Figura 10 – Imagem representativa da precessão do momento magnético de um elétron em torno de um campo magnético efetivo \vec{B}^{ef} . Em a) temos a dinâmica não dissipativa $\alpha = 0$, em b) temos a dinâmica dissipativa $\alpha > 0$

Para obter a forma explícita da equação de *LLG*, é necessário reescrever a equação somente nos termos da variação momento magnético em relação ao tempo isolado. Para isso, tomamos inicialmente o produto vetorial de \vec{m} em ambos os lados da equação 2.47.

$$\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \left[\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{B}^{ef}) \right] + \frac{\alpha}{|\vec{m}|} \left[\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \right]. \quad (2.48)$$

Utilizando a identidade vetorial $\vec{A} \times \vec{B} \times \vec{C} = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$ para o último termo da equação 2.48, e considerando $\vec{A} = \vec{B} = \vec{m}$ e $\vec{C} = \frac{d\vec{m}}{dt}$, temos que

$$\vec{m} \times \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = \left(\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \vec{m} - (\vec{m} \cdot \vec{m}) \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (2.49)$$

onde o termo $\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} = 0$, pois o produto escalar da orientação do momento magnético com a sua variação no tempo são perpendiculares. Ao substituir 2.49 na 2.48, obtemos,

$$\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \left[\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{B}^{ef}) \right] - \alpha |\vec{m}| \frac{d\vec{m}}{dt}, \quad (2.50)$$

substituindo agora o termo $\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt}$ na equação 2.47, obtemos

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \vec{m} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\gamma |\vec{m}|} \left\{ \gamma \left[\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{B}^{ef}) \right] - \alpha |\vec{m}| \frac{d\vec{m}}{dt} \right\} \quad (2.51)$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} + \alpha^2 \frac{d\vec{m}}{dt} = \vec{m} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\gamma |\vec{m}|} \left\{ \gamma \left[\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{B}^{ef} \right) \right] \right\} \quad (2.52)$$

isolando $d\vec{m}/dt$

$$\frac{d\vec{m}}{dt} (1 + \alpha^2) = \gamma \left(\vec{m} \times \vec{B}^{ef} \right) + \frac{\alpha \gamma}{|\vec{m}|} \left\{ \left[\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{B}^{ef} \right) \right] \right\}, \quad (2.53)$$

finalmente chegamos a forma explícita de LLG

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \left(\vec{m} \times \vec{B}^{ef} \right) + \frac{\alpha \gamma}{(1 + \alpha^2) |\vec{m}|} \left\{ \left[\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{B}^{ef} \right) \right] \right\}. \quad (2.54)$$

3 Simulação Micromagnética

A simulação computacional é uma ferramenta utilizada para auxiliar pesquisas experimentais, pois ela permite reproduzir e realizar previsões com precisão. Dessa maneira, traz uma economia de recursos financeiros e tempo, sem perder a eficiência na obtenção de resultados. A simulação micromagnética aborda de forma semi-clássica materiais que chegam na escala de nanômetros. Seria possível utilizar a mecânica quântica para resolver, mas o procedimento para obter os resultados é muito complexo, tornando inviável sua utilização.

Para descrever uma simulação micromagnética de uma determinada amostra é usado um campo clássico de vetores $\vec{M}(\vec{r}, t)$, onde \vec{M} corresponde as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos. O sistema é particionado em células de trabalho onde cada célula representa uma quantidade significativa de momentos magnéticos. Na figura 11 é possível observar como ocorre a discretização em duas dimensões. Porém, é comum as simulações abordarem células tridimensionais.

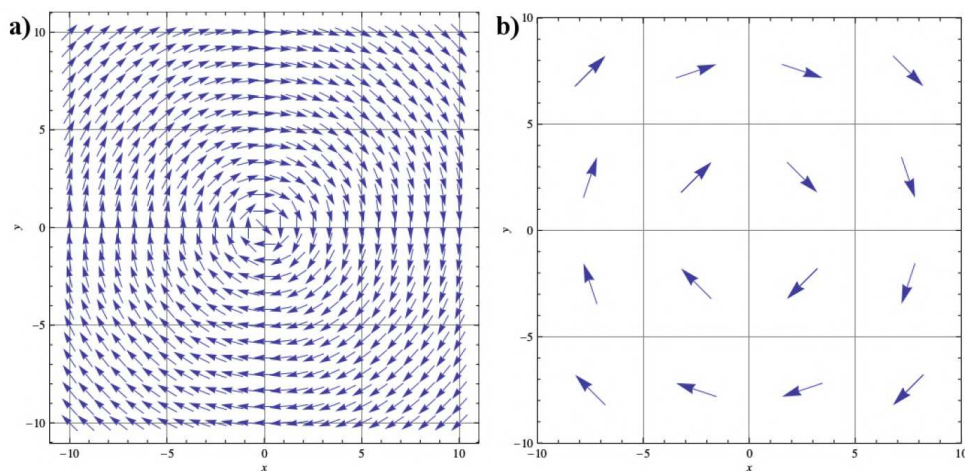


Figura 11 – Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. a) Sistema real constituído por diversos momentos magnéticos atômicos. b) Sistema reordenado pela aproximação micromagnética.

Adaptada da referência [19].

Cada célula de trabalho é definida com um volume $V_{cel} = a^3$ onde todos os momentos magnéticos estão orientados no mesmo sentido. O termo a representa o tamanho da aresta da célula, também conhecido como parâmetro de rede. Dessa forma a magnetização resultante local pode ser calculada da seguinte maneira,

$$\vec{M}_i = \frac{1}{V_{cel}} \sum_k \vec{m}_k = \frac{1}{V_{cel}} \vec{m}_i, \quad (3.1)$$

onde cada cédula pode conter até dez mil momentos magnéticos atômicos, representados somente por um único momento, \vec{m}_i . Portanto, é possível abordar a simulação através das interações entre os momentos magnéticos das células ao invés de tratar as interações entre os momentos magnéticos atômicos. Essa consideração assume que os momentos magnéticos estão saturados no valor de M_s que depende de cada material. Então os momentos magnéticos podem ser escritos como,

$$\vec{M}_i = M_s \hat{m}_i, \quad (3.2)$$

Ao substituir 3.2 na equação 3.1, o momento magnético pode ser reescrito como

$$\vec{m}_i = |\vec{m}_i| \hat{m}_i = (M_s V_{cel}) \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i, \quad (3.3)$$

onde m_{cel} é o módulo do momento magnético da célula micromagnética. Como o sistema magnético agora está redefinido em células micromagnéticas, é necessário renormalizar os termos das interações para ficar coerente com o conceito do micromagnetismo, até porque as propriedades magnéticas devem se manter após a discretização. Para dar início, devemos definir o tamanho da aresta da célula, no qual não pode ser nem pequena ou grande demais, pois os momentos magnéticos no volume definido devem estar no mesmo sentido e simultaneamente deve conter um grande número de momentos magnéticos. Para definir o tamanho, a escolha é atrelada ao parâmetro comprimento de troca λ_{tr} , que oferece um indício do alcance da interação de troca, isto é, até que distância é possível garantir a precisão do paralelismo dos momentos magnéticos atômicos. O comprimento de troca de um determinado material é dado por,

$$\lambda_{tr} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}, \quad (3.4)$$

onde A é a constante de rigidez de troca, que representa a interação entre dois sítios situados na mesma rede ou entre duas redes. Para determinar a escolha adequada, é usual utilizar a seguinte relação $a < \lambda_{tr}$, no qual o parâmetro de rede deve ser menor que o comprimento de troca. Com essa consideração é possível afirmar que os momentos magnéticos atômicos estarão saturados na célula de trabalho. Quando modificamos o parâmetro de rede, é necessário renormalizar as constantes das interações envolvidas. Essa

mudança não gera alteração das propriedades das interações magnéticas. Portanto, a equação da energia de troca renormalizada pode ser reescrita da seguinte forma,

$$U = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) = -\frac{2aA}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j), \quad (3.5)$$

onde $J_{cel} = 2aA$ é definida como a constante de troca efetiva entre as células do sistema [30]. Para a interação dipolar, a equação 2.34 já está escrita em função do parâmetro de rede, mas usando a relação da equação 3.3, ela fica reescrita como,

$$U^{dip} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(\mu_0 M_s a^3)^2}{4\pi a_0^3} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} - 3 \frac{(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_j)}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (3.6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N M_{cel} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} - 3 \frac{(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{m}_j)}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (3.7)$$

O termo M_{cel} é definido como o parâmetro de interação dipolar normalizado, sendo:

$$M_{cel} = a^3 \frac{\mu_0 M_s^2}{4\pi}. \quad (3.8)$$

Já para a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, partindo da equação 2.27, o termo de energia da IDM é reescrita como,

$$U^{IDM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} D_{cel} \left\{ \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j) \right\}, \quad (3.9)$$

onde D_{cel} é o parâmetro da interação Dzyaloshinskii-Moriya definida como,

$$D_{cel} = a^2 D_{ij}. \quad (3.10)$$

Por último, temos a interação de anisotropia magnetocristalina, de acordo com a equação 2.36, o termo de energia da anisotropia magnetocristalina é reescrito da seguinte forma,

$$U^{ani} = -\sum_i^N K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (3.11)$$

onde o termo K_{cel} representa a magnitude da interação anisotrópica, definida como [7],

$$K_{cel} = a^3 K_i. \quad (3.12)$$

Desse modo, a hamiltoniana micromagnética que descreve as interações entre os momentos magnéticos do sistema que usaremos em nosso trabalho equivale a soma das equações 3.5, 3.7, 3.9 e 3.11. Portanto, temos que

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N D_{cel} [\hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j)] \\
& -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) \\
& -\sum_i^N K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2 \\
& -\frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N M_{cel} \left[\frac{3 (\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \tag{3.13}
\end{aligned}$$

Os parâmetros J_{cel} , K_{cel} , M_{cel} e D_{cel} têm dimensão de energia. Em determinados casos, ocorrerá a situação de acrescentarmos um material com um parâmetro magnético distinto, que chamaremos de defeito magnético. Para isso, o valor que o parâmetro magnético irá assumir é ligado a sua região. No entanto, quando trabalhamos com duas regiões diferentes é necessário definir como é feita a interação entre os momentos magnéticos na região da interface.

Para introduzir adequadamente o defeito utilizamos a técnica chamada de modelo de impureza, no qual ela consiste em atenuar o efeito da intensidade das interações na interface entre dois meios distintos [20, 29]. Em particular, usaremos nas interações de alta intensidade e curto alcance como as interações de Dzyaloshinskii-Moriya e de troca. Quando a interação magnética, por exemplo, a Dzyaloshinskii-Moriya, ocorre entre momentos magnéticos de regiões distintas utilizamos um valor intermediário para defini-lo. Para este caso o valor do parâmetro é D' , definida como $D' = \sqrt{D \cdot D''}$, onde a constante que não tem contém linha representa as interações entre os momentos magnéticos que pertencem ao material da nanotrilha, a constante com duas linhas representa a interação entre os momentos magnéticos do defeito e a que contém somente uma linha representa interação entre os momentos magnéticos da região que pertencem ao material da nanotrilha e do defeito. Conforme o modelo de impureza e as constantes definidas, os parâmetros magnéticos são escritos da seguinte forma.

$$J_{ij}^{cell} = 2a \begin{cases} A, \\ A', \\ A''. \end{cases} \tag{3.14}$$

$$K_i^{cell} = a^3 \begin{cases} K, \\ K''. \end{cases} \quad (3.15)$$

$$M_{ij}^{cell} = \frac{\mu_0 a^3}{4\pi} \begin{cases} M_S & M_S, \\ M_S & M_S'', \\ M_S'' & M_S''. \end{cases} \quad (3.16)$$

$$D_{ij}^{cell} = a^2 \begin{cases} D, \\ D', \\ D''. \end{cases} \quad (3.17)$$

4 Skyrmions

Os skyrmions magnéticos foram previstos teoricamente em 1987 por A.N. Bogdanov e D. A. Yablonskiui [31], caracterizado por ser uma textura de spin topologicamente estável que pode ser encontrada com facilidade em materiais magnéticos que possuem a interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Sua primeira observação experimental foi dada por S. Mühlbauer et. al., onde demonstraram que pulsos magnéticos invertiam o spin do elétron em determinadas regiões circulares localizadas no material *MnSi* [8]. Essas estruturas de spin podem ser bidimensionais ou tridimensionais no espaço físico real e usualmente portam cargas topológicas inteiras que são determinadas pelas suas propriedades topológicas. Neste trabalho, será limitado a um estudo de texturas topológicas bidimensionais (2D), pois caracteriza de forma satisfatória os filmes finos. A figura 12, ilustra um skyrmion ferromagnético com carga topológica $Q = 1$ que explicaremos com mais detalhes abaixo.

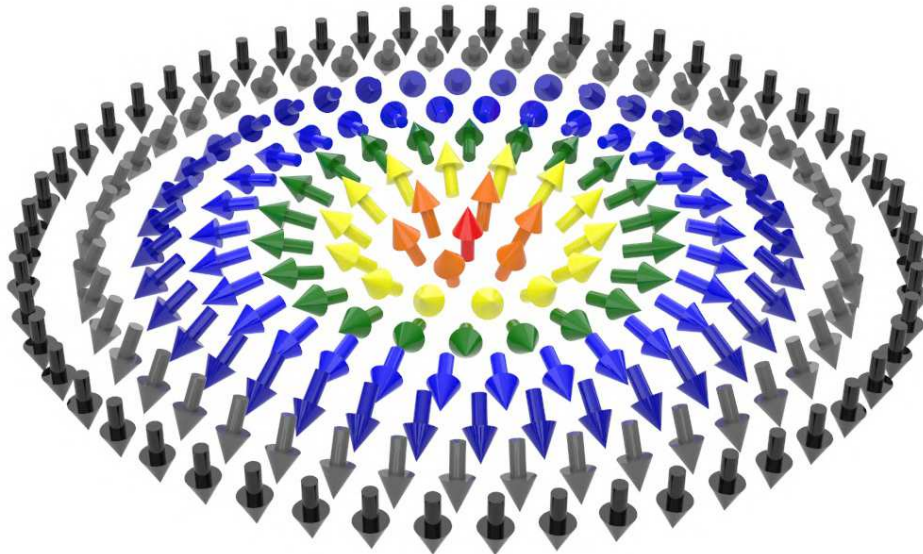


Figura 12 – Representação gráfica do mapeamento da textura do skyrmion ferromagnético. Os spins rotacionam do centro até a borda da textura somente uma vez com quiralidade fixa.

Para calcular a carga topológica, utilizamos a seguinte expressão,

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \int \vec{m}(\vec{r}) \cdot [\partial_x \vec{m}(\vec{r}) \times \partial_y \vec{m}(\vec{r})] dx dy, \quad (4.1)$$

onde \vec{m} é o vetor de magnetização normalizado e x e y são as coordenadas espaciais planares. A carga topológica representa a medição de quantas vezes o spin mapeia a esfera unitária, sendo também conhecida como número de skyrmion. Utilizando a simetria do

skyrmion, o vetor magnetização normalizado pode ser escrito em coordenadas esféricas pela notação

$$\vec{m}(\vec{r}) = \vec{m}(\theta, \varphi) = (\cos \Phi(\varphi) \sin \Theta(r), \sin \Phi(\varphi) \sin \Theta(r), \cos \Theta(r)), \quad (4.2)$$

onde \vec{r} é a coordenada polar $\vec{r} = (r \cos \varphi, r \sin \varphi)$, $\Theta(\varphi)$ é o ângulo projetado no plano xy da magnetização do skyrmion, $\Theta(r)$ é o ângulo que relaciona cada ponto da região do skyrmion com o vetor de magnetização no eixo z . Ou seja, para definir a carga topológica, precisamos somente da textura do spin fora do plano, obtida por $\Theta(\varphi)$ e dentro do plano por $\Theta(r)$ [32, 33]. Substituindo a equação 4.2 na equação 4.1, obtemos a seguinte expressão,

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} d\varphi \int_0^\infty \frac{d\Theta(r)}{dr} \sin \Theta(r) dr = [\Phi(\varphi)]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} [-\cos \Theta(r)]_{r=0}^{r=\infty}. \quad (4.3)$$

Se utilizarmos o skyrmion da figura 12 como exemplo para determinar a carga topológica, é possível observar que a esfera foi mapeada somente uma vez, isto é, no centro do skyrmion a magnetização está apontada para o sentido positivo de z , no entanto, externamente à região do skyrmion a magnetização está apontada para o sentido negativo de z , deste modo assumimos $r \rightarrow \infty$. Portanto, o intervalo da integral da variável r fica, $\Theta(r=0) \rightarrow \Theta(r=\infty)$. Desta maneira,

$$[-\cos \Theta(r)]_{r=0}^{r=\infty} = -[-\cos \pi - \cos 0] = 2 \quad (4.4)$$

substituindo na equação 4.3,

$$Q = 2 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} d\varphi = \frac{1}{2\pi} [\Phi(\varphi)]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}. \quad (4.5)$$

Este resultado é definido como o número de vorticidade, explicitamente,

$$Q_v = \frac{1}{2\pi} [\Phi(\varphi)]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}. \quad (4.6)$$

A forma geral, pode ser escrito da seguinte maneira:

$$Q_v = \frac{1}{2\pi} \oint_c d\varphi. \quad (4.7)$$

Através deste resultado é acrescentado o número de helicidade Q_h ou fase do skyrmion. Esse termo é responsável para classificar o tipo de skyrmion, ou seja, se os valores forem iguais a 0 ou π são do tipo Néel, e caso tenham valores iguais a $\pi/2$ ou $-\pi/2$ são do tipo Bloch. Logo, o ângulo projetado no eixo xy é dado por

$$\Theta(\varphi) = Q_v \varphi + Q_h. \quad (4.8)$$

Utilizando as devidas considerações, a equação 4.2 pode ser reescrita da seguinte maneira,

$$\vec{m}(\theta, \varphi) = [\cos(Q_v \varphi + Q_h) \sin \theta, \sin(Q_v \varphi + Q_h) \sin \theta, \cos \theta]. \quad (4.9)$$

Na figura 12 está representado o skyrmion do tipo Néel, que é caracterizado pelos momentos rotacionarem do centro até a borda com quiralidade fixa, e pode assumir os seguintes valores $Q_h = 0$ (orientação de dentro para fora) ou $Q_h = \pi$ (orientação de fora para dentro). Já os skyrmions do tipo Bloch apresentam uma rotação em relação ao eixo z indo da região central do skyrmion até a sua borda e podem assumir os seguintes valores $Q_h = \pi/2$ (rotacionam em sentido anti-horário) ou $Q_h = -\pi/2$ (rotacionam em sentido horário). Na figura 13 apresentamos algumas configurações possíveis para os skyrmions do tipo Néel (figura 13, a e b) e do tipo Bloch (figura 13, c e d).

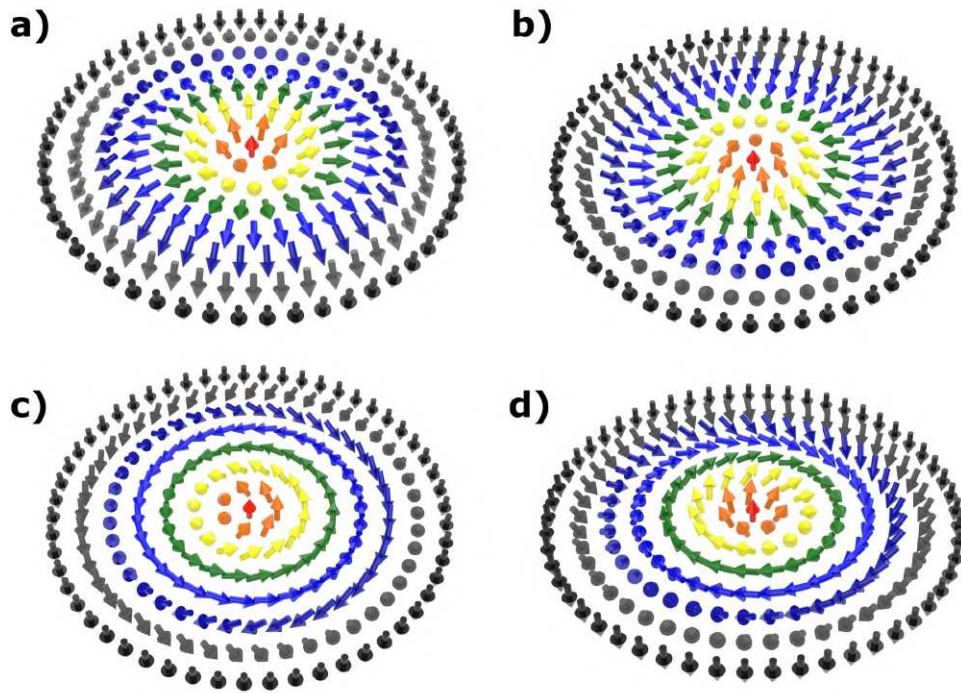


Figura 13 – Representação de skyrmions magnéticos com $Q = 1, Q_v = 1$, mas com valores diferentes de helicidade, Q_h . No qual a) e b) são do tipo Néel e c) e d) são do tipo Bloch. Portanto, a) Para $Q_h = 0$, b) Para $Q_h = \pi$, c) Para $Q_h = \pi/2$ e d) Para $Q_h = -\pi/2$.

Portanto, com estas três variáveis (Q, Q_v, Q_h) é possível caracterizar de forma efetiva a textura topológica do skyrmion. Na figura 14, podemos observar algumas outras configurações possíveis para o skyrmion magnético.

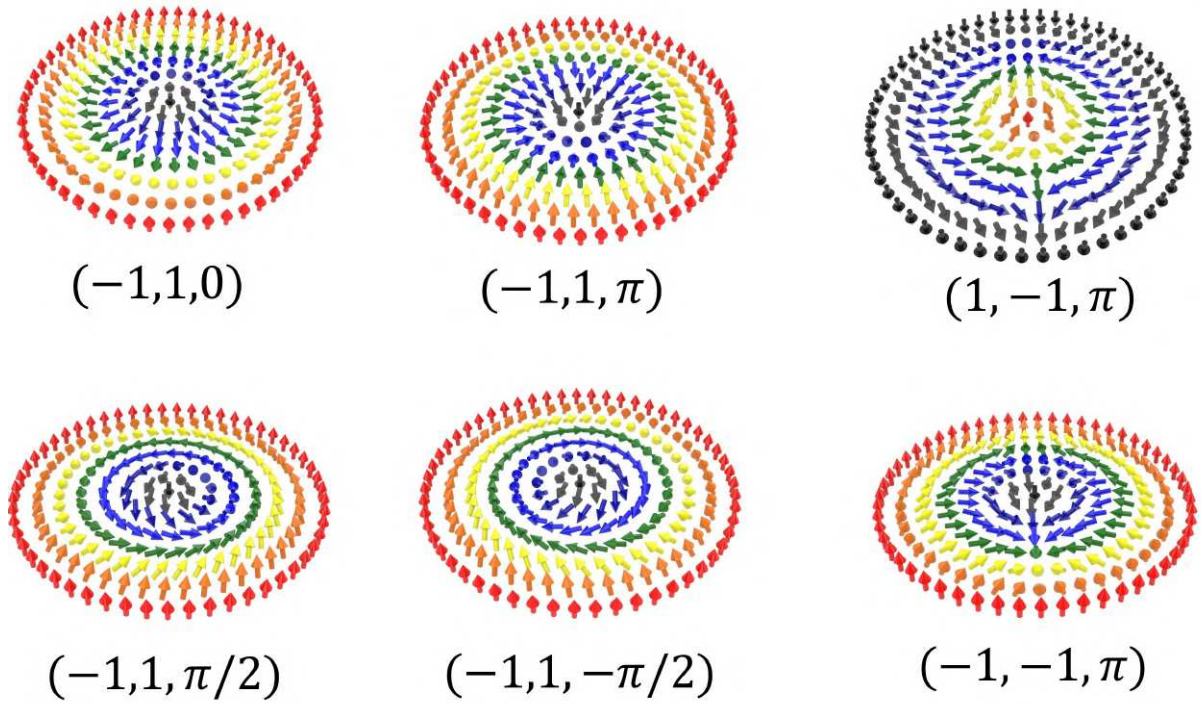


Figura 14 – Representação de skyrmions magnéticos com diferentes cargas topológicas, número de vorticidade e número de helicidade, (Q, Q_v, Q_h) . A seta define a direção do momento magnético.

Os skyrmions ferromagnéticos podem ser movimentados em uma fita por uma aplicação de corrente polarizada em spin. Porém, ao aplicarmos esta corrente, ocorre uma deflexão em sua trajetória, que o faz ir em direção à borda da nanofita [34], como pode ser visto na figura 15. Esse fenômeno é conhecido por efeito hall de skyrmion (SkHE), resultante da força de Magnus topológica.

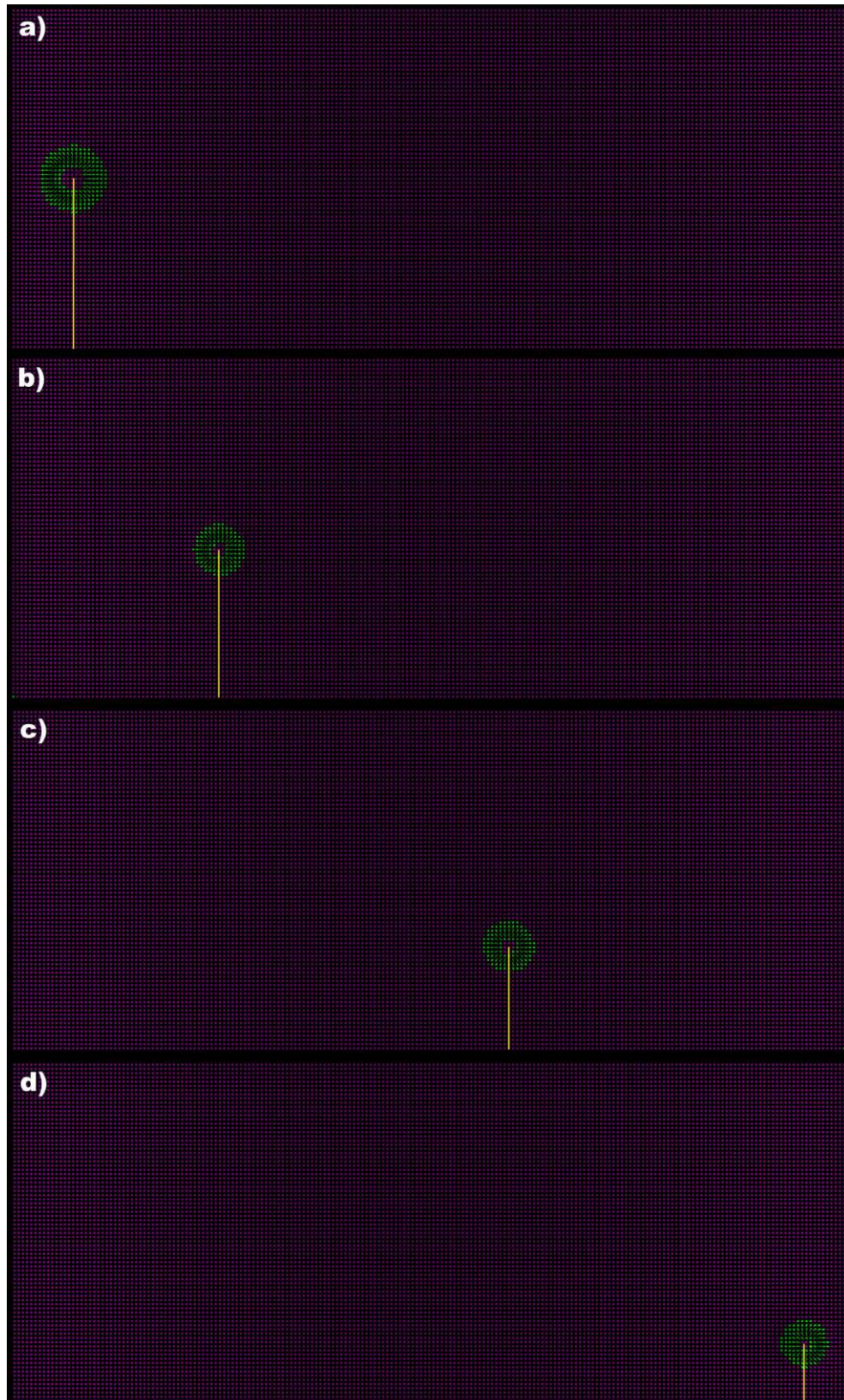


Figura 15 – Evolução temporal do skyrmion do tipo Néel em uma fita de *Co/Pt*. A dimensão da nanofita é 200 nm comprimento por 100 nm de largura. Pelas imagens de a) até d) podemos observar que o movimento do skyrmion é constituído por uma componente perpendicular a corrente aplicada, onde o traço amarelo representa a distância entre o skyrmion e a borda. A densidade de corrente é $j_e = -5 \times 10^{12}\text{ A/m}^2$.

O vetor força de Magnus é definido pela seguinte equação

$$\vec{F}_M = G\hat{z} \times \vec{j}_e \quad (4.10)$$

onde $\vec{G} = (0, 0, 4\pi Q)$ é conhecido como vetor de acoplamento giromagnético, Q a carga topológica do skyrmion e \vec{j}_e a densidade de corrente. Essa força de Magnus topológica, pode aparecer em qualquer textura magnética não homogênea. Para contornar este efeito, podemos utilizar os skyrmions antiferromagnéticos em filmes finos antiferromagnéticos. Essa classe de skyrmions pode ser interpretada como duas sub-redes ferromagnéticas, como pode ser visto na figura 16.

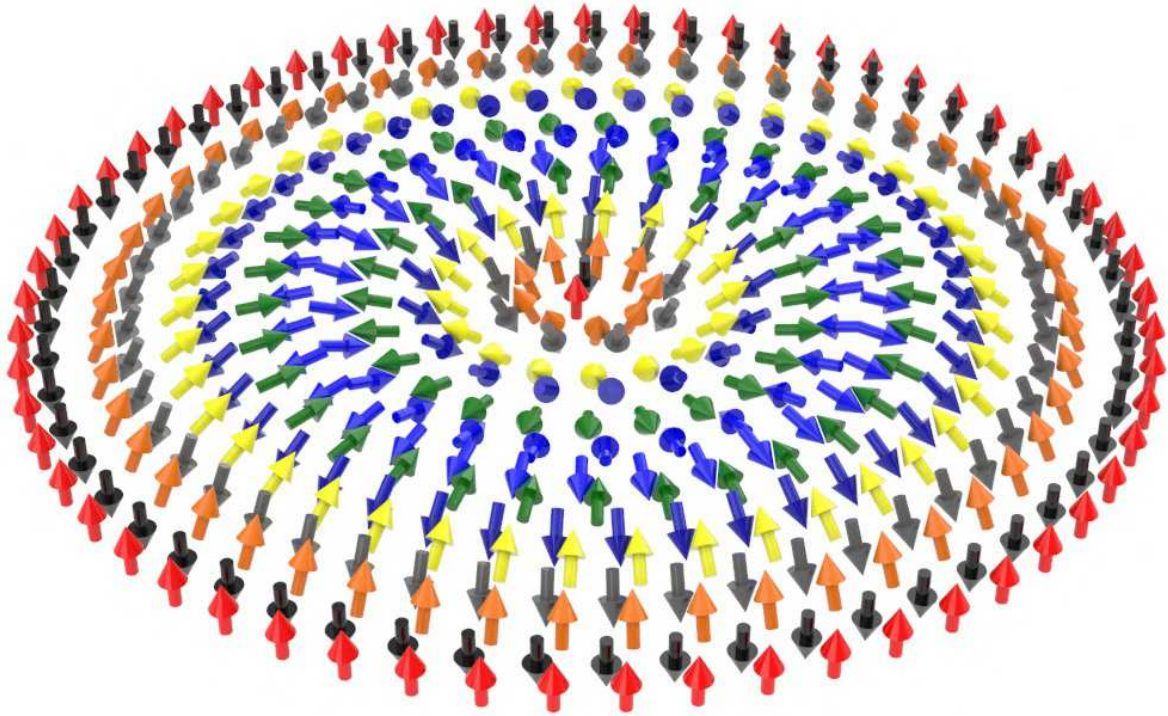


Figura 16 – Representação de um skyrmion antiferromagnético. Pode ser visto como a união de dois skyrmions ferromagnéticos de cargas topológicas $Q = +1$ e $Q = -1$.

Isso resulta em um skyrmion que não apresenta o efeito hall de skyrmion, devido as sub-redes terem cargas topológicas contrárias. Logo, quando ocorre seu movimento na nanofita ele não vai em direção a borda, conforme visto na figura 17.

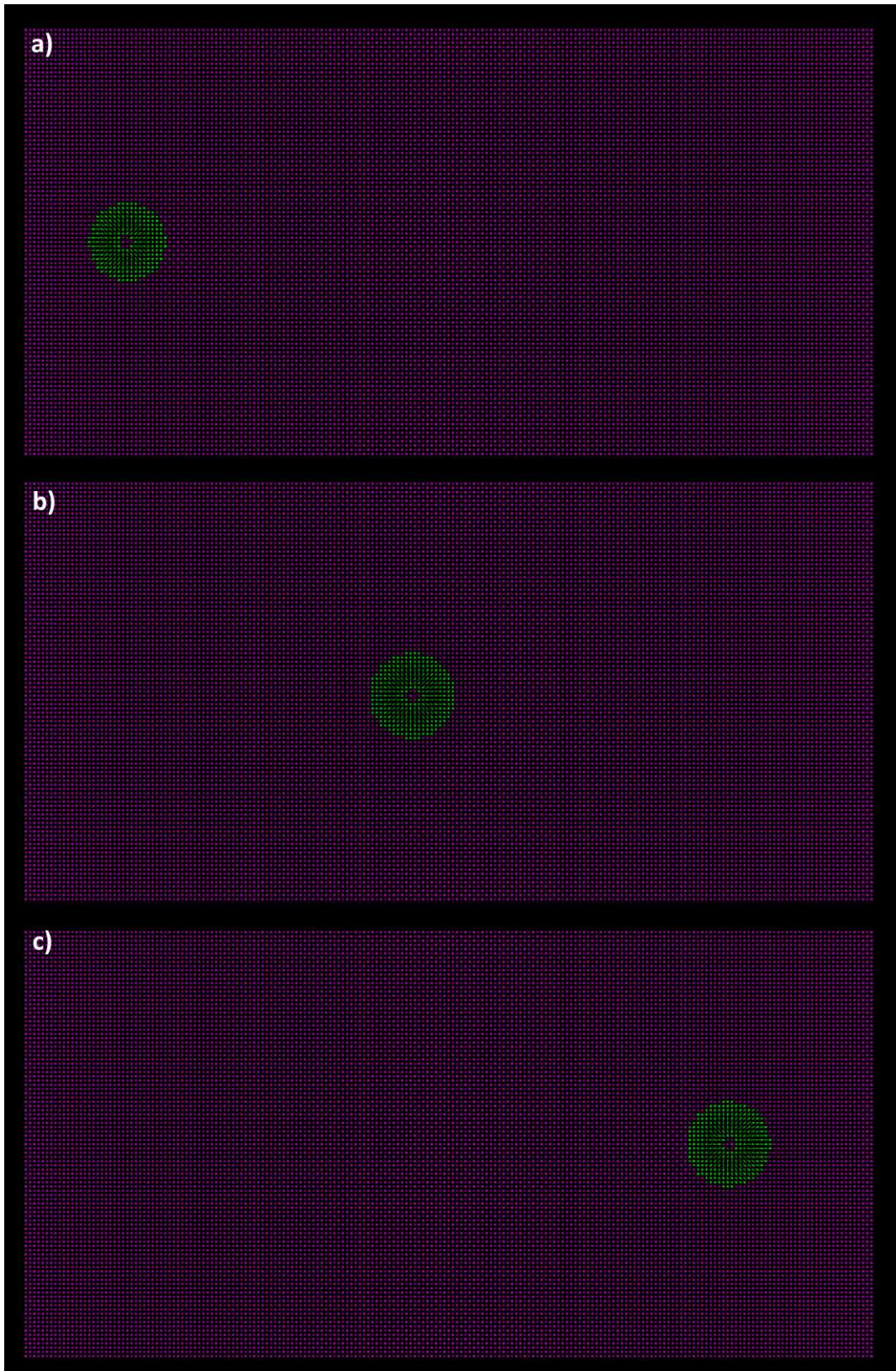


Figura 17 – Evolução temporal do skyrmion do tipo Néel em uma fita de $KMnF_3/Pt$. A dimensão da nanofita é 200 nm comprimento por 100 nm de largura. Pelas imagens de a) até c) podemos observar que o movimento do skyrmion não apresenta uma componente perpendicular a corrente aplicada, à vista disso o skyrmion antiferromagnético apresenta um movimento retilíneo. A densidade de corrente é $j_e = -5 \times 10^{12}\text{ A/m}^2$.

Em relação aos skyrmions ferromagnéticos, os skyrmions antiferromagnéticos apresentam uma velocidade longitudinal que pode exceder em centenas de vezes dos skyrmions ferromagnéticos, e sem perder suas características devido a perturbação externa [35]. Entretanto, ocorre que por ele não ser sensível a campos externos, há uma grande dificuldade de detectá-los, mas já existem técnicas como a de microscopia de força magnética sob baixas pressões onde possibilita serem observados [36].

5 Resultados e Discussões

5.0.1 Parâmetros do Material

O material utilizado como referência na simulação micromagnética é a bicamada de Trifluoreto de Potássio Manganês sobre platina ($KMnF_3/Pt$), onde o $KMnF_3$ apresenta o comportamento antiferromagnético. Sua estrutura cristalina tem o formato cúbico, e seu parâmetro de rede mede $4,186\text{\AA}$, como ilustrado na figura 18.

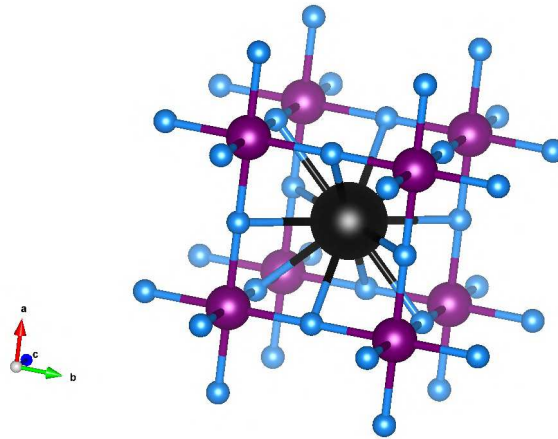


Figura 18 – Estrutura Cristalina do Trifluoreto de Potássio Manganês. A cor preta representa o elemento K (Potássio), a cor roxa representa o Mn (Manganês) e em azul é o elemento F (Ferro).

Imagem gerada no site [37] e renderizada pelo VesTa.

O conjunto de parâmetros magnéticos desse material são: constante de anisotropia magnetocristalina $K = 1,16 \times 10^5 J/m^3$, magnetização de saturação $M_s = 3,76 \times 10^5 A/m$, dureza da constante de troca $A = -6,59 \times 10^{-12} J/m$, constante de Dzyaloshinskii-Moriya, $D = 8,0 \times 10^{-4} J/m^2$, comprimento de troca $\lambda_{tr} = \sqrt{2|A|/\mu_0 M_s^2} = 8,61 nm$, parâmetro de largura da parede $\Delta = \sqrt{|A|/K} \approx 7,54 nm$, o parâmetro de gilbert é fixado em $\alpha = 0.1$, e o comprimento associado à Dzyaloshinskii-Moriya é $\xi = 2|A|/D \approx 16,48 nm$, onde os valores utilizados foram obtidos nas seguintes fontes [38, 39]. O valor da aresta que adotamos é de $a = 1.0 nm < \Delta$, esse tamanho garante não perder nenhuma informação quando utilizamos o modelo micromagnético, uma vez que todos os parâmetros relacionados a distância tem valor superior. Ressalto que o programa utilizado para a obtenção dos resultados foi criado pelo grupo de pesquisa do departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora e atende perfeitamente as necessidades da pesquisa gerada.

5.0.2 Estudo da Estabilização e do Raio do Skyrmion em Função dos Parâmetros

A primeira parte do nosso trabalho foi gerar o skyrmion antiferromagnético de forma estável. Para esse objetivo, utilizamos os dados seção 5.0.1 onde fixamos o tamanho da nanofita em 150 nm de comprimento e largura, onde através da integração da equação *LLG* obtivemos sua estabilização na rede antiferromagnética, como pode ser visto na figura 19.

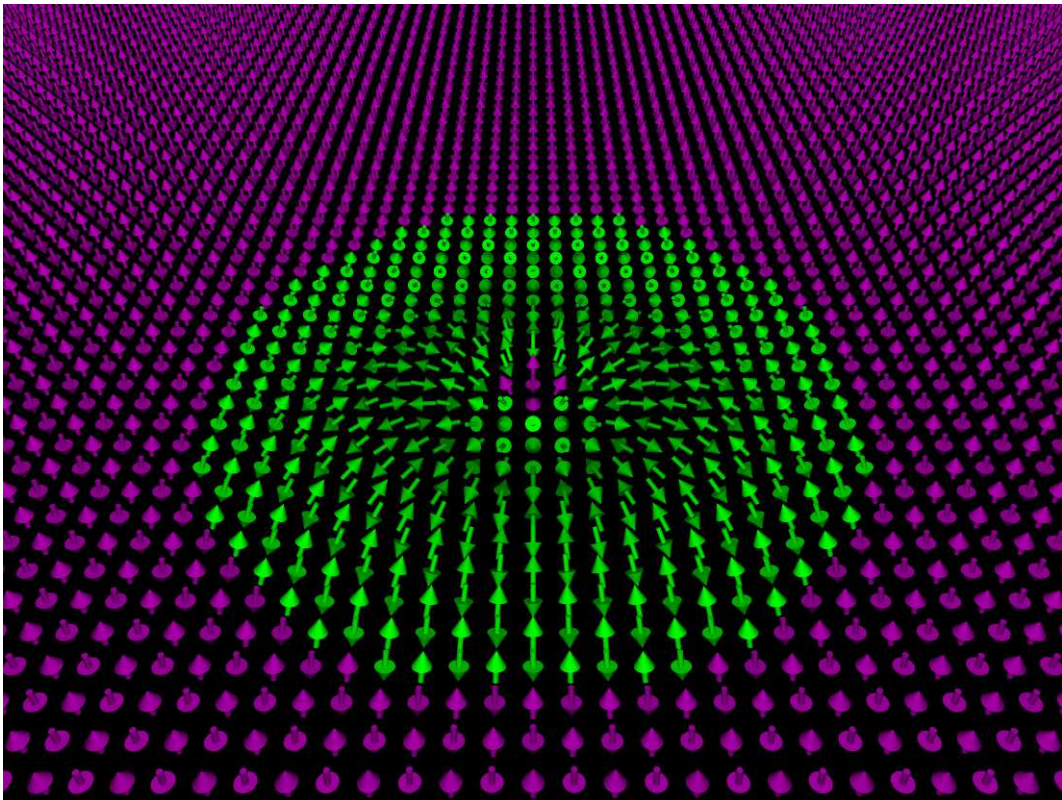


Figura 19 – Vista esquemática um skyrmion antiferromagnético magnético do tipo Néel estabilizado com os parâmetros de referência do material. A cor verde representa os momentos magnéticos que compõe o skyrmion e em roxo o filme antiferromagnético. O seu raio é de aproximadamente de 5 nm . As imagens da simulação foram geradas através do programa *POV-Ray*.

O tamanho da nanofita não interfere no raio do skyrmion, desde que tenha dimensão suficiente para hospedar o skyrmion e não gere alguma deformação. Na literatura, é definido que o raio do skyrmion é calculado através da distância entre o spin localizado no centro até o primeiro spin com ângulo de 90° em relação a ele. Para uma rede antiferromagnética podemos medir o seu raio utilizando apenas uma de suas sub-redes. Na figura 20 temos uma representação de como é medido o raio de um skyrmion antiferromagnético.

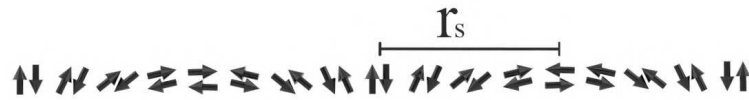


Figura 20 – Representação gráfica da definição do raio de um skyrmion antiferromagnético

O raio do skyrmion antiferromagnético na nanofita pode ser alterado através da variação dos valores dos parâmetros magnéticos gerando resultados variados, tais como: aumento, diminuição, aniquilação ou geração de texturas magnéticas. Na figura 21 apresentamos o que pode acontecer se alterarmos um valor dos parâmetros, no exemplo em questão modificamos a constante de Dzyaloshinskii-Moriya, onde modificamos o para o valor de $10.0 \times 10^{-4} J/m^2$.

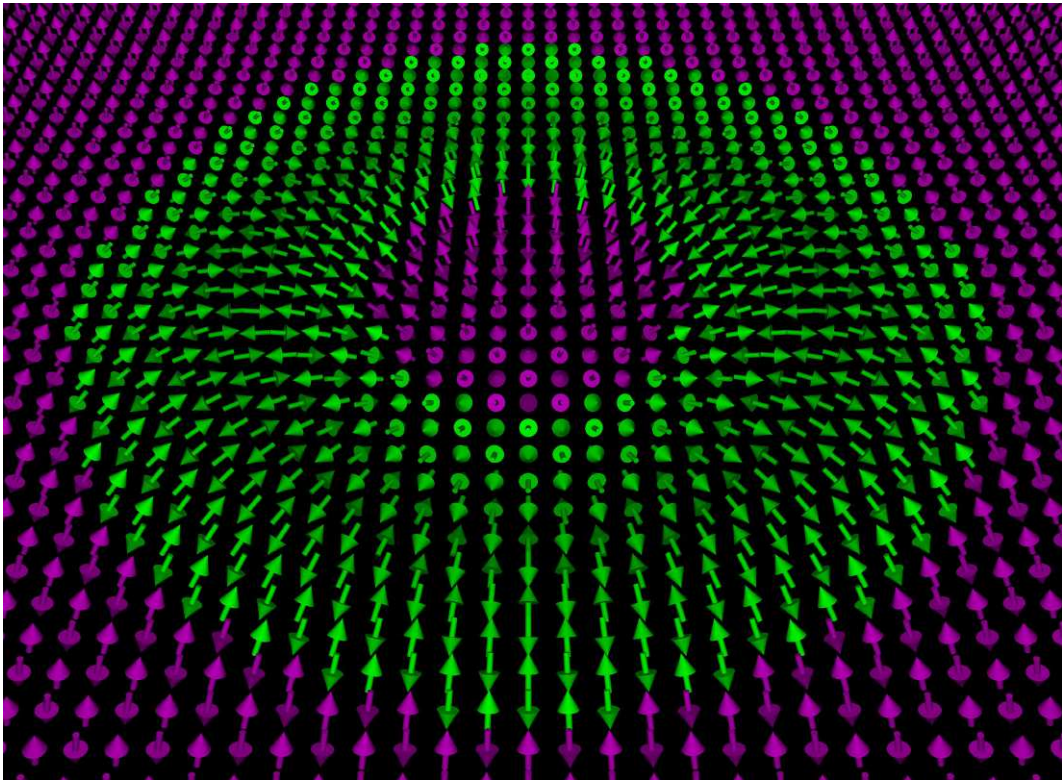


Figura 21 – Vista esquemática de um skyrmion antiferromagnético do tipo Néel estabilizado com o parâmetro D alterado. O valor adotado é de $D = 10.0 \times 10^{-4} J/m^2$. Neste caso, o raio é de aproximadamente 10 nm .

O skyrmion antiferromagnético em determinadas imagens pode demonstrar a característica de um disco, mas isso ocorre devido ao fato que no centro do skyrmion a orientação dos momentos magnéticos tem praticamente a mesma orientação dos momentos da rede antiferromagnética, então a escala de cores que utilizamos está ligada diretamente

ao ângulo de orientação dos momentos magnéticos na nanofita. Na figura 22 mostramos como é o comportamento do raio através da variação da constante de rigidez de troca A .

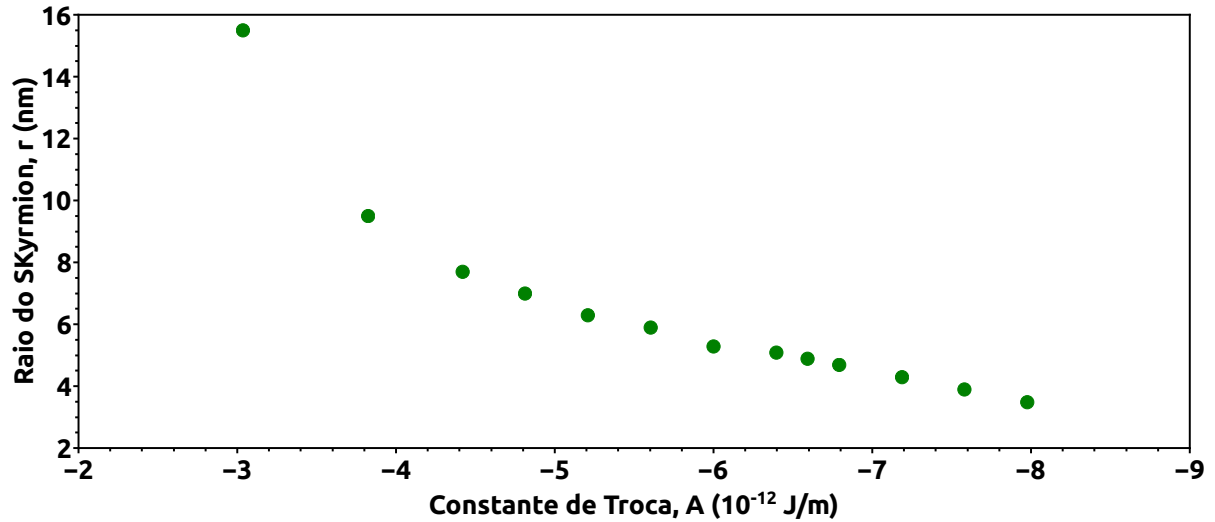


Figura 22 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro da constante de rigidez de troca (A).

Observamos que a medida que o módulo da constante de rigidez de troca aumenta o seu raio diminui. Esse comportamento ocorre em função da intensidade de interação entre os momentos magnéticos, onde mantém a orientação do ordenamento magnético da nanofita e dificulta a estabilização ou até o surgimento de skyrmions. Para a magnetização de saturação, o comportamento é semelhante, ou seja, o raio diminui a medida que M_s aumenta, conforme mostrado na figura 23. Isso ocorre devido ao caráter do acoplamento dipolar do material antiferromagnético [24], onde a orientação dos momentos magnéticos individuais que se tornam mais intensas levando a diminuição do raio dos skyrmions.

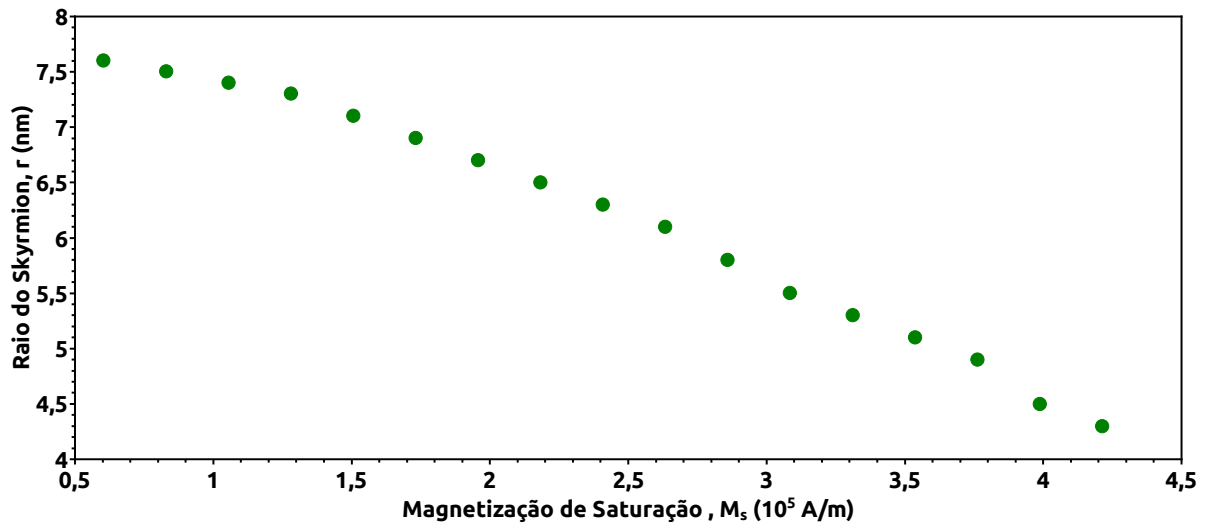


Figura 23 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro de magnetização de saturação (M_S).

Para a constante de Dzyaloshinskii-Moriya, observamos que o raio cresce a medida que o seu valor aumenta, conforme é mostrado na figura 24. Esse aumento na interação de Dzyaloshinskii-Moriya resulta em um aumento na ordenação não colinear dos momentos magnéticos, e para responder a esse comportamento o raio do skyrmion deve aumentar, proporcionando uma configuração mais estável e de menor energia.

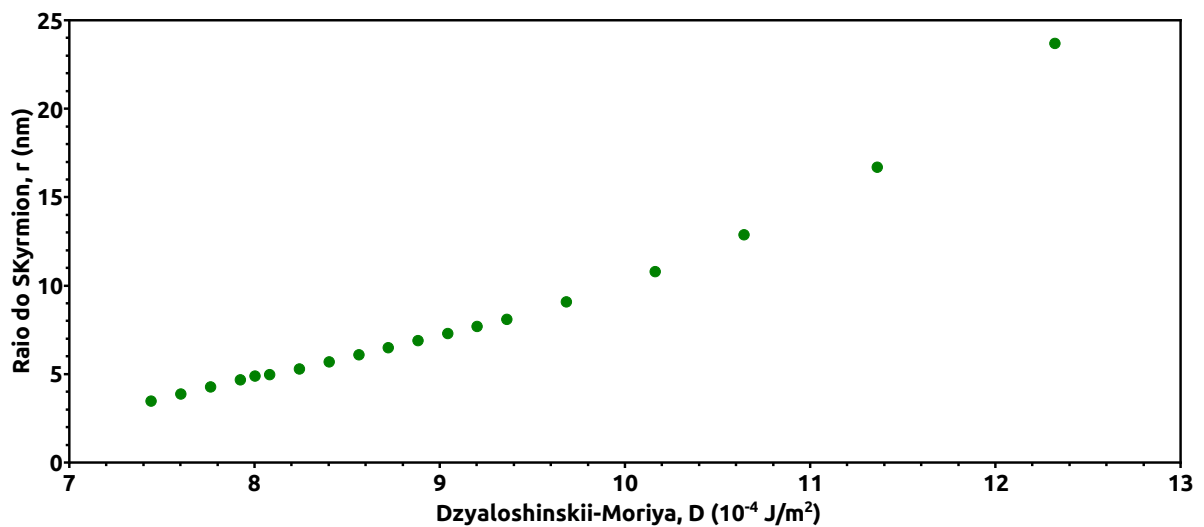


Figura 24 – Raio do skyrmion antiferromagnético em função do parâmetro de Dzyaloshinskii-Moriya D .

Para possíveis aplicações tecnológicas é fundamental compreender as interações magnéticas envolvidas. Podemos analisar o comportamento do sistema em função das variações dos parâmetros de anisotropia magnetocristalina perpendicular (K) e de Dzyaloshinskii-Moriya (D). Experimentalmente é possível controlar essas interações através das espessuras das camadas de $KmnF_3$ e Pt , respectivamente [40]. A figura 25 representa um diagrama do balanço entre os valores de K e D , onde esse resultado temos uma projeção do comportamento do skyrmion antiferromagnético.

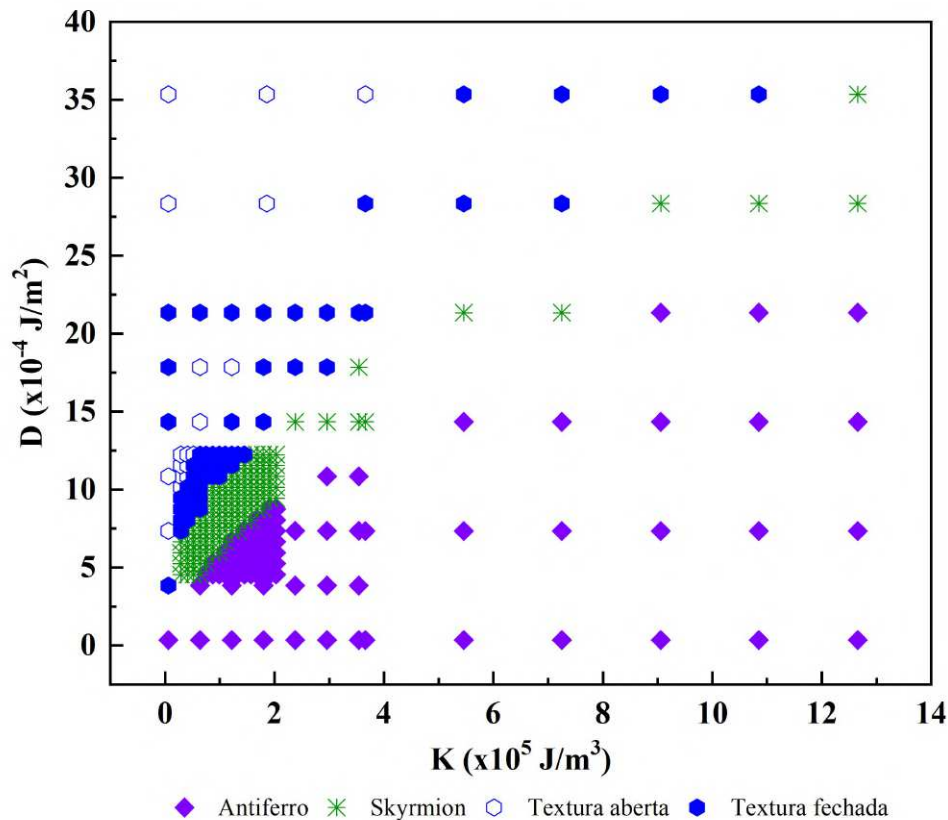


Figura 25 – Diagrama de fase do skyrmion antiferromagnético em função dos parâmetros K e D . A nanofita tem dimensões de 300 nm de comprimento e 100 nm de largura. Os pontos em verde representam os valores que o skyrmion é gerado e permanece estável. Os pontos em cor roxa representam os valores onde o skyrmion é gerado, mas ocorre seu colapso. Os pontos em cor azul representam os valores onde ocorre a evolução de skyrmion para texturas magnéticas. Para valores próximos ao de referência foi feito uma variação mais detalhada com o intuito de obter valores que podem auxiliar para ser utilizados para aplicações.

Dependendo dos valores dos parâmetros, podem surgir deformações denominadas texturas magnéticas, que são divididas entre texturas abertas e fechadas [35, 41]. A textura fechada é caracterizada pelo skyrmion ser gerado na nanofita e evoluir para uma textura

que expande até ocupar todo o espaço possível na nanofita, de tal modo que é possível definir uma curva fechada delineada pela parede de domínio. Conforme mostrado na figura 26.

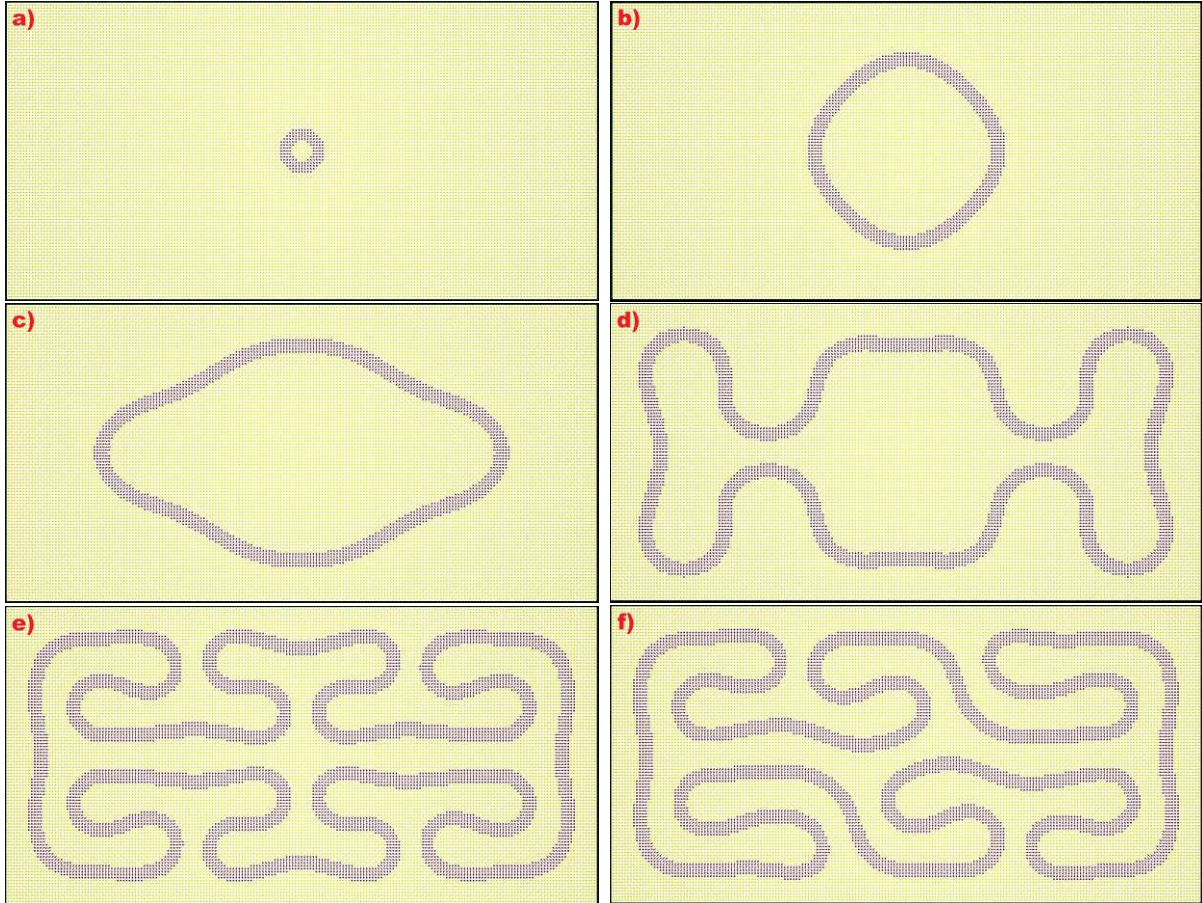


Figura 26 – Evolução temporal do comportamento dos momentos magnéticos em uma nanofita a constante de Dzyaloshinskii-Moriya no valor de $D = 35 \times 10^{-4} J/m^2$ e $K = 9 \times 10^5 J/m^3$. Em a) a configuração em $t = 5ps$. Em b) a configuração em $t = 70ps$. Em c) a configuração em $t = 180ps$. Em d) a configuração em $t = 290ps$. Em e) a configuração em $t = 510ps$. Em f) temos a configuração final da evolução temporal estabilizada de textura magnética aberta, em $t = 810ps$. Essa estrutura gerada, é também conhecida como *wormdomain*.

Este conceito de *wormdomain* foi retirado da fonte [35].

Já a textura aberta, ela é caracterizada pelo skyrmion ser gerado na nanofita e evoluir para uma textura que expande até a borda formando curvas fechadas e abertas delineadas pela parede de domínio, conforme mostrado na figura 27.

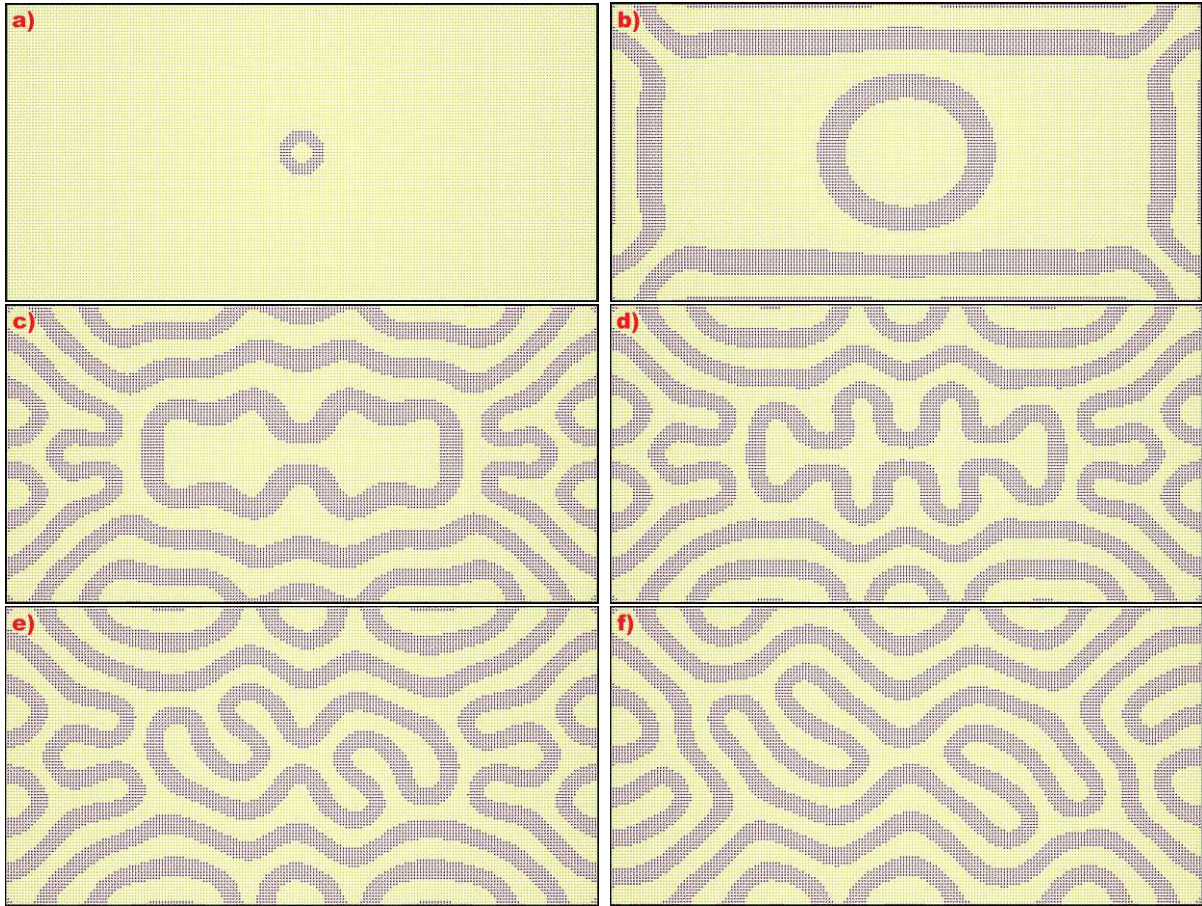


Figura 27 – Evolução temporal do comportamento dos momentos magnéticos em uma nanofita a constante de Dzyaloshinskii-Moriya no valor de $D = 35 \times 10^{-4} J/m^2$ e $K = 2 \times 10^5 J/m^3$. Em a) a configuração em $t = 5ps$. Em b) a configuração em $t = 15ps$. Em c) a configuração em $t = 25ps$. Em d) a configuração em $t = 35ps$. Em e) a configuração em $t = 50ps$. Em f) temos a configuração final da evolução temporal estabilizada de textura magnética aberta, dada em $t = 810ps$.

Ou seja, fazendo uma mudança nos pesos das interações é possível obter configurações de equilíbrio distintas entre si, evidenciando a complexibilidade da hamiltoniana. Ressaltamos que os parâmetros A e M_s são características intrínsecas do material, caso deseje trabalhar experimentalmente com valores específicos para esses parâmetros é necessário trocar o material trabalhado, pois não é possível modificar seus valores através das espessuras do filme de $KmnF_3$ ou da Pt .

5.0.3 Skyrmion antiferromagnético posicionado entre duas regiões magnéticas

Na segunda etapa de nosso estudo, visamos compreender o comportamento do skyrmion quando está posicionado entre a interface de duas regiões magnéticas distintas. Realizando essa variação, observamos qual região é atrativa ou repulsiva para o skyrmion.

As dimensões da nanofita são de 200 nm de comprimento por 100 nm de largura, onde a posição inicial do skyrmion é o centro geométrico da nanofita. Na figura 28 temos a ilustração de como é a situação inicial do sistema. Do lado esquerdo, no qual chamaremos de *meio 1*, temos os parâmetros magnéticos pertencentes a bicamada de $KMnF_3/Pt$. Do lado direito (*meio 2*), é a região que ocorre a modificação dos valores dos parâmetros magnéticos A'' , D'' e M_S'' .

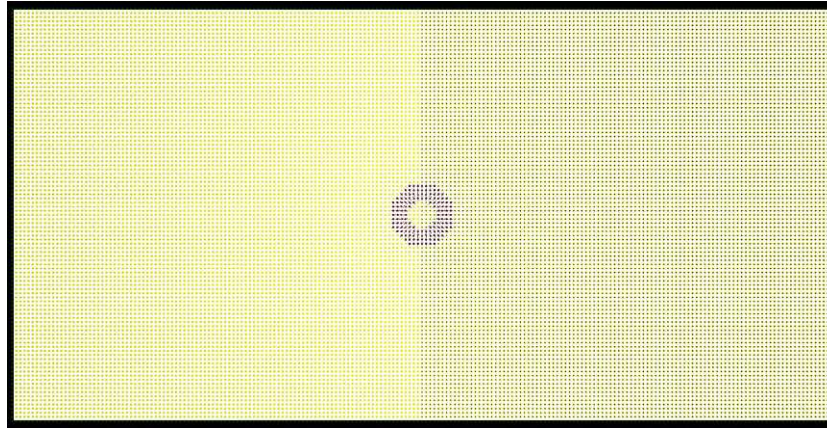


Figura 28 – Representação esquemática da condição inicial do skyrmion entre duas regiões magnéticas distintas. Do lado esquerdo representa os parâmetros referentes à $KMnF_3$, do lado direito representa a região que ocorre a alteração dos parâmetros magnéticos A'' , D'' e M_S'' .

O estudo foi feito de forma individual para cada parâmetro no *meio 2*, onde os valores que adotamos foram de $\pm 25\%$ em relação ao valor de referência, ou seja, $A'' = 0.75A$, $A'' = 1.25A$, $D'' = 0.75D$, $D'' = 1.25D$, $M_S'' = 0.75M_S$ e $M_S'' = 1.25M_S$. Levando em consideração que para as interações de troca e Dzyaloshinskii-Moriya, é necessário utilizar $A' = \sqrt{A \cdot A''}$ e $D' = \sqrt{D \cdot D''}$ na interface entre os meios. Para o caso da Constante de Dzyaloshinskii-Moriya, quando diminuimos o valor em 25% , o skyrmion se move para a esquerda indo em direção ao *meio 1* onde permanece estável, visto na figura 29(a). Quando aumentamos o valor em 25% , o skyrmion se move a direita indo para o *meio 2* onde permanece estável, como pode ser visto na figura 29(b).

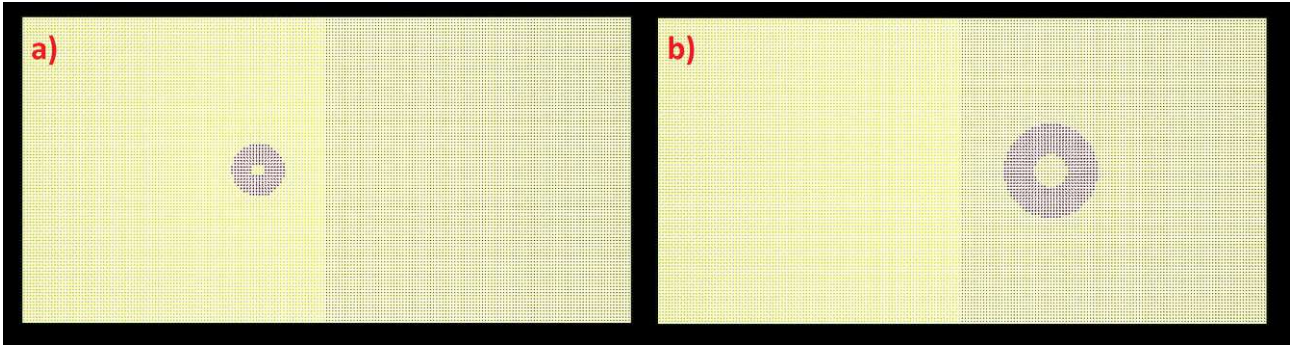


Figura 29 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região mais escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da magnetização de saturação. Em a) o valor adotado em módulo para a Dzyaloshinskii-Moriya é $D'' = 6 \times 10^{-4} J/m^2$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado em módulo para a Dzyaloshinskii-Moriya é $D'' = 10 \times 10^{-4} J/m^2$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência.

Para a constante de troca, o comportamento do skyrmion quando diminuimos o valor em 25%, ele move para a direita indo em direção ao *meio 2* onde permanece estável, visto na figura 30(a). Quando aumentamos o valor em 25%, o skyrmion se move a esquerda indo para o *meio 1* onde permanece estável.

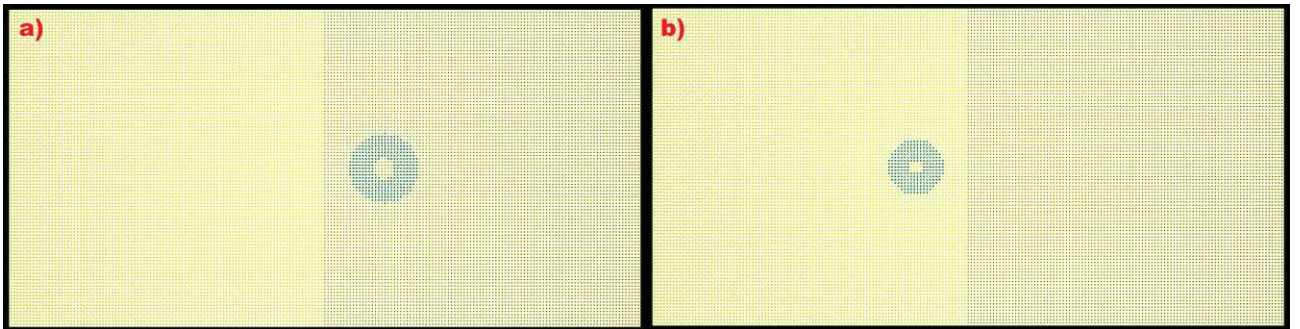


Figura 30 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da constante de troca. Em a) O valor adotado em módulo para a constante de troca em módulo no meio 2 é de $A'' = 4,94 \times 10^{-12} J/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado para a constante de troca em módulo é de $A'' = 8,23 \times 10^{-12} J/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência.

Para o caso da magnetização de saturação, quando diminuimos o valor em 25%, o comportamento de skyrmion é de se mover para a direita indo em direção ao *meio 2* onde permanece estável, como pode ser visto na figura 31(a). Quando aumentamos o valor em 25%, o skyrmion se move a esquerda indo para o *meio 1* onde permanece estável.

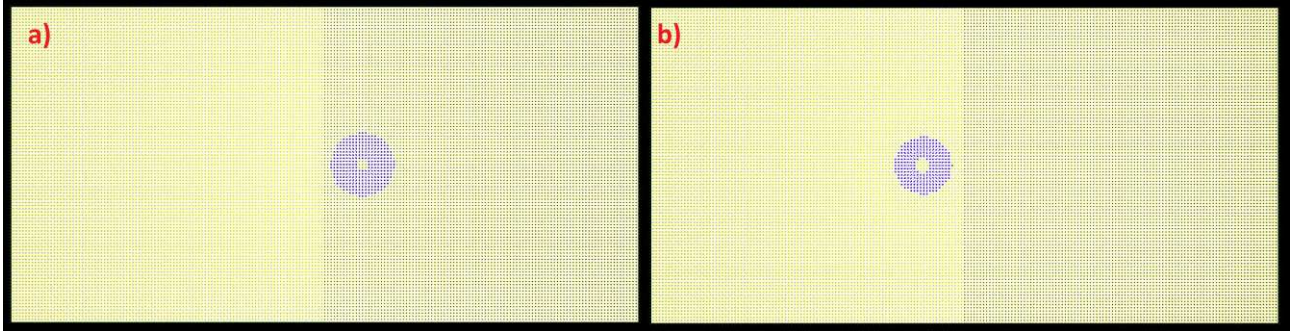


Figura 31 – Representação esquemática de estabilização do skyrmion com duas regiões magnéticas distintas. A região clara (esquerda) representa os parâmetros magnéticos da bicamada de $KMnF_3/Pt$, e na região mais escura (direita) representa a região com alteração de $\pm 25\%$ da magnetização de saturação. Em a) o valor adotado em módulo para a magnetização de saturação em módulo no meio 2 é de $M_s'' = 2,82 \times 10^5 A/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma repulsão em relação ao valor de referência. Em b) o valor adotado em módulo para a magnetização de saturação em módulo no meio 2 é de $M_s'' = 4,7 \times 10^5 A/m$. Quando ocorre a estabilização do skyrmion, observamos que ocorre uma atração em relação ao valor de referência.

Se observarmos o comportamento do skyrmion nas figuras 29, 30 e 31 notamos que o comportamento do skyrmion é de se deslocar para o meio que o faz expandir, a vista que o skyrmion pode colapsar caso as interações magnéticas da região não sejam suficientes para o manter pelo menos estável. Este resultado fortalece diretamente a nossa escolha para a última etapa do estudo, no qual consiste na possibilidade da construção de uma armadilha para o skyrmion.

5.0.4 Nanofita com um defeito magnético

Na última etapa de nosso estudo utilizamos o resultado anterior como guia, uma vez que sabemos como o skyrmion antiferromagnético se comporta diante da variação dos parâmetros magnéticos. Nesta seção a região dos parâmetros magnéticos modificados chamaremos de defeitos magnéticos. Esses defeitos magnéticos fornecem a possibilidade de criarmos armadilhas para o skyrmion, capazes de fixá-lo em uma determina região ou

de provocar seu espalhamento na nanofita, onde o formato geométrico que utilizamos para caracterizar o defeito será o de um quadrado.

Para calcular a energia de interação entre o defeito magnético e o skyrmion em função da distância entre eles, posicionamos inicialmente o skyrmion e o defeito na nanofita de modo que não ocorra interação entre ambos e medimos a energia total da nanofita. Em seguida, alteramos a posição do skyrmion e medimos a energia em cada intervalo de distância. As dimensões da nanofita são de 200 nm de comprimento e 100 nm de largura. Na figura 32, temos a representação da situação inicial.

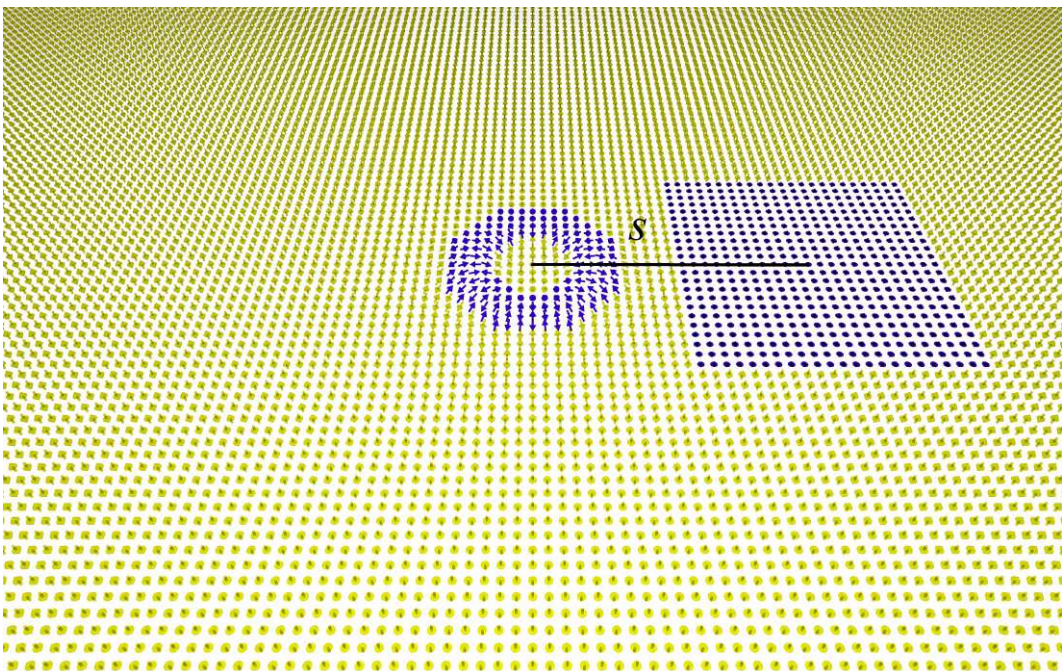


Figura 32 – Representação esquemática da configuração inicial de interação entre um skyrmion e um defeito magnético. Todos os defeitos utilizados apresentam a forma quadrática, para este caso em particular é com área de 529 nm^2 .

Portanto, a equação que descreve somente a energia de interação skyrmion-defeito, é dada por

$$U_s = E(s) - E(s \rightarrow \infty) \quad (5.1)$$

As figuras 33 e 34, ilustram o comportamento atrativo e repulsivo respectivamente do defeito magnético. Nesses exemplos é caracterizado pela variação do parâmetro A .

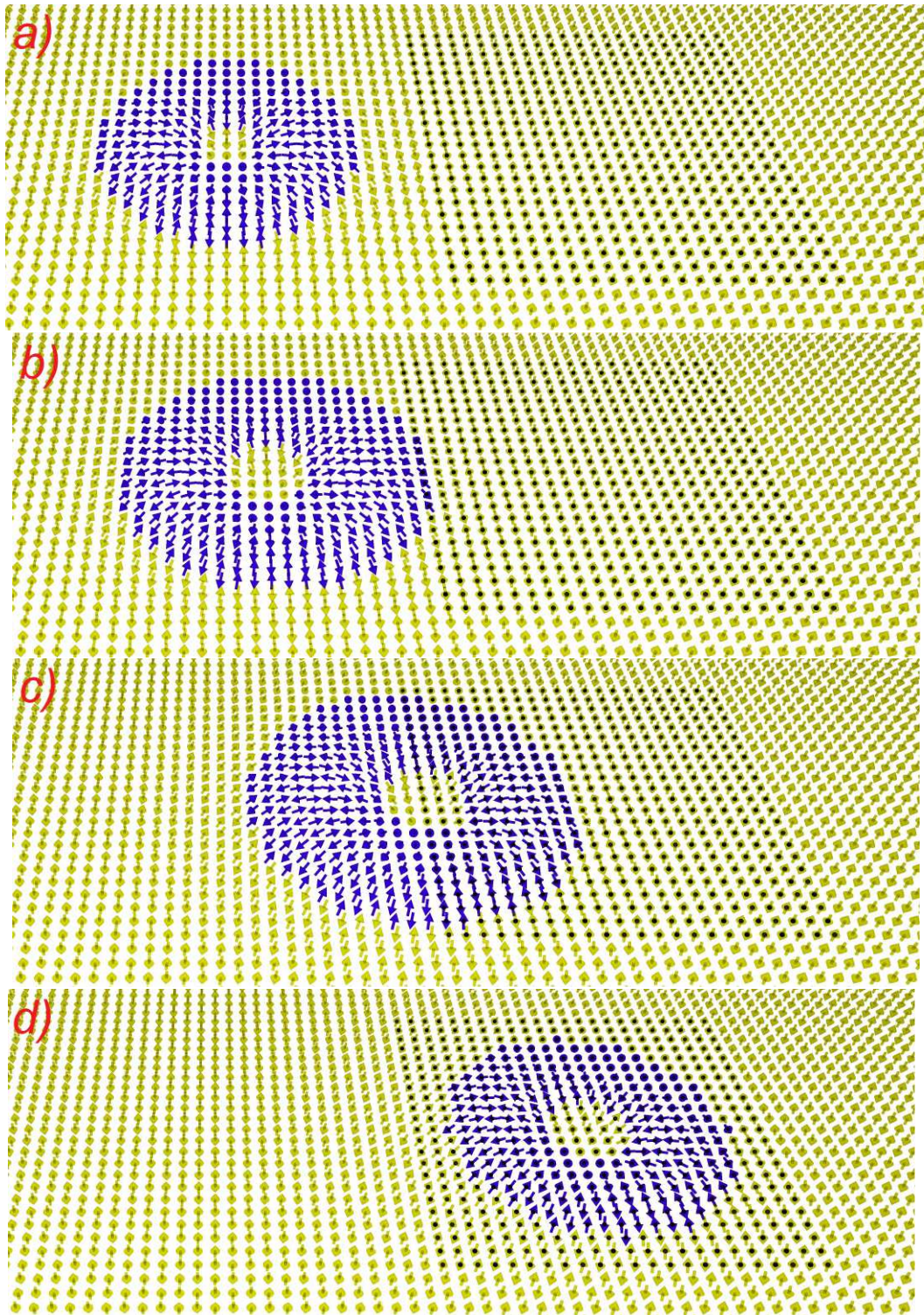


Figura 33 – Representação esquemática da armadilha de atração para um skyrmion antiferromagnético. A distância centro a centro é dada por 25nm e o defeito tem o parâmetro alterado em $A'' = 0.75A$ com área de 529nm^2 . Em a) a configuração inicial é dada com $t = 2\text{ps}$. Em b) ilustra a configuração com 25ps . Em c) ilustra a configuração com 50ps . Em d) ilustra a configuração em 102ps . Após esse intervalo, o skyrmion permanece fixado e estabilizado na região do defeito.

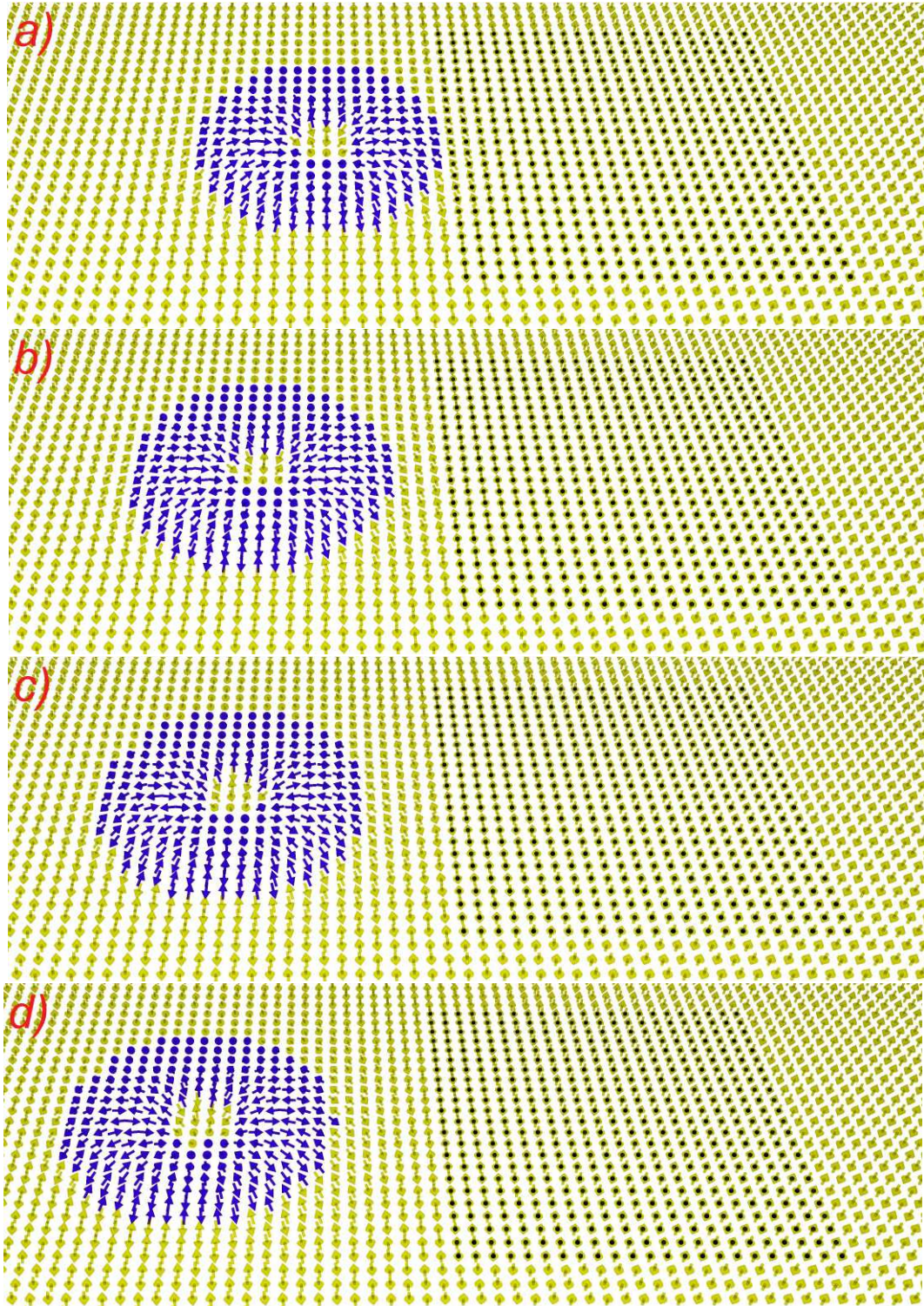


Figura 34 – Representação esquemática da armadilha de repulsão para um skyrmion antiferromagnético. A distância centro a centro é dada por $19nm$ e o defeito tem o parâmetro alterado em $A'' = 1.75A$ com área de $529nm^2$. Em a) a configuração inicial é dada com $t = 2ps$. Em b) ilustra a configuração com $25 ps$. Em c) ilustra a configuração com $50 ps$. Em d) ilustra a configuração em $102 ps$. Após esse intervalo, o skyrmion permanece afastado, mas não ocorre mais espalhamento uma vez que a interação magnética não é suficiente para isso.

Conforme o comportamento visto nas figuras 33 e 34, definimos uma área fixa de 441 nm para o defeito magnético e modificamos os valores dos parâmetros magnéticos até 75% do valor de referência. Chegamos aos seguintes resultados da energia de interação entre os dois, visto na figura 35.

Como a área de defeito é a mesma para todos, verificamos que para os valores $D'' < D$, $M_S'' > M_S$ e $A'' > A$, a energia entre o skyrmion-defeito é caracterizado por um poço de potencial. Ou seja, apresenta uma propriedade que o torna atrativo para aplicações de armadilhas de fixação. Para os valores $D'' > D$, $M_S'' < M_S$ e $A'' < A$, verificamos que a ocorre uma repulsão, a energia entre o skyrmion-defeito caracterizado por uma barreira de potencial, onde é possível utilizar esse comportamento para armadilhas de espalhamento. O valor do parâmetro magnético influência diretamente na intensidade de interação skyrmion-defeito, gerando valores maiores ou menores para o potencial. Podemos observar também na figura 35 que a variação de D'' e A'' ocorre uma reflexão do eixo horizontal, diferentemente de M_S'' , pois a relação entre a interação dipolo-dipolo é proporcional a M_S'' , enquanto D e A são lineares, como visto nas equações 3.14 até 3.17.

Agora, em vez de variarmos o valor do defeito magnético com área fixa, a variação ocorre na área do defeito magnético. A área do defeito varia de 25 nm^2 até 625 nm^2 . O valor escolhido para os parâmetros D'' , M_S'' e A'' foram de +25% e -25%. O resultado pode ser visto nas figuras 36, 38 e 37.

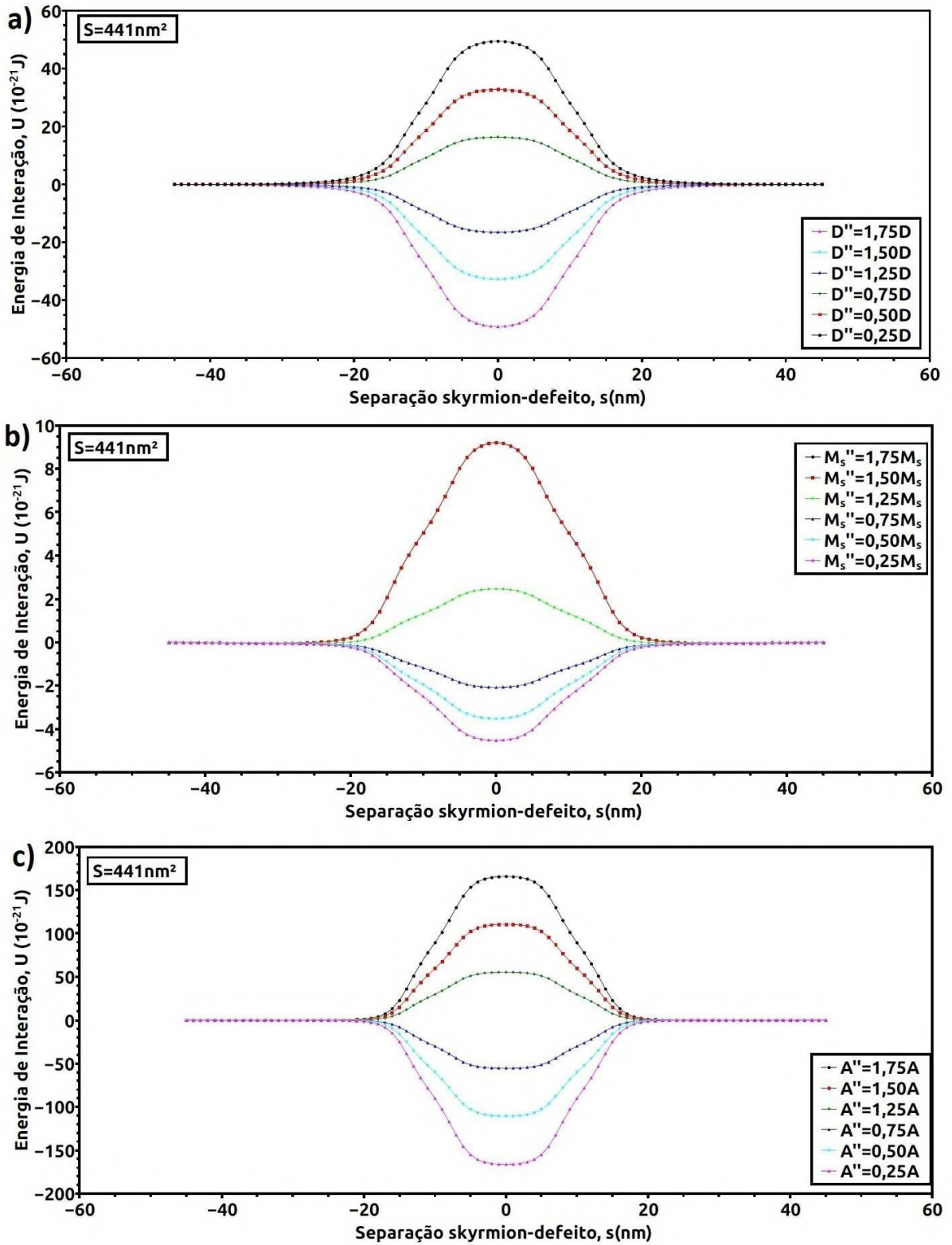


Figura 35 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. A área do defeito é de 441 nm^2 e a dimensão da nanofita de 200 nm de comprimento por 100 de largura. Em a) A variação ocorre para o parâmetro D'' . Em b) a variação ocorre para o parâmetro M_s'' . Em c) a variação ocorre para o parâmetro A'' . O intervalo de alteração dos parâmetros foi o mesmo para todos.

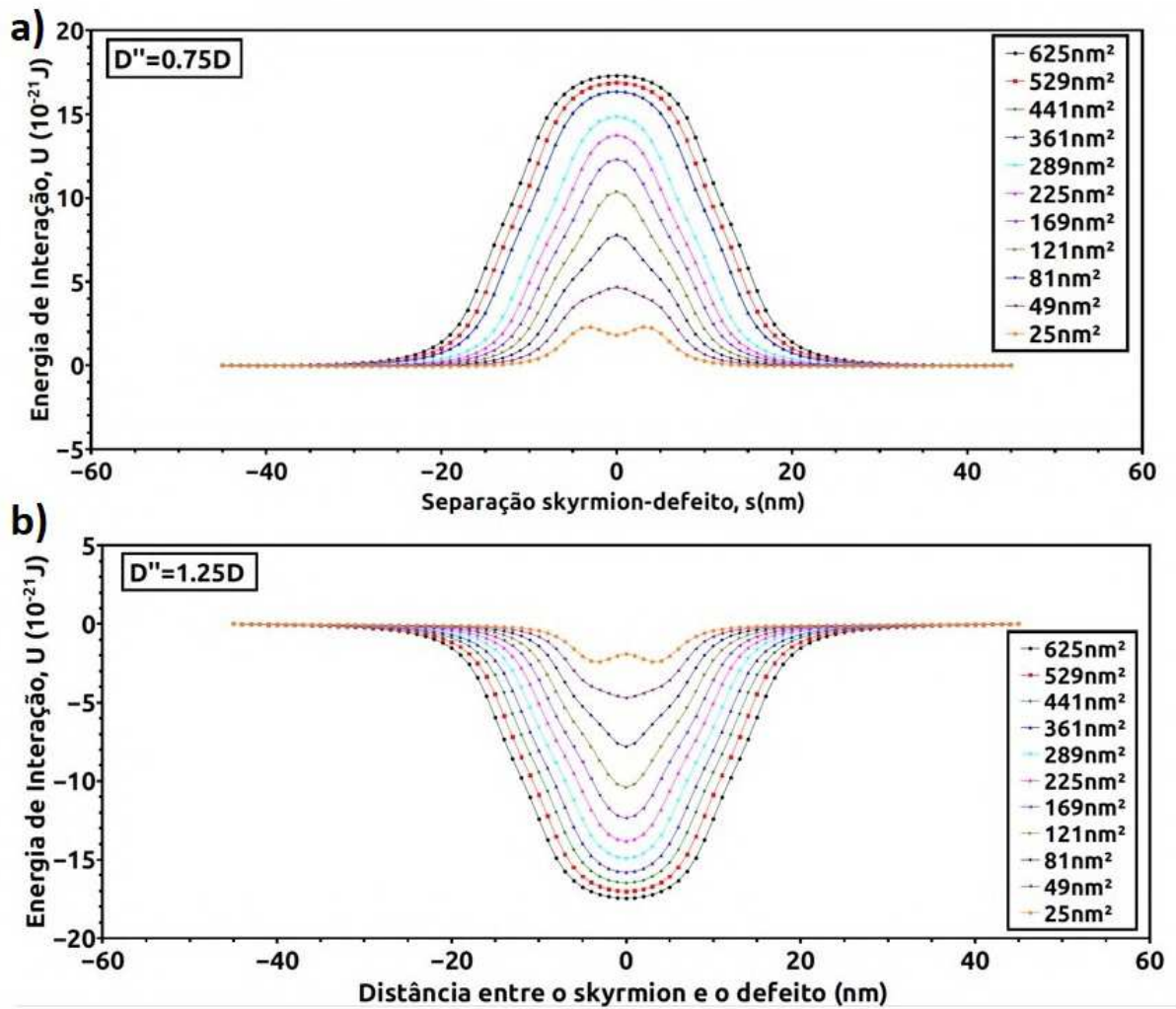


Figura 36 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético D em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em *a*) apresenta um tem carácter repulsivo, enquanto para *b*) apresenta um carácter atrativo

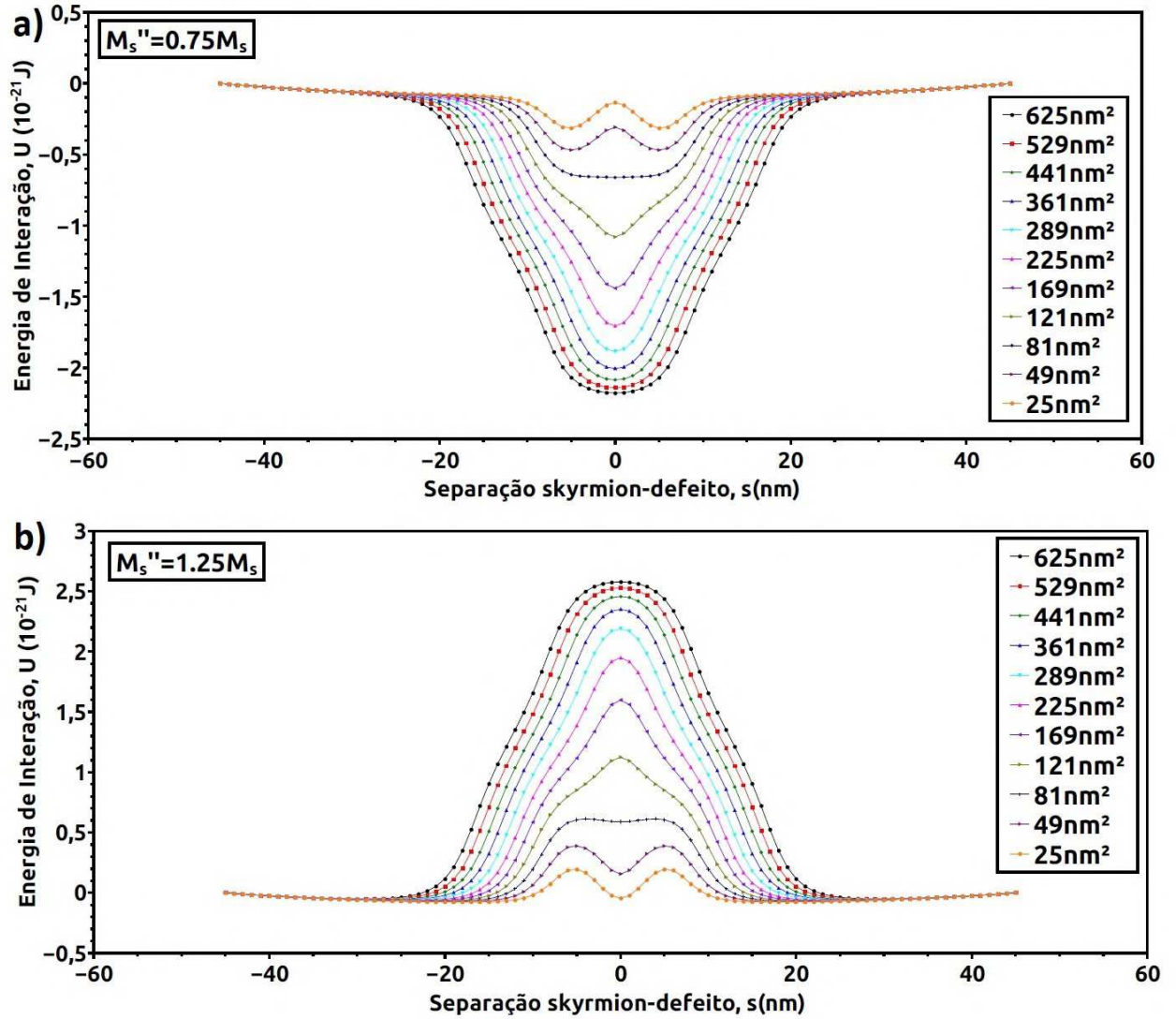


Figura 37 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético M_s em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em *a*) apresenta um tem carácter atrativo, enquanto para *b*) apresenta um carácter repulsivo.

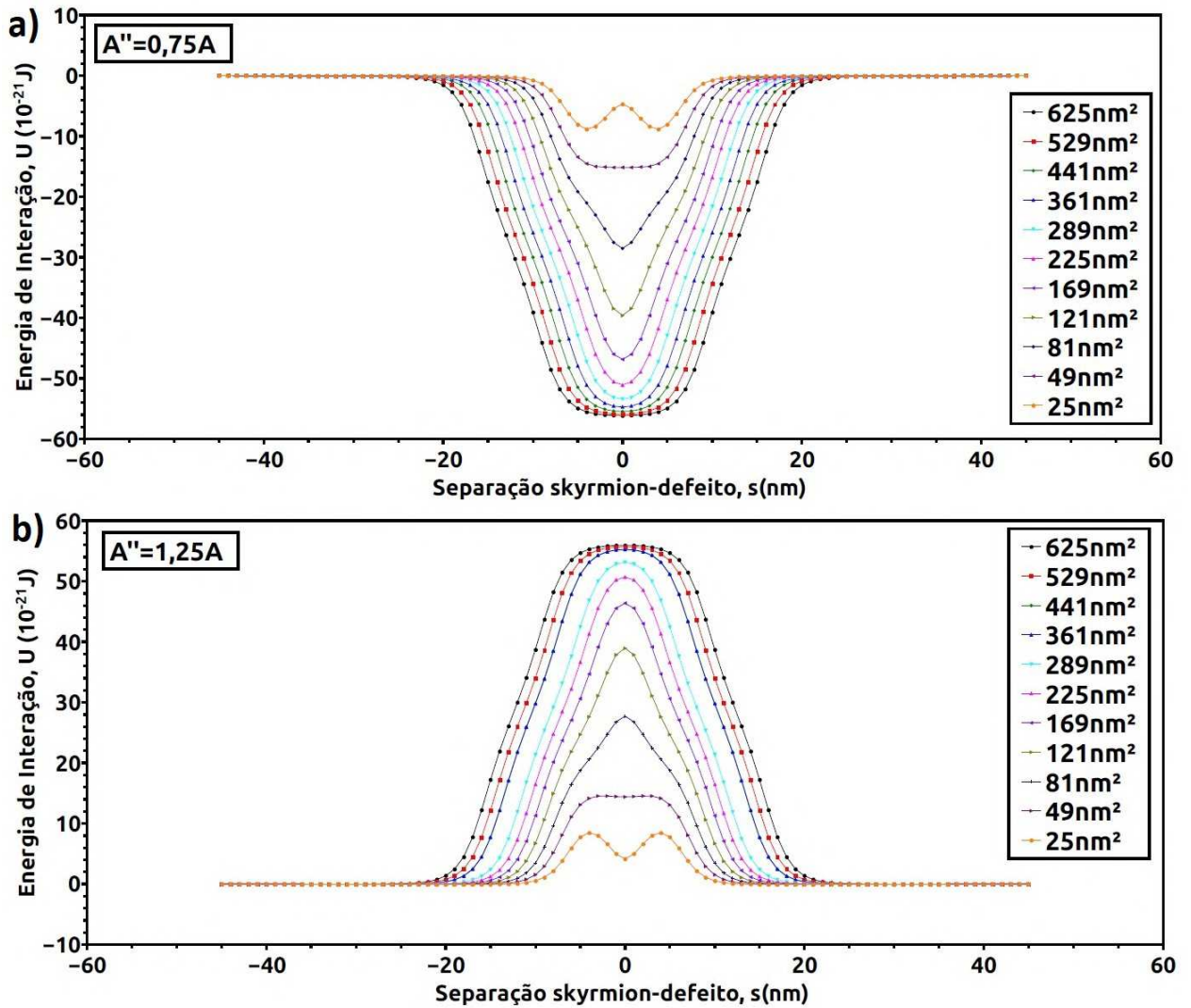


Figura 38 – Energia de interação entre o skyrmion antiferromagnético e o defeito em função da distância centro a centro. Variamos o parâmetro magnético A em 25% do valor original, tanto para cima como para baixo. Em *a)* apresenta um tem carácter atrativo, enquanto para *b)* apresenta um carácter repulsivo.

Podemos verificar que para áreas pequenas de defeito ocorre o surgimento de um poço potencial duplo e de uma barreira de potencial dupla, isso é caracterizado por ser uma ineficiência da armadilha gerada por áreas pequenas, uma vez que não comporta o skyrmion de forma estável na região do defeito [38]. A magnitude de interação se dá por ordem decrescente $A'' > D'' > M_g''$, onde podemos distinguir qual parâmetro magnético oferece uma maior efetividade para se tornar uma armadilha. Pelos resultados obtidos é possível observar que a energia de interação skyrmion-defeito é diminuída ou ampliada através do tamanho e intensidade do defeito magnético.

6 Conclusões e Perspectivas Futuras

Neste presente trabalho, por meio de simulação micromagnética estudamos inicialmente o comportamento de skyrmions antiferromagnéticos variando os parâmetros magnéticos de Dzyaloshinskii-Moriya, magnetização de saturação e o de rigidez de troca. Mostramos que o raio aumenta quando as constantes A e M_s diminuem, enquanto D aumenta. Em seguida, geramos um diagrama que pode ser utilizado como orientação para trabalhos experimentais, no qual mostramos um conjunto de pares ordenados das interações de anisotropia magnetocristalina e Dzyaloshinskii-Moriya, uma vez que essas interações podem ser modificados pela espessura de $KMnF_3$ e Pt , respectivamente [24]. Verificamos que valores discrepantes geram instabilidade no skyrmion ocorrendo a sua aniquilação ou a geração de texturas magnéticas. Essas texturas não são exclusivas de materiais antiferromagnéticos e podem ser encontradas também em materiais ferromagnéticos [39]. Ressaltamos que para valores altos de K e D , mesmo que exista o skyrmion em nosso diagrama, devemos ficar atentos, porque se olharmos para uma situação real a nanofita pode deixar de ter características de filmes finos devido à necessidade de aumentar a espessura dessas camadas.

Diante disso, modelamos uma nanofita e posicionamos intencionalmente um skyrmion entre duas regiões distintas, no qual uma conta com os valores de referência do material e na outra com aumento ou diminuição dos parâmetros D'' , A'' e M_s'' . Observamos que para os valores $D'' > D$, $A'' < A$ e $M_s'' < M_s$ ocorre uma atração do skyrmion e para os valores $D'' < D$, $A'' > A$ e $M_s'' > M_s$ ocorre uma repulsão do skyrmion. Deste modo, vemos que o seu comportamento é de se dirigir para a região que estende o seu raio, pois ocorre a minimização de energia do sistema.

Na última etapa, utilizamos como guia o resultado anterior e investigamos a possibilidade de construir armadilhas que busquem controlar a posição do skyrmion na nanofita, dado que do ponto de vista tecnológico é essencial ter o controle tanto da posição como de sua velocidade. Desta forma, para a região do defeito magnético usamos a geometria na forma de um quadrado e observamos que a eficiência da armadilha é ligada diretamente à área do defeito, ao valor do parâmetro magnético na região de defeito e da distância entre o skyrmion. Experimentalmente, a forma circular é mais fácil de ser gerada do que quadrática, mas se o formato adotado não for muito exótico, acreditamos

que nosso resultado será semelhantes desde que apresente área idêntica [39].

Uma perspectiva futura para o nosso grupo de pesquisa, é uma análise através da combinação dos parâmetros magnéticos no defeito magnético e utilizar outras geometrias para a construção de armadilhas. Ainda para futuros trabalhos, é fazer um estudo induzindo o deslocamento do skyrmion antiferromagnético e determinar valores efetivos para os parâmetros magnéticos para ser possível controlar o seu movimento pela nanofita.

REFERÊNCIAS

- [1] D. A. V. Tonidandel, A. E. A. de Araújo, and W. d. C. Boaventura, “História da Eletricidade e do Magnetismo: da Antiguidade à Idade Média,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 40, no. 4, 2018.
- [2] M. A. Riley, A. D. Walmsley, J. D. Speight, and I. R. Harris, “Magnets in medicine,” *Materials Science and Technology*, vol. 18, no. 1, pp. 1–12, 2002.
- [3] H. M. Williams, “The application of magnetic nanoparticles in the treatment and monitoring of cancer and infectious diseases,” *Bioscience Horizons: The International Journal of Student Research*, vol. 10, no. January, pp. 1–10, 2017.
- [4] C. Day, “Climate and weather in Physics Today,” *Physics Today*, vol. 72, no. 12, pp. 52–55, 2019.
- [5] “magnetic tape storage.” <https://www.ibm.com/ibm/history/ibm100/us/en/icons/tapestorage/>. "acessado em 05/05/2021",.
- [6] T. H. R. Skyrme and P. R. S. L. A, “A non-linear field theory,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 260, no. 1300, pp. 127–138, 1961.
- [7] J. C. de Souza Gomes, *Estudo de Sistemas Magnéticos Nanoestruturados via Simulação Computacional, com Aplicação em Dispositivos de Memórias Magnetorresistivas*. PhD thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2020.
- [8] A. Rosch, “[Supplementary] Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet,” *Science*, vol. 323, no. 5916, pp. 1–27, 2009.
- [9] A. S. Varentcova, S. von Malottki, M. N. Potkina, G. Kwiatkowski, S. Heinze, and P. F. Bessarab, “Toward room-temperature nanoscale skyrmions in ultrathin films,” *npj Computational Materials*, vol. 6, no. 1, 2020.
- [10] C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren, J. Sampaio, C. A. Vaz, N. Van Horne, K. Bouzehouane, K. Garcia, C. Deranlot, P. Warnicke, P. Wohlhüter, J. M. George, M. Weigand, J. Raabe, V. Cros, and A. Fert, “Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature,” *Nature Nanotechnology*, vol. 11, no. 5, pp. 444–448, 2016.
- [11] A. K. Nayak, V. Kumar, T. Ma, P. Werner, E. Pippel, R. Sahoo, F. Damay, U. K. Röbler, C. Felser, and S. S. Parkin, “Magnetic antiskyrmions above room temperature in tetragonal Heusler materials,” *Nature*, vol. 548, no. 7669, pp. 561–566, 2017.
- [12] Y. Tokunaga, X. Z. Yu, J. S. White, H. M. Rønnow, D. Morikawa, Y. Taguchi, and Y. Tokura, “A new class of chiral materials hosting magnetic skyrmions beyond room temperature,” *Nature Communications*, vol. 6, 2015.
- [13] D. R. Sahu, “Magnetic Skyrmions and Their Applications,” 2021.
- [14] K. M. Song, J. S. Jeong, B. Pan, X. Zhang, J. Xia, S. Cha, T. E. Park, K. Kim, S. Finizio, J. Raabe, J. Chang, Y. Zhou, W. Zhao, W. Kang, H. Ju, and S. Woo, “Skyrmion-based artificial synapses for neuromorphic computing,” *Nature Electronics*, vol. 3, no. 3, pp. 148–155, 2020.

- [15] L. M. Holanda, I. R. O. Ramos, A. P. Lima, J. P. M. Braga, and H. T. C. M. Souza, “Comportamento magnético de materiais por meio da mecânica estatística,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 42, 2020.
- [16] R. E. e R. Resnick, *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Editora Campus, 1979.
- [17] R. K. Kotnala and J. Shah, *Ferrite Materials: Nano to Spintronics Regime*, vol. 23. Elsevier, 2015.
- [18] P. Miguel Landeros Silva, *Propiedades magnéticas de nanoestructuras con simetría cilíndrica*. PhD thesis, Universidad de Santiago de Chile, 2007.
- [19] M. G. M. Junior, “Simulação da dinâmica do micromagnetismo de vórtices implementados em plataformas de programação em paralelo,” Master’s thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2016.
- [20] D. Toscano, *Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2015.
- [21] I. Dzyaloshinsky, “A thermodynamic theory of "weak"ferromagnetism of antiferromagnetics,” *J. Phys. Chem. Solids Pergamon Press*, vol. 4, pp. 241–255, 1958.
- [22] T. Moriya, “Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism,” *Physical Review*, vol. 120, no. 1, pp. 91–98, 1960.
- [23] J. M. Hopkinson and H. Y. Kee, “Origin and consequences of unpinned helical order: Application to mnsi under pressure,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 79, 1 2009.
- [24] D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, and F. Sato, “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*, vol. 480, pp. 171–185, 2019.
- [25] T. L. Gilbert, “A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 40, pp. 3443–3449, 11 2004.
- [26] L. LANDAU and E. LIFSHITZ, *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*. Pergamon Press plc, 1992.
- [27] S. Iida, “The difference between gilbert’s and landau-lifshitz’s equations,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 24, no. 5, pp. 625–630, 1963.
- [28] M. Salvador, *Propriedades magnéticas de sistemas de nanopartículas de domínio único*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), 2020.
- [29] E. L. M. da Paixão, *Estudo da parede de domínio transversal na presença de impurezas magnéticas sob efeito de corrente elétrica polarizada em spin via simulação micromagnética*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2018.

- [30] G. M. Wysin, “Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 22, no. 37, 2010.
- [31] A. Bogdanov and D. Yablonskii, “Thermodynamically stable "vortices" in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 95, no. 1, p. 178, 1989.
- [32] N. Nagaosa and Y. Tokura, “Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions,” *Nature Nanotechnology*, vol. 8, no. 12, pp. 899–911, 2013.
- [33] Y. Tokura and N. Kanazawa, “Magnetic Skyrmion Materials,” *Chemical Reviews*, vol. 121, no. 5, pp. 2857–2897, 2021.
- [34] X. Zhang, Y. Zhou, and M. Ezawa, “Magnetic bilayer-skyrmions without skyrmion Hall effect,” *Nature Communications*, vol. 7, 2016.
- [35] X. Zhang, Y. Zhou, and M. Ezawa, “Antiferromagnetic Skyrmion: Stability, Creation and Manipulation,” *Scientific Reports*, vol. 6, pp. 1–8, 2016.
- [36] W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, and A. Fert, “Room-temperature stabilization of antiferromagnetic skyrmions in synthetic antiferromagnets,” *Nature Materials*, vol. 19, no. 1, pp. 34–42, 2020.
- [37] K. Persson, “Materials data on kmnf3 (sg:221) by materials project,” 10 2014. An optional note.
- [38] X. Liang, G. Zhao, L. Shen, J. Xia, L. Zhao, X. Zhang, and Y. Zhou, “Dynamics of an antiferromagnetic skyrmion in a racetrack with a defect,” *Physical Review B*, vol. 100, no. 14, p. 144439, 2019.
- [39] C. Jin, C. Song, J. Wang, and Q. Liu, “Dynamics of antiferromagnetic skyrmion driven by the spin Hall effect,” *Applied Physics Letters*, vol. 109, no. 18, 2016.
- [40] A. S. Samardak, A. V. Davydenko, A. G. Kolesnikov, A. Y. Samardak, A. G. Kozlov, B. Pal, A. V. Ogniev, A. V. Sadovnikov, S. A. Nikitov, A. V. Gerasimenko, I. H. Cha, Y. J. Kim, G. W. Kim, O. A. Tretiakov, and Y. K. Kim, “Enhancement of perpendicular magnetic anisotropy and Dzyaloshinskii–Moriya interaction in thin ferromagnetic films by atomic-scale modulation of interfaces,” *NPG Asia Materials*, vol. 12, no. 1, 2020.
- [41] A. K. Behera, S. S. Mishra, S. Mallick, B. B. Singh, and S. Bedanta, “Size and shape of skyrmions for variable dzyaloshinskii-moriya interaction and uniaxial anisotropy,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 51, 6 2018.