

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

**Isaac Andrade Santece**

**Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional  
Aplicados em Nanofitas de Co/Pt.**

Juiz de Fora

2019

**Isaac Andrade Santece**

**Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional  
Aplicados em Nanofitas de Co/Pt.**

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

Coorientador: Sidney de Andrade Leonel

Juiz de Fora

2019

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

Santece, Isaac Andrade.

Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional Aplicados em Nanofitas de Co/Pt. / Isaac Andrade Santece. – 2019. 68 f. : il.

Orientador: Pablo Zimmermann Coura

Coorientador: Sidney de Andrade Leonel

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2019.

1. Skyrmion. 2. Nanomagnetismo. 3. Dinâmica. 4. Estrutura. I. Coura, Pablo Zimmermann, orient. II. Leonel, Sidney Andrade III. Título.

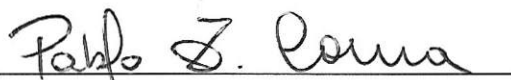
**Isaac Andrade Santece**

**"Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional Aplicados em Nanofitas de Co/Pt."**

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

Aprovada em 02 de agosto de 2019.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura - Orientador  
Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF



Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa  
Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG



Dr. Danilo Toscano  
Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por mais essa etapa vencida.

Aos meus pais, Leila e Luiz, e ao meu irmão, Miguel, por serem sempre meu porto seguro. Muito obrigado por todo apoio, amor, compreensão e por acreditarem mais em mim do que eu mesmo. Tudo que fiz até aqui e o que ainda alcançarei, é por vocês.

Aos meus avós, tios, tias, primos e primas pelo apoio e compreensão às minhas ausências.

Ao meu orientador, Pablo e ao meu coorientador, Sidney por todo apoio, companheirismo e amizade. Obrigado por fazerem parte desta importante etapa da minha vida, a qual vocês tiveram papel fundamental. Obrigado por acreditar em mim.

Aos amigos que fiz durante estes dois anos de mestrado. Obrigado pelas conversas, pelas cervejas, pelos estudos e por serem minha segunda família.

Aos amigos do GFMC, em especial Josiel, Max e João por todo apoio, cooperação e por suportar minhas dúvidas e questionamentos. Muito obrigado.

Aos professores, que são os responsáveis pela minha formação (da básica ao superior). Essa conquista também é de vocês.

Por fim, gostaria de agradecer a UFJF, o departamento de Física e seus funcionários, principalmente ao Domingos, pela sua paciência e competência. Agradeço também às agências de fomento CAPES, CNPq, FAPEMIG, FINEP.

“Há verdadeiramente duas coisas diferentes: saber e crer que se sabe. A ciência consiste em saber; em crer que se sabe reside a ignorância.”

**Hipócrates**

## RESUMO

Skyrmions são considerados candidatos promissores para a substituição dos atuais métodos de gravação magnética devido a sua estabilidade e por ser facilmente controlado por uma corrente de spin polarizada. Diante disso, é necessário entender o comportamento desta quasipartícula em nanofitas magnéticas durante sua dinâmica. São presentes nem materiais magnéticos, sendo uma delas essenciais para o surgimento de skyrmions em estruturas magnéticas, e as equações da dinâmica de magnetização. Realizamos simulações micromagnéticas para entender o movimento de um skyrmion inicialmente centrado em uma nanofita magnética a partir da aplicação de corrente de spin polarizada. Com o resultado das simulações, utilizamos um algoritmo bioinspirado conhecido na literatura como Método dos Sapos para determinar com precisão a posição do skyrmion durante sua dinâmica. Com as trajetórias, analisamos tanto a velocidade inicial, quanto a variação da velocidade durante a dinâmica. Além disso, foi observado mudanças na estrutura do skyrmion, como o raio, a carga topológica e os componentes do tensor dissipativo, quando o mesmo se aproximava dos limites da nanofita. Por fim, também estudamos a energia de interação entre o skyrmion e a borda da nanofita.

Palavras-chave: Skyrmion. Nanomagnetismo. Dinâmica. Estrutura.

## ABSTRACT

Skyrmions are considered promising candidates for replacing current magnetic recording methods because of their stability and being easily controlled by a polarized spin current. On this, it is necessary to understand the behavior of this quasiparticle in magnetic nanowires during its dynamics. We perform micromagnetic simulations to understand the movement of a skyrmion initially centered on a magnetic nanowire from the application of polarized spin current. With the result of the simulations, we use a bioinspired algorithm known in the literature as the Frog Method to accurately determine the position of the skyrmion during its dynamics. In addition, changes were observed in the structure of the skyrmion, such as the radius, the topological load and the components of the dissipative tensor, when it approached the limits of the nanowire. Finally, we also studied the interaction energy between the skyrmion and the edge of the nanowire.

Key-words: Skyrmion. Nanomagnetism. Dynamics. Structure.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Órbita circular realizada por um elétron. Figura retirada da referência [1]	14
Figura 2	– Representação de domínios magnéticos contido em materiais ferromagnéticos. As setas indicam a direção da Magnetização local. . . . .	17
Figura 3	– Orientação dos momentos magnéticos frente ao campo externo $\vec{H}^{ext}$ aplicado. . . . .	18
Figura 4	– Representação dos primeiros vizinhos que participam da interação de troca. As setas vermelhas representam os spins vizinhos do spin representado pela seta preta. . . . .	19
Figura 5	– Representação da interação dipolar entre dois momentos de spins ( $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$ ), distanciados $\vec{r}_{12}$ entre si. . . . .	21
Figura 6	– Representação da interação dipolar em um ferromagneto. As setas azuis representam os momentos magnéticos que interagem com o momento representado pela seta preta. . . . .	22
Figura 7	– Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. a) Sistema real. b) Sistema rearranjado pela aproximação micromagnética-Figura retirada da referência [2]. . . . .	26
Figura 8	– Momento magnético $\vec{\mu}$ precessando em torno de um campo magnético efetivo. . . . .	30
Figura 9	– Representação da direção dos vetores torques que agem sobre o momento magnético $\vec{\mu}$ . $\vec{T}$ é o torque de precessão e $\vec{T}_D$ o torque de "damping". Figura adaptada da referência [3]. . . . .	31
Figura 10	– Dinâmica de magnetização de um momento magnético no campo. a) Dinâmica sem amortecimento, i.e., $\alpha = 0$ . Faz com que o momento magnético realize um movimento de precessão em torno do campo. b) Dinâmica com amortecimento ( $\alpha > 0$ ). O momento magnético realiza um movimento de precessão amortecida, espiralando em torno do campo até atingir o alinhamento. Figura adaptada da referência [4]. . . . .	31
Figura 11	– Representação gráfica dos dois tipos de skyrmions. a) Skyrmion do tipo Bloch. Os spins rotacionam tangencialmente como espiral helicoidal. b) Skyrmion do tipo Néel. Os spins rotacionam do centro até a borda com quiralidade fixa. Em ambos os casos, os spins que compõem o núcleo e a borda do skyrmion são antiparalelas. As setas representam a direção do spin. Figura adaptada de [5]. . . . .	37
Figura 12	– Ilustração da definição do número de skyrmion $N_{sk}$ . O número de vezes que o círculo é envolvido. Figura adaptada de [6]. . . . .	38
Figura 13	– Estruturas de Skyrmions para os possíveis valores de $m$ e $\gamma$ . As cores indicam o componente normal ao plano, com branco indicando a direção para cima e preto para baixo-Figura adaptada de [7]. . . . .	39

Figura 14 – Perfil da configuração de spins de um skyrmion Néel, com $m = 1$ e $\gamma = 0$ utilizado no cálculo da dinâmica de magnetização. . . . .	48
Figura 15 – Configuração de spins de um skyrmion Néel, com $m = 1$ e $\gamma = 0$ utilizado no cálculo da dinâmica de magnetização. . . . .	48
Figura 16 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Néel, com $m = -1$ e $\gamma = 0$ . . . . .	49
Figura 17 – Configuração de spins de um skyrmion Néel, com $m = 1$ e $\gamma = \pi$ . . . . .	49
Figura 18 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Néel, com $m = -1$ e $\gamma = \pi$ . . . . .	49
Figura 19 – Configuração de spins de um skyrmion Bloch, com $m = 1$ e $\gamma = \frac{\pi}{2}$ . . . . .	50
Figura 20 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Bloch, com $m = -1$ e $\gamma = \frac{\pi}{2}$ . . . . .	50
Figura 21 – Configuração de spins de um skyrmion Bloch, com $m = 1$ e $\gamma = -\frac{\pi}{2}$ . . . . .	50
Figura 22 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Bloch, com $m = -1$ e $\gamma = -\frac{\pi}{2}$ . . . . .	51
Figura 23 – Sequencia de frames da dinâmica de skyrmion em uma nanofita. . . . .	52
Figura 24 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método das cargas. . . . .	52
Figura 25 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método das médias das magnetizações. . . . .	53
Figura 26 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método dos sapos. . . . .	54
Figura 27 – Apresentação das 3 trajetórias calculadas pelos 3 diferentes métodos. . . . .	55
Figura 28 – Sobreposições das 3 trajetórias encontradas com a imagem da dinâmica do skyrmion na nanofita. O skyrmion está representado pelo círculo laranja. . . . .	56
Figura 29 – Componentes $x$ e $y$ da velocidade do skyrmion durante sua dinâmica. . . . .	57
Figura 30 – Posição do skyrmions nos eixos $x$ e $y$ nos primeiros 300 passos computacionais da dinâmica, calculado pelo método dos sapos. . . . .	58
Figura 31 – Representação da definição do raio do skyrmion. . . . .	58
Figura 32 – Gráfico da variação do raio do skyrmion em relação a sua posição em relação ao eixo $y$ , durante sua dinâmica em uma nanofita de Co/Pt. A nanofita possui $80 \text{ nm}$ de largura. . . . .	59
Figura 33 – Gráfico da variação da carga topológica do skyrmion em relação a sua posição em relação ao eixo $x$ , durante sua dinâmica em uma nanofita de Co/Pt. A nanofita possui $80 \text{ nm}$ de largura. . . . .	60
Figura 34 – Gráfico da energia de interação skyrmion-borda em relação à distância do centro do skyrmion no eixo $y$ . Inicialmente, o skyrmion estava localizado no centro da nanofita de Co/Pt com dimensão $(500 \times 80 \times 2) \text{ nm}^3$ . . . . .	61
Figura 35 – Sequencia de frames da dinâmica de skyrmion em uma nanofita com uma densidade de corrente alta. . . . .	61

Figura 36 – Gráfico das componentes $D_{xx}$ e $D_{yy}$ do tensor dissipativo $\mathcal{D}$ em função da posição do skyrmion no eixo $y$ . . . . .	62
Figura 37 – Gráfico do parâmetro $s$ em função da posição do skyrmion no eixo $y$ . . . . .	62

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>MODELO TEÓRICO E MODELAGEM COMPUTACIONAL</b>	<b>14</b>
2.1	MATERIAIS MAGNÉTICOS E MOMENTO MAGNÉTICO . . . . .	14
2.2	INTERAÇÕES MAGNÉTICAS . . . . .	17
2.2.1	INTERAÇÃO DE ZEEMAN . . . . .	17
2.2.2	INTERAÇÃO DE TROCA . . . . .	18
2.2.3	ANISOTROPIA . . . . .	20
2.2.4	INTERAÇÃO DIPOLAR . . . . .	21
2.2.5	INTERAÇÃO DE DZYALOSHINSKII-MORIYA . . . . .	23
2.3	A HAMILTONIANA DO SISTEMA . . . . .	24
2.4	CAMPO EFETIVO LOCAL . . . . .	24
2.5	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA . . . . .	26
<b>3</b>	<b>DINÂMICA DE SPINS . . . . .</b>	<b>29</b>
3.1	A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT . . . . .	29
3.2	O TERMO DE CORRENTE DA EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ- GILBERT . . . . .	33
<b>4</b>	<b>SKYRMIONS . . . . .</b>	<b>37</b>
4.1	EQUAÇÃO DE THIELE: A EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA O SKYRMION . . . . .	39
4.2	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE PAR UM SKYRMION EM UM PLANO INFINITO . . . . .	41
<b>5</b>	<b>MÉTODOS NUMÉRICOS PARA MAPEAR A POSIÇÃO DO SKYRMION . . . . .</b>	<b>43</b>
5.1	MÉTODO DA CARGA E MÉTODO DA MÉDIA DAS MAGNETIZA- ÇÕES . . . . .	43
5.2	ALGORÍTIMOS BIOINSPIRADOS: O MÉTODO DOS SAPOS . . . . .	43
<b>6</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .</b>	<b>46</b>
6.1	CONFIGURAÇÃO INICIAL DE SKYRMIONS . . . . .	46
6.2	DINÂMICA DE SKYRMION . . . . .	51
6.2.1	TRAJETÓRIA . . . . .	52
6.2.2	VELOCIDADE DO SKYRMION . . . . .	57
6.2.3	EFEITO DE BORDA . . . . .	58

7	CONCLUSÕES . . . . .	63
	REFERÊNCIAS . . . . .	64
	APÊNDICE A – Conservação do módulo do momento magnético na Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) . . . . .	68

## 1 INTRODUÇÃO

Nanomagnetismo é a área de pesquisa que trata das propriedades magnéticas de materiais na escala nanométrica, como partículas, filmes finos, entre outros. Um nanômetro, também conhecido anteriormente como milimícron, é uma unidade de medida de comprimento que corresponde a  $1 \times 10^{-9}$  metros. O fenômeno do nanomagnetismo é aplicado em várias áreas, entre elas a medicina [8], geologia [9], e uma das mais relevantes, a eletrônica [10].

Uma das aplicações do nanomagnetismo na eletrônica é armazenar dados a partir da gravação magnética. Este método é bastante explorado por permitir uma grande quantidade de informação em um pequeno espaço. O primeiro dispositivo criado a partir da gravação magnética foi uma máquina de ordenação alfabética criada em 1952 pela IBM. Um grande exemplo da aplicação do armazenamento magnético nos dias de hoje são os discos rígidos, ou simplesmente conhecidos por HD (do inglês *hard drive*) e a memória ram (MRAM), que compõe os computadores. Os discos magnéticos contidos em um HD são recobertos por uma fina camada magnética. A cabeça de leitura e gravação de um disco rígido funciona como um eletroímã (bobina) pequeno e com grande precisão [11]. Na gravação de dados, a cabeça produz um campo magnético que orienta os momentos magnéticos contidos no disco. Para ler, a cabeça detecta o campo magnético produzido pelos momentos magnéticos, e a variação do campo magnético gera uma corrente na bobina que é interpretada, pela placa lógica do HD como sequência de bits [11]. De acordo com essa orientação ou polaridade, defini-se o bit (1 ou 0).

Devido ao grande avanço tecnológico, é possível fabricar dispositivos eletrônicos cada vez menores com maior capacidade de armazenamento de dados. Com o avanço dessas técnicas surgiram novas propostas de métodos de gravação magnética. Entre elas estão a *Magnetic domain-wall racetrack memory* [10] proposta por S. S. Parkin et al. em 2008, composta por uma matriz de nanofitas magnéticas [12] e skyrmions magnéticos.

Skyrmions magnéticos foram previstos pela primeira vez em 1989 e observados experimentalmente em 2009 a temperaturas muito baixas ( $-250^{\circ}C$ ), entretanto a partir de sua descoberta em temperatura ambiente no ano de 2013 [13], tornou-se um grande candidato a novos métodos de gravação magnética. Além de serem estruturas estáveis, skyrmions podem ser movimentados em nanofitas a partir de aplicação de corrente de spin polarizado [14]. Porém, barreiras ainda precisam ser superadas, por exemplo, o efeito hall de skyrmion.

Neste trabalho, além de apresentar modelos de configuração de diferentes skyrmion, estudamos também algumas propriedades durante a dinâmica do skyrmion devido à aplicação de uma densidade de corrente de spin polarizada, via simulação computacional. Através de métodos numéricos já conhecidos, e por uma nova proposta (métodos dos

sapos), encontramos a posição dos skyrmions e fizemos uma comparação dos resultados. A partir da trajetória encontrada, calculamos a velocidade e fizemos uma comparação com a previsão teórica pela equação de Thiele. Propriedades do skyrmions como a variação raio do skyrmion durante a dinâmica e o efeito de borda também foram mostrados.

No segundo capítulo, faremos uma revisão sobre os principais conceitos sobre materiais magnéticos. Trataremos das interações magnéticas fundamentais entre os momentos magnéticos (interação dipolar, interação de troca) e uma interação necessária para o surgimento de skyrmions em materiais magnéticos (Interação Dzyaloshinskii-Moriya). Ainda neste capítulo, montaremos a hamiltoniana do nosso sistema, calcularemos o campo efetivo e introduziremos o modelo micromagnético.

No capítulo 3 introduziremos as equações da dinâmica de magnetização, sendo uma delas a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) com a adição do termo de torque devido a uma corrente elétrica, que é a equação utilizada em nossas simulações computacionais.

Nos capítulo 4, apresentaremos o objeto de estudo deste trabalho, os skyrmions magnéticos. Discutiremos desde seu surgimento, suas principais características, até seus tipos. Também apresentaremos uma equação derivada da equação LLG, conhecida como Equação de Thiele, e suas considerações. Já nos capítulos 5 apresentaremos modelos numéricos utilizados para encontrar a posição do skyrmion na nanofita, entre eles um novo método aplicado ao magnetismo, o Método dos Sapos.

Por fim, no sexto e sétimo capítulo apresentaremos os resultados dos estudos realizados sobre a estrutura e dinâmica de skyrmions em nanofitas magnéticas e nossas conclusões.

## 2 MODELO TEÓRICO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Toda matéria, em qualquer estado físico, possui propriedades magnéticas devido à existência de momentos magnéticos em sua estrutura. Do ponto de vista clássico, a origem dos momentos magnéticos se dá devido a dois movimentos associados ao elétron: o momento angular orbital e o momento angular de spin. O momento magnético total  $\vec{\mu}$  é a soma destes momentos que podem interagir com campos externos ou entre si. Neste capítulo, discutiremos sobre as interações de momentos magnéticos que compõem uma nanofita de Co/Pt.

### 2.1 MATERIAIS MAGNÉTICOS E MOMENTO MAGNÉTICO

Considere um elétron que se move em uma órbita circular com velocidade  $v$  (figura1) gerando uma corrente  $I$  dada por:

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

sendo  $e$  a carga do elétron e  $T$  o período da órbita circular. Dado esta configuração,

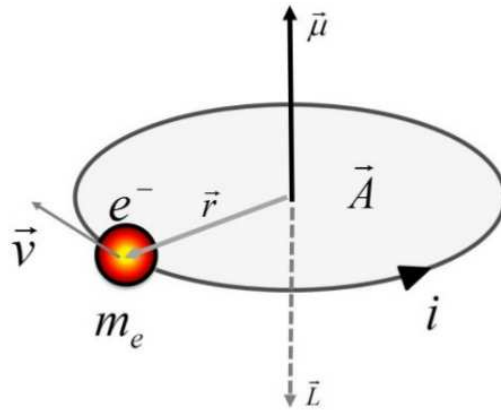


Figura 1 – Órbita circular realizada por um elétron. Figura retirada da referência [1]

podemos escrever que o módulo do momento de dipolo magnético orbital é definido por:

$$\mu_l = IA = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2}. \quad (2.2)$$

Sabemos que, classicamente, o momento angular orbital é representado por  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ . Já que em toda a órbita circular o vetor momento  $\vec{p}$  é perpendicular ao vetor posição  $\vec{r}$ , o módulo do momento angular orbital é dado por:

$$L = rp = rmv. \quad (2.3)$$

Multiplicando e dividindo a equação 2.3 pela massa do elétron  $m_e$ , teremos

$$\mu_l = \frac{evr}{2} \frac{m_e}{m_e} = \frac{evrm_e}{2m_e} = \frac{e}{2m_e} |\vec{L}|. \quad (2.4)$$



A relação entre o momento de dipolo magnético orbital  $\vec{\mu}_l$  e o momento angular orbital  $\vec{L}$  para uma distribuição de carga  $Q$  e massa  $m$ , é dada por[15]:

$$\vec{\mu}_l = g \frac{Q}{2m} \vec{L} \quad (2.5)$$

onde  $g$  é conhecido como fator de Landé. Desta forma a equação 2.4 pode ser reescrita como:

$$\vec{\mu}_l = -g_l \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (2.6)$$

onde  $g_l = 1$  é o fator de Landé orbital.

A partir do experimento de Stern-Gerlach, foi observado que o elétron possui um momento angular intrínseco denominado de momento de Spin  $\vec{s}$ . De forma análoga a equação 2.5, podemos definir o momento de dipolo magnético para o momento de spin  $\vec{s}$  como [15]:

$$\vec{\mu}_s = -\gamma \vec{s} = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{s}, \quad (2.7)$$

sendo  $g_s = 1$  o fator de Landé do spin.

Os momentos orbitais e de spin são representados, respectivamente, como a soma dos momentos orbitais  $\vec{l}_i$  e dos momentos de spin  $\vec{s}_i$  em cada elétron que compõe a camada de valência. O que matematicamente representa:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i, \quad (2.8)$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i. \quad (2.9)$$

Dado um átomo em um estado quântico qualquer, definimos como vetor momento angular total, a seguinte soma:

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

Então, na forma geral temos que o momento de dipolo é representado como

$$\vec{\mu} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J}, \quad (2.11)$$

onde  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  é conhecido como Magneton de Bohr e  $\gamma$  é a razão giromagnética.

Iremos definir agora outras grandezas fundamentais para determinação das propriedades magnéticas em materiais.

Considerando um material de volume  $V$ , o vetor magnetização  $\vec{M}$  é representado pela soma de todos os momentos magnéticos  $\vec{\mu}$  sobre o seu volume:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i, \quad (2.12)$$

com unidade no sistema internacional (SI) dada por  $A/m$ .

Derivada das equações de Maxwell, uma importante relação é definida entre o campo magnético induzido  $\vec{B}$  e os vetores campo magnético  $\vec{H}$  e a magnetização  $\vec{M}$ . Esta relação é dada por:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.13)$$

sendo  $\mu_0$  a permeabilidade magnética do vácuo [16]. Em meios magnéticos lineares, temos

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

sendo  $\chi_m$  a susceptibilidade magnética. Logo, a equação 2.13 se torna:

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

onde  $\mu$  é definido como a permeabilidade magnética do meio.

Ao aplicarmos um campo externo  $\vec{B}_{ext}$  em diferentes materiais, podemos obter distintas configurações devido à interação destes momentos magnéticos com o campo aplicado. As diferentes respostas classificam os materiais magnéticos dos quais falaremos agora.

Presente em todos os materiais contidos na natureza, o fenômeno diamagnetismo é caracterizado pela diminuição do campo total  $\vec{B}$  no interior dos materiais. Este campo é a sobreposição dos campos  $\vec{B}$  e a magnetização  $\vec{M}$ . Tal fenômeno ocorre, pois os dipolos magnéticos (ou a magnetização  $\vec{M}$ ) induzidos pelo campo externo se alinham antiparalelamente a  $\vec{B}$ . Para estes materiais, a susceptibilidade magnética  $\chi_m$  é pequena e negativa (na ordem de  $10^{-5}$ ). Exemplos destes materiais são: prata, mercúrio, diamante, água e chumbo. Apesar do diamagnetismo estar presente em todos os materiais, outros dois fenômenos mais fortes podem mascará-lo. O primeiro, o paramagnetismo, ocorre em materiais que possuem átomos com elétrons desemparelhados. Agora, além dos dipolos induzidos pela aplicação do campo externo, há uma contribuição de momentos magnéticos intrínsecos. Diferentemente do diamagnetismo, ao aplicarmos um campo externo, os momentos magnéticos se alinham paralelamente a  $\vec{B}_{ext}$  fazendo com que o campo total  $\vec{B}$  no interior do material aumente. A susceptibilidade magnética  $\chi_m$  para magnetos é positiva e pequena. Exemplos de materiais paramagnetos são: platina, magnésio, oxigênio (na forma líquida), urânio e alumínio. O segundo fenômeno e mais expressivo deles, é o ferromagnetismo. Estes materiais são característicos por apresentarem magnetização espontânea, devido à interação de troca que é de curto alcance e intensa. No entanto, nesses sistemas temos a formação de domínios devido à interação dipolar de longo alcance e fraca. A aparição destes domínios magnéticos se dá pela competição entre duas interações magnéticas fundamentais: a interação dipolar e a interação de troca (falaremos destas interações na próxima seção). As pequenas regiões com magnetização local contribuem para que o material possua magnetização total  $\vec{M}_{tot}$  diferente de zero

$$\vec{M}_{tot} = \sum_i \vec{M}_i \neq 0. \quad (2.16)$$

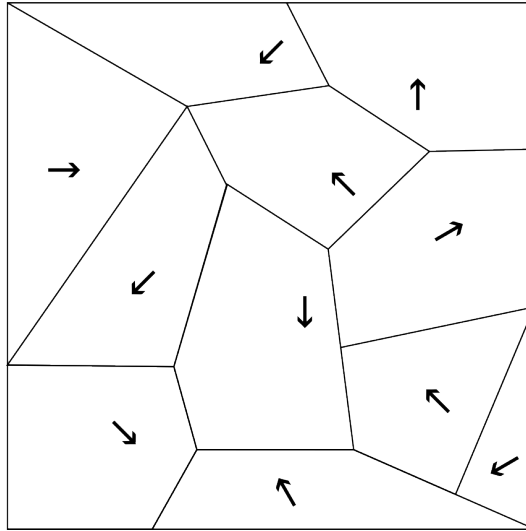


Figura 2 – Representação de domínios magnéticos contido em materiais ferromagnéticos. As setas indicam a direção da Magnetização local.

Quando aplicado um campo externo, os materiais ferromagnéticos agem de forma análoga aos paramagnéticos. Porém, devido à susceptibilidade magnética  $\chi_m \gg 1$ , atuam de forma mais eficiente, gerando campos magnéticos de maiores intensidades. Alguns materiais ferromagnéticos conhecidos são o cobalto, níquel, ferro e gadolínio.

Materiais ferromagnéticos, a uma certa temperatura, podem se comportar como um paramagneto. Esta temperatura é conhecida como temperatura de Curie  $T_c$ . Acima de  $T_c$  a magnetização é nula na ausência de campos externos. Abaixo, a Tabela 1 apresenta valores experimentais da temperatura de Curie para alguns materiais ferromagnéticos.

Tabela 1 – Valores da temperatura de Curie  $T_c$  para alguns materiais ferromagnéticos [17]

Material	$T_c(K)$
Fe	1043
Co	1388
Ni	627,2
Gd	292,5
CrO <sub>2</sub>	386,5
CrBr <sub>3</sub>	32,56
EuS	16,50

## 2.2 INTERAÇÕES MAGNÉTICAS

### 2.2.1 INTERAÇÃO DE ZEEMAN

A interação de Zeeman trata-se de uma interação perturbada causada pela aplicação de um campo externo  $\vec{H}_{ext}$ . Os momentos magnéticos do material se orientam com o campo de forma a diminuir a energia total da interação. A energia de interação total para

um material com  $N$  momentos magnéticos é dada por:

$$U = - \sum_i^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{local} = -\mu_o \sum_i^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}_i^{ext} \quad (2.17)$$

e é conhecida como a equação de energia de interação Zeeman. Note que, para haver minimização de energia, os momentos  $\mu_i$  devem estar alinhados paralelamente a  $\vec{H}_i^{ext}$ . A figura abaixo representa o alinhamento dos momentos magnéticos ao campo aplicado.

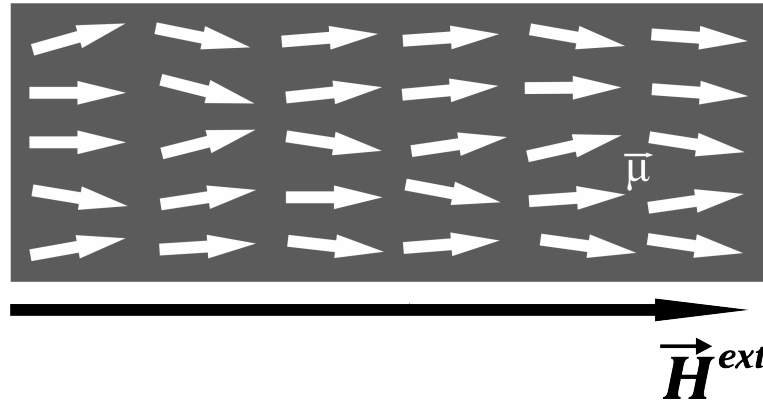


Figura 3 – Orientação dos momentos magnéticos frente ao campo externo  $\vec{H}^{ext}$  aplicado.

Um fato a ser observado é que os momentos magnéticos só se alinharão completamente ao campo se a temperatura estiver em  $T = 0$ . Fora desta condição, a temperatura produz oscilações nas condições de equilíbrio, de modo que quanto maior a temperatura maior será as oscilações e conseqüentemente menor será a magnetização do material.

## 2.2.2 INTERAÇÃO DE TROCA

A interação de troca é a interação responsável pelo alinhamento local dos momentos magnéticos. A energia de interação entre dois spins é dada por

$$U = - \frac{J_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.18)$$

onde a constante  $J_{12}$  é conhecida como constante de acoplamento de troca, e possui dimensão de energia. Esta constante está associada à superposição das funções espaciais dos íons  $i$  e  $j$ , sendo apreciável apenas para um par de íons muito próximos [18]. A interação de troca respeita o princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana existente entre os elétrons.

A energia dada na equação 2.18 é definida apenas para dois sítios, porém, em um sistema real com  $N$  átomos teremos:

$$U = - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.19)$$

A equação acima é conhecida como a representação do modelo de Heisenberg. Os índices  $i$  e  $j$  representam posições na rede, e por consequência foi adicionado o termo  $1/2$  na equação a fim de evitar dupla contagem de uma única interação (a interação dos sítios 1-2 e 2-1 é a mesma).

A interação de troca é uma interação de curto alcance, i.e. as interações fora dos primeiros vizinhos (ver figura 4) é muito pequena. A razão deste curto alcance se dá na definição da constante de troca  $J_{ij}$ , que está relacionada as integrais sobre as funções de onda levando em consideração o efeito de superposição [19]. As integrais decaem de forma rápida com o aumento da distância entre sítios. Então, uma aproximação pode ser feita:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos,} \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.20)$$

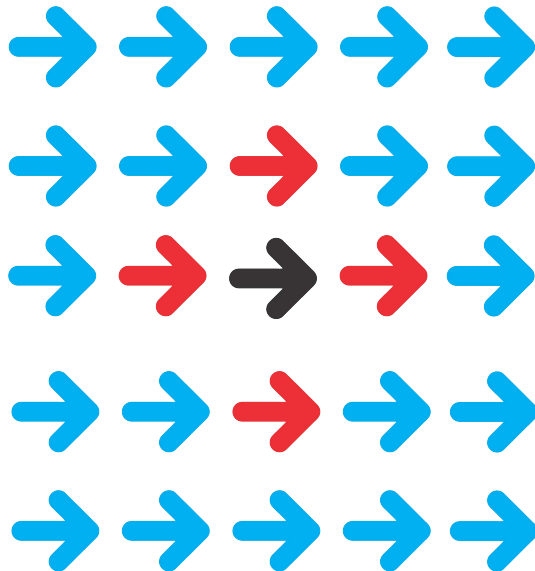


Figura 4 – Representação dos primeiros vizinhos que participam da interação de troca. As setas vermelhas representam os spins vizinhos do spin representado pela seta preta.

Logo, para um material homogêneo, a equação 2.21 pode ser reescrita:

$$U = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i,j}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.21)$$

Das equações 2.7 e 2.11 temos a relação do momento magnético com o momento angular de spin. Assim, a energia da interação de troca em função dos momentos magnéticos é dada por:

$$U = -\frac{J}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j, \quad (2.22)$$

onde o índice  $\langle i,j \rangle$  no somatório representa a soma somente entre os primeiros vizinhos.

A equação da energia da interação de troca acima pode assumir valores positivos e negativos (dependendo do valor de  $J$ ). Se a constante de troca  $J$  for maior que zero, para que a energia seja mínima os momentos magnéticos devem alinhar-se paralelamente, i.e., para um grupo de materiais ferromagnéticos  $\vec{M}$  é diferente de zero mesmo sem a presença de campo externo. Por outro lado, para  $J < 0$ , a energia se torna mínima quando os momentos são antiparalelos, representando o acoplamento antiferromagneto.

A energia de interação de troca pode ser representada analogamente a energia de interação de Zeeman (equação 2.17), ou seja, a interação de um momento magnético com um campo local.

$$U = -\frac{J}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j = -\frac{1}{2} \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \left( \frac{J}{\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle j \rangle} \vec{\mu}_j \right) = -\frac{1}{2} \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{tr}, \quad (2.23)$$

onde

$$\vec{B}_i^{tr} = \frac{J}{\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle j \rangle} \vec{\mu}_j \quad (2.24)$$

é o campo local de troca no  $i$ -ésimo sítio da rede de momentos magnéticos.

### 2.2.3 ANISOTROPIA

Um material é dito anisotrópico quando suas propriedades físicas variam com a direção em que as mesmas são observadas. A orientação da magnetização espontânea, a fim de minimizar a energia da interação de troca, é uma característica da anisotropia magnética. Pode-se notar que a equação 2.23 trata-se de uma representação de um modelo isotrópico. Em qualquer direção para a magnetização obtém-se um mínimo de energia, dado que os momentos magnéticos estejam alinhados.

Um exemplo de anisotropia magnética é conhecida como anisotropia cristalina ou magnetocristalina. Esta anisotropia é intrínseca do material, pois seu surgimento se deve apenas a estrutura de sua rede cristalina. Na anisotropia magnetocristalina os momentos magnéticos possuem orientação preferencial em relação a alguns eixos ou planos do sólido. Neste caso, podemos escrever a energia de interação de troca na forma:

$$U = \sum_i^K K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (2.25)$$

onde  $\hat{n}$  tem a direção do eixo  $\hat{z}$  e  $K_i$  é uma constante uniaxial com dimensão de energia [20].

Outro tipo de anisotropia é conhecido como anisotropia de forma. Como seu próprio nome diz, esta anisotropia está relacionada a forma geométrica do material. A anisotropia de forma é comum em materiais magnéticos nanoestruturados, e sua origem vem da interação dipolar entre os momentos magnéticos, no qual falaremos no próximo tópico.

### 2.2.4 INTERAÇÃO DIPOLAR

Um dipolo magnético  $\vec{\mu}_j$  localizado em uma posição arbitrária  $\vec{r}_j$  produz um campo magnético no ponto  $\vec{r}_i$  dado por:

$$\vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)\hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j], \quad (2.26)$$

definindo

$$\hat{r}_{ij} = \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}. \quad (2.27)$$

Um momento magnético da rede interage com este campo  $\vec{B}_j$  (ver figura 5). Supondo que este esteja situado no espaço em  $\vec{r}_i$ , a energia de interação entre eles é dada por:

$$U_{ij}^{dip} = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_j(\vec{r}_i) \quad (2.28)$$

$$U_{ij}^{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)]. \quad (2.29)$$

Em um sólido, podemos encontrar um número muito grande de momentos magnéticos.

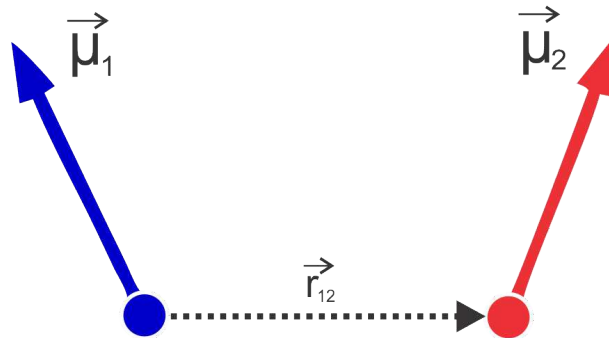


Figura 5 – Representação da interação dipolar entre dois momentos de spins ( $\vec{\mu}_1$  e  $\vec{\mu}_2$ ), distanciados  $r_{12}$  entre si.

Supondo que em um material existam  $N$  momentos, o momento magnético  $\vec{\mu}_i$  interage com os  $N - 1$  restantes. O campo total gerado pelos  $N - 1$  momentos em  $\vec{r}_i$  é dado pela soma das contribuições individuais (princípio da superposição):

$$\vec{B}(\vec{r}_i) = \sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)\hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j]. \quad (2.30)$$

Usando a equação 2.30, a energia dipolar total do sistema é definida como

$$U^{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)]. \quad (2.31)$$

Novamente, o fator 1/2 foi adicionado para evitar dupla contagem das interações.

Podemos multiplicar e dividir o denominador da equação 2.31 por  $a_0^3$ , onde o parâmetro  $a_0$  é definido como a menor distância entre dois sítios da rede. Assim a equação 2.31 pode ser reescrita:

$$U^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \quad (2.32)$$

Como a interação dipolar é uma interação de longo alcance (decai com o inverso de  $r_{ij}^3$ ), sendo assim, todos os momentos magnéticos do material interagem entre si (Figura 6). Ao observarmos a equação da energia dipolar, dado que as constantes são positivas, podemos notar que o primeiro termo ( $\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i$ ) tende a alinhar os momentos magnéticos antiparalelamente a fim de que a energia seja mínima. Já o segundo termo  $-3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)$  tende a alinhar os momentos  $\vec{\mu}_i$  e  $\vec{\mu}_j$  ao longo da direção que os une  $\hat{r}_{ij}$ , de forma a favorecer o paralelismo dos momentos ao longo de um material fino e muito comprido, por exemplo (anisotropia de forma)[12]. Análogo ao que foi feito para equação da energia da interação

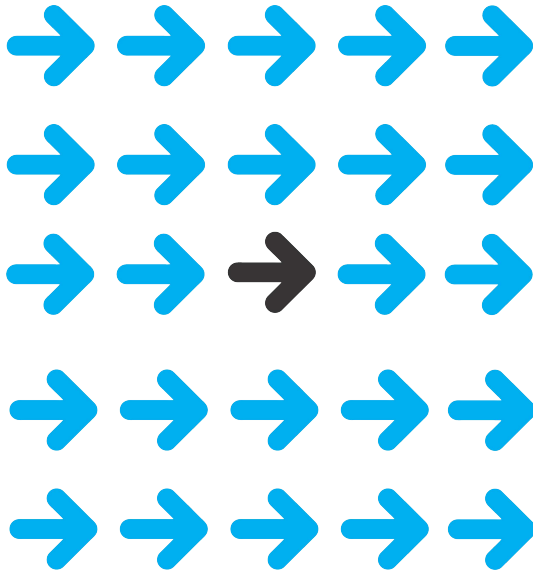


Figura 6 – Representação da interação dipolar em um ferromagneto. As setas azuis representam os momentos magnéticos que interagem com o momento representado pela seta preta.

de troca, iremos escrever a equação de energia dipolar 2.32 em função de um campo local dipolar  $\vec{B}_i^{dip}$ .

$$U^{dip} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{dip}, \quad (2.33)$$

onde

$$\vec{B}_i^{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi a_0^3} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)\hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \quad (2.34)$$



### 2.2.5 INTERAÇÃO DE DZVALOSHINSKII-MORIYA

A interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) é uma interação de troca de spins antissimétrica proposta por Igor Dzyaloshinskii e Tôru Moriya a fim de explicar o fenômeno do ferromagnetismo fraco. Esta interação provoca uma magnetização não uniforme em materiais que possuem simetria de inversão quebrada (falta de um centro de inversão de rede ou a presença de superfícies, ou interfaces) e em materiais com forte acoplamento spin-órbita [21].

Em 1957, Dzyaloshinskii observou que alguns materiais antiferromagnéticos, como o  $Fe_2O_3$ , apresentavam o fenômeno ferromagnetismo fraco [22]. Sem dizer sua origem, explicou este tipo de ferromagnetismo baseado em sua estrutura. Já em 1960, Moriya ao estudar também o efeito fraco do ferromagnetismo, explicou o fenômeno via acoplamento spin-órbita [23], propondo o seguinte termo para energia de troca antissimétrica para 2 spins:

$$U^{DM} = -\vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j), \quad (2.35)$$

sendo  $\vec{D}_{ij}$  o vetor de Dzyaloshinskii, que é um vetor de acoplamento constante dependente do material e da direção dada pelos sítios  $i$  e  $j$ .

A simetria do material coloca restrições no vetor de Dzyaloshinskii  $\vec{D}_{ij}$ , e Moriya em seu trabalho [23], listou cinco regras para a direção deste vetor. Dado que dois momentos magnéticos estão localizados nos pontos A e B e o ponto médio entre eles é o ponto C, seguem as regras:

1. Se o centro de inversão estiver localizado em C,  $\vec{D}_{ij} = 0$ .
2. Se um plano de reflexão perpendicular a AB passa por C,  $\vec{D}_{ij}$  é paralelo ao plano de reflexão ou  $\vec{D}_{ij}$  é perpendicular a AB.
3. Se um plano de reflexão passa por A e B,  $\vec{D}_{ij}$  é perpendicular ao plano.
4. Se um eixo de dupla rotação (2-fold) perpendicular a AB passa por C,  $\vec{D}_{ij}$  é perpendicular a este eixo.
5. Se há um eixo de  $n$  rotações ( $n$ -fold), com  $n > 2$  ao longo de AB,  $\vec{D}_{ij}$  é paralelo a este eixo.

A equação para energia DM total para uma material com N sítios é:

$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j), \quad (2.36)$$

onde o termo  $1/2$  foi adicionado para evitar a dupla contagem e o índice  $\langle i, j \rangle$ , como antes, também indica a soma entre os primeiros vizinhos. Pode-se observar que a energia

será minimizada quando  $\vec{\mu}_i$  e  $\vec{\mu}_j$  formarem um ângulo de  $90^\circ$ . Com isto, a interação DM tende a desalinhar os momentos magnéticos, competindo diretamente com a interação de troca, a qual trabalha para manter a magnetização uniforme. Devido à competição entre a interação DM e a interação de troca, tem-se a formação de texturas magnéticas rotacionais de quiralidade definida [21], como, por exemplo, os skyrmions, sendo o foco deste trabalho.

Neste trabalho, consideraremos a interação DM em filmes finos, vinda da interface dos materiais Cobalto (Co) e Platina (Pt).

### 2.3 A HAMILTONIANA DO SISTEMA

A energia das interações magnéticas entre os spins de um material podem ser representadas por uma hamiltoniana. A hamiltoniana que descreve tais interações em uma nanofita de Co/Pt está representada abaixo:

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - \sum_i K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j) + \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i \sum_j^{N-1} \left[ \frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)}{r_{ij}/a_0^3} \right]. \quad (2.37)$$

Nela estão contidas as interações de troca, a interação dipolar, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) e o termo da energia de anisotropia (segundo termo da hamiltoniana) pois o material Co/Pt possui anisotropia de eixo fácil. Este termo é derivado do modelo de Heisenberg anisotrópico. Vale ressaltar que a ausência da energia de Zeeman nesta hamiltoniana é devido que neste estudo não há aplicação de campo magnético externo na amostra.

### 2.4 CAMPO EFETIVO LOCAL

Neste trabalho, o campo efetivo local é derivado das interações: dipolar, troca (com o termo de anisotropia) e a interação DM. Desta forma, escrevemos:

$$\vec{B}_i^{ef} = \vec{B}_i^{dip} + \vec{B}_i^{tr} + \vec{B}_i^{ani} + \vec{B}_i^{DM}, \quad (2.38)$$

onde  $\vec{B}_i^{dip}$  é o campo gerado pela interação dipolar,  $\vec{B}_i^{tr}$  o campo de troca,  $\vec{B}_i^{ani}$  o campo devido à anisotropia do material e  $\vec{B}_i^{DM}$  o campo da interação DM.

Podemos encontrar o valor para o campo efetivo, fazendo a derivada das contribuições das interações na Hamiltoniana em relação ao vetor  $\vec{\mu}_i$ , ou seja:

$$\vec{B}_i^{ef} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_i} = -\vec{\nabla}_i H. \quad (2.39)$$

Fazendo as derivadas sobre as energias de troca e dipolar, teremos:

$$\vec{B}_i^{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi a_0^3} \sum_j^{N-1} \left[ \frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j) \hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right], \quad (2.40)$$

$$\vec{B}_i^{tr} = \frac{J}{\hbar^2 \gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^j \vec{\mu}_j, \quad (2.41)$$

$$\vec{B}_i^{ani} = 2K_i \hat{z} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z}), \quad (2.42)$$

as quais as duas primeiras já haviam sido apresentadas na seção anterior, respectivamente pelas equações 2.24 e 2.34. A última contribuição é da interação DM, que será apresentada abaixo.

Para a interação DM, a derivação necessita de um pouco mais de trabalho, pois o vetor  $\vec{\mu}_i$  compõe um produto vetorial. Desta forma, utilizaremos a propriedade cíclica do produto misto para reescrever  $U^{DM}$ . Sendo  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  e  $\vec{C}$ , vetores quaisquer:

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}). \quad (2.43)$$

Então, reescrevemos  $U^{DM}$  como:

$$U^{DM} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot (\vec{\mu}_j \times \vec{D}_{ij}). \quad (2.44)$$

Agora, obtemos então de forma análoga o Campo  $\vec{B}^{DM}$ :

$$\vec{B}_i^{DM} = -\vec{\nabla}_i U^{DM} = \sum_{\langle i,j \rangle}^j (\vec{\mu}_j \times \vec{D}_{ij}). \quad (2.45)$$

Finalmente, chegamos a expressão do campo efetivo  $\vec{B}^{ef}$  total:

$$\vec{B}^{ef} = \frac{J}{\hbar^2 \gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^j (\vec{\mu}_j) + 2K_i \hat{z} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z}) + \frac{\mu_0}{4\pi a_0^3} \sum_j^{N-1} \left[ \frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j) \hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\langle j \rangle} (\vec{\mu}_j \times \vec{D}_{ij}). \quad (2.46)$$

O campo efetivo  $\vec{B}^{ef}$ , é utilizado no cálculo da dinâmica de spins que será tratada no próximo capítulo.

## 2.5 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

O micromagnetismo caracteriza amostras magnéticas por intermédio de um campo clássico de vetores magnetização  $\vec{M}(\vec{r}, t)$ , que são médias espaciais dos momentos magnéticos  $\vec{\mu}$  (vide equação 2.12) em um determinado volume centrado em  $r$ .

A simulação micromagnética consiste em um conjunto de simplificações a de modo a descrever materiais ferromagnéticos de dimensões muito pequenas (na ordem de  $10^{-6}$  a  $10^{-9}$  metros). Sem essas simplificações, os estudos destes sistemas, que são compostos por um grande número de átomos, tornariam-se extremamente complexos e as simulações impraticáveis. Portanto, na simulação micromagnética o sistema é rearranjado em "*clusters*" de  $N$  momentos magnéticos, conhecidos como células de trabalho. Com a definição destas células de trabalho, o número de interações calculados na simulação é reduzido, e conseqüentemente, há também redução do tempo de simulação e do uso da memória RAM nos computadores.

A célula de trabalho deve ter um volume suficientemente pequeno para que os momentos atômicos que a compõem estejam, em sua maioria, alinhados em uma mesma direção e grande o suficiente para conter uma grande quantidade de momentos magnéticos. Na figura 7, está representada a redefinição de um sistema 2D de uma rede quadrada utilizando o modelo de aproximação micromagnética.

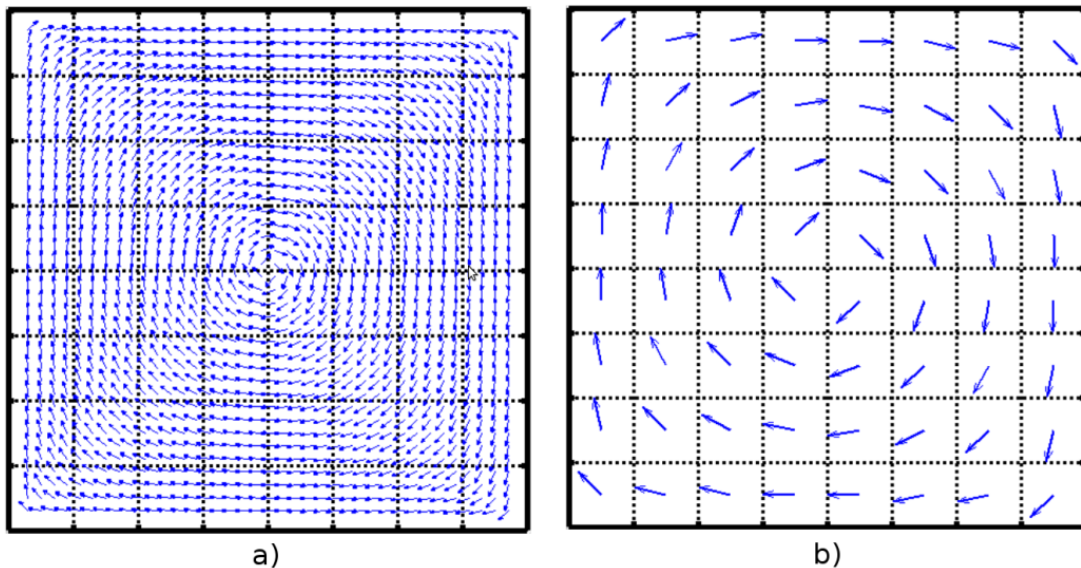


Figura 7 – Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. a) Sistema real. b) Sistema rearranjado pela aproximação micromagnética- Figura retirada da referência [2].

No centro de cada célula de trabalho é definido um vetor magnetização local. Para

isto, iremos introduzir a grandeza comprimento de troca  $\lambda_{exc}$ :

$$\lambda_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}, \quad (2.47)$$

onde  $A$  é a constante de troca (ou rigidez de troca). A constante comprimento de troca fornece um "tamanho característico" das estruturas de domínio, funcionando como um parâmetro para a determinação do volume das células [19]. Se as dimensões da célula forem menores ou iguais ao comprimento de troca  $\lambda_{exc}$ , a interação de troca é capaz de manter os momentos magnéticos alinhados. As células de trabalho, por possuírem o mesmo tamanho, apresentam aproximadamente a mesma quantidade de momentos magnéticos atômicos. Logo é razoável considerar que os vetores magnetização  $\vec{M}_i$  possuem módulo constante, variando apenas suas direções. Definimos  $\vec{M}_i$  como:

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{\mu} = \frac{\vec{m}_i}{v_{cel}}, \quad (2.48)$$

onde,  $v_{cel}$  é o volume da célula de trabalho e  $\vec{m}_i$  é o momento magnético resultante da célula de trabalho do sítio  $i$ . Então, podemos escrever:

$$\vec{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i = v_{cel} M_s \hat{m}_i, \quad (2.49)$$

sendo  $\hat{m}_i$  o versor que fornece a direção da magnetização saturada em cada célula de trabalho. A partir de agora, trabalharemos com as células de trabalho cúbicas de lado  $a$ . Portanto, é preciso renormalizar os termos da Hamiltoniana<sup>1</sup>. Para a energia de troca com o termo da energia anisotrópica, teremos:

$$U^{tr} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j), \quad (2.50)$$

onde  $J_{cel} = 2aA$  é a constante de troca reescalada entre elas. A interação de anisotropia magnetocristalina (equação 2.25) é rescrita da seguinte forma:

$$U^{ani} = \sum_i^K K_{cel} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2, \quad (2.51)$$

com  $K_{cel} = a^3 K_i$ , sendo  $K_i$  a constante de anisotropia magnética.

Para energia dipolar, utilizando-se da equação 2.49, teremos:

$$U^{dip} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{8\pi a^3} \sum_i^K \sum_j^{N-1} \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (2.52)$$

Definindo o parâmetro de interação de polar  $D_{cel}$ :

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{a^2}{4\pi} \left( \frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) 2aA = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{a}{\lambda_{ex}} \right)^2 J_{cel}, \quad (2.53)$$

<sup>1</sup> Apesar da mudança de escala do sistema com a aproximação micromagnética, as propriedades das interações magnéticas ainda são válidas.

onde utilizamos a relação do comprimento de troca. Podemos reescrever a energia dipolar, como:

$$U^{dip} = \frac{D_{cel}}{2} \sum_i^N \sum_j^{N-1} \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (2.54)$$

De forma análoga, reescreveremos a energia da interação DM, na forma:

$$U^{DM} = D_{cel}^{DM} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j), \quad (2.55)$$

com  $D_{cel}^{DM} = \frac{d}{ah}$ , onde  $d$  é o valor da constante de Dialoshinskii-Moryia e  $h$  a espessura da nanofita em parâmetros de rede.

Enfim, a hamiltoniana micromagnética do sistema, é dada por:

$$H = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) + \frac{D_{cel}}{2} \sum_i^N \sum_j^{N-1} \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0^3)} \right] - \sum_i^N K_{cel} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{2} D_{cel}^{DM} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j). \quad (2.56)$$

Podemos reescrever, a equação Landau-Lifshitz-Gilbert (Eq. LLG) para o micromagnetismo. Os cálculos podem ser encontrados na referência [12].

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \frac{1}{1 + \alpha^2} \left\{ -\hat{m}_i \times \vec{b}_i^{ef} - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i^{ef}) - \alpha \left( \frac{v_j}{\omega_0 a_0} \right) \hat{m}_i \times \left[ \hat{m}_i \times \left( \hat{m}_i \times \frac{d\hat{m}_i}{dx'} \right) \right] - \left[ (\beta\alpha + 1) \left( \frac{v_j}{\omega_0 a_0} \right) \hat{m}_i \times \left( \hat{m}_i \times \frac{d\hat{m}_i}{dx'} \right) \right] - \beta \left( \frac{v_j}{\omega_0 a_0} \right) \hat{m}_i \times \frac{d\hat{m}_i}{dx'} \right\}, \quad (2.57)$$

onde  $\vec{b}_i^{ef}$  é o campo efetivo micromagnético,  $\omega_0 = \frac{\gamma J}{m_i}$  e  $dx' = \frac{dx}{a}$ .

### 3 DINÂMICA DE SPINS

O estudo da evolução da magnetização no tempo é feito a partir da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Através do campo efetivo  $\vec{B}^{ef}$  esta equação descreve o comportamento dos spins do material. Mais tarde, o termo de corrente (devido a aplicações de correntes no material) é inserido na equação. Neste capítulo apresentaremos a equação LLG e a adição do termo de torque de spin devido à aplicação de corrente na nanofita.

#### 3.1 A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) é uma equação que descreve a dinâmica da magnetização de um material. A LLG é uma generalização da equação que descreve a precessão de um momento de dipolo em torno de um campo magnético [18].

Da mecânica clássica, temos que a equação de movimento rotacional de corpo rígido é dada por:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}, \quad (3.1)$$

sendo  $\vec{L}$  e  $\vec{T}$ , respectivamente, o momento angular do corpo rígido e torque que atua sobre o mesmo. Esta equação também é válida na mecânica quântica, i.e., o momento angular é um operador no espaço de Hilbert [24]. Logo a equação 3.1 pode ser reescrita em função do operador momento angular de spin  $\vec{S}$ :

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T}. \quad (3.2)$$

Um momento  $\vec{\mu}$ , na presença de um campo magnético, sofre um torque  $\vec{T}$  dado por

$$\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{B}, \quad (3.3)$$

de modo que podemos reescrever a equação 3.2 na forma:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (3.4)$$

Usando a relação, descrita no capítulo 2, entre o momento magnético e o momento de spin (equação 2.7), temos que:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (3.5)$$

Esta equação é conhecida como Equação Landau-Lifshitz (LL) [25]. Proposta em 1935, esta equação descreve, de forma satisfatória, a dinâmica da magnetização para materiais que possuem o parâmetro fenomenológico  $\alpha \ll 1$ . Conhecido também como "*damping*",  $\alpha$  é análogo a uma constante de amortecimento e tem valores específicos para

cada material. A equação de LL também pode ser utilizada para torques exercidos pelo campo efetivo do material, como podemos ver abaixo.

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}. \quad (3.6)$$

O campo efetivo (equação 2.46) foi calculado no capítulo anterior, e esta equação descreve o torque de precessão do momento  $\vec{\mu}$  em torno do campo efetivo como podemos ver na figura 8.

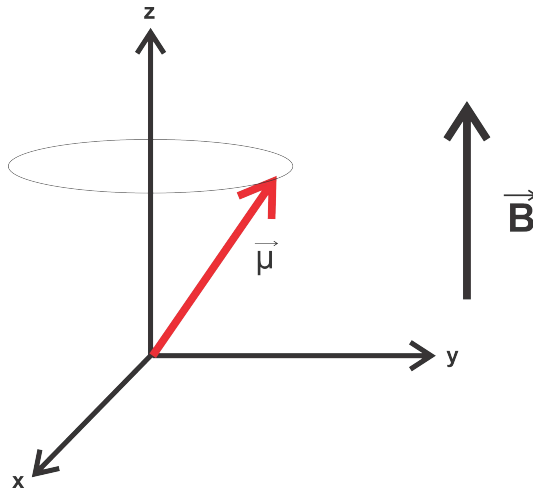


Figura 8 – Momento magnético  $\vec{\mu}$  precessando em torno de um campo magnético efetivo.

Apesar da equação 3.6 descrever bem a dinâmica de spins para alguns materiais, ela não prevê o alinhamento do momento magnético com o campo, o qual é previsto em experimentos. O torque de precessão  $\vec{T}$  sobre o momento é perpendicular ao campo magnético  $\vec{B}$ , não sendo capaz de realizar tal alinhamento. Para solucionar este problema, Gilbert em 1995, propôs um termo que é chamado de torque de "*damping*"[24], dado por:

$$\vec{T}_D = \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left( \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (3.7)$$

O torque de "*damping*"  $\vec{T}_D$ , é perpendicular ao momento magnético  $\vec{\mu}$  e ao torque de precessão  $\vec{T}$ , sendo responsável pelo alinhamento do momento na direção do campo magnético (figura 9).

A influência de  $\vec{T}_D$  proposto por Gilbert está representada na figura abaixo. Na evolução temporal de um momento magnético em um campo estático, quando não há dissipação na dinâmica ( $\alpha = 0$ ),  $\vec{\mu}$  apresenta apenas um movimento de precessão (figura 10, a). Quando há dissipação ( $\alpha > 0$ ) o momento realiza um movimento de precessão amortecida, espiralando em torno do campo (figura 10, b).



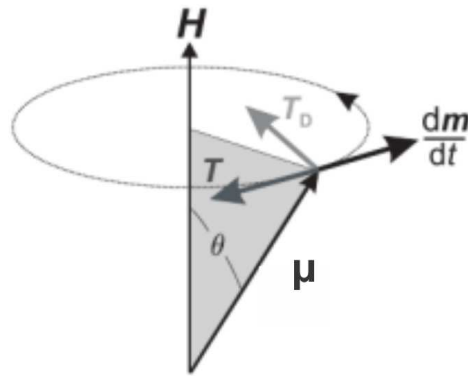


Figura 9 – Representação da direção dos vetores torques que agem sobre o momento magnético  $\vec{\mu}$ .  $\vec{T}$  é o torque de precessão e  $\vec{T}_D$  o torque de "damping". Figura adaptada da referência [3].

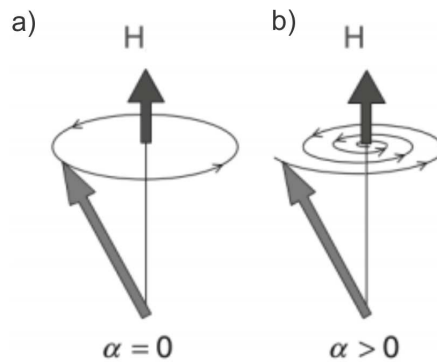


Figura 10 – Dinâmica de magnetização de um momento magnético no campo. a) Dinâmica sem amortecimento, i.e.,  $\alpha = 0$ . Faz com que o momento magnético realize um movimento de precessão em torno do campo. b) Dinâmica com amortecimento ( $\alpha > 0$ ). O momento magnético realiza um movimento de precessão amortecida, espiralando em torno do campo até atingir o alinhamento. Figura adaptada da referência [4].

Após a proposta de Gilbert, adicionando o termo referente ao torque de amortecimento na equação 3.6, chegando finalmente a expressão da equação LLG:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left( \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (3.8)$$

Na dinâmica, a equação LLG modifica apenas a direção do momento magnético  $\vec{\mu}$  e não seu módulo. A prova desta afirmação encontra-se no Apêndice A.

A equação 3.8 é conhecida como a forma implícita da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (note que  $\frac{d\vec{\mu}}{dt}$  se encontra dos dois lados da equação). A forma explícita, pode ser encontrada tomando, nos dois lados da equação 3.8, o produto vetorial do momento  $\vec{\mu}$ .

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{\mu}\vec{\mu} \times \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right). \quad (3.9)$$

Utilizando da seguinte identidade vetorial no segundo termo da equação:

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}, \quad (3.10)$$

podemos escrever

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{\mu} \left[ \left(\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right) \vec{\mu} - (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right]. \quad (3.11)$$

Do Apêndice A (equação A.5), o termo  $\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}$  é nulo. Logo a equação 3.9 se torna

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \frac{\alpha}{\mu} (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (3.12)$$

Como  $\vec{\mu} \cdot \vec{\mu} = \mu^2$ ,

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}\right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha\mu \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (3.13)$$

Substituindo a equação acima na equação implícita de LLG (equação 3.8), obtemos:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left[ -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha\mu \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right], \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} - \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (3.15)$$

Isolando  $\frac{d\vec{\mu}}{dt}$ ,

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} - \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}). \quad (3.16)$$

Chegando, finalmente, na forma explícita da equação LLG.

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[ \vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) \right]. \quad (3.17)$$

Em um material com  $N$  momentos magnéticos, é necessário resolver um sistema com  $3N$  equações diferenciais acopladas<sup>1</sup>, isto é:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}_i}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[ \vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef} + \frac{\alpha}{\mu_i} \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef}) \right]. \quad (3.18)$$

A equação acima descreve a dinâmica de cada momento magnético da rede, ou seja, cada momento magnético realiza um movimento de precessão amortecida em torno do seu respectivo campo efetivo local.

<sup>1</sup> Os vetores que compõe a equação LGG são tridimensionais

A equação de LLG não é linear, tornando possível soluções analíticas em poucos casos. Porém, utilizando métodos numéricos, podemos obter a dinâmica integrando as equações diferenciais. Os métodos numéricos de integração utilizados em nosso trabalho para a solução da equação LLG, foram o Preditor-Corretor [26] e o método Runge-Kutta [27].

### 3.2 O TERMO DE CORRENTE DA EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT

É conhecido que é possível manipular a magnetização de um nanomagnetito através da aplicação de campo magnético [28, 29, 30]. Porém, em 1984, Luc Berger em seu trabalho [31] previu o efeito de transferência de spin, o qual permitia o controle da magnetização via corrente de spin polarizado. Corrente de spin é um fluxo de momento angular que quando aplicado em um material magnético, em consequência da conservação do momento de spin, verifica-se a transferência do momento angular de spin entre os elétrons de condução e os momentos magnéticos localizados [14]. Já Slonczewski, em 1995, estudando sistemas magnéticos de múltiplas camadas, verificou que uma corrente de spin seria capaz de inverter a magnetização de um ferromagneto. A inversão da magnetização é devido à interação de troca entre o momento do elétron de condução e os momentos magnéticos da rede. Esta interação de troca é conhecida como interação de troca s-d e a hamiltoniana desta interação é dada por [32]:

$$H_{sd} = -J_{ex} \vec{s} \cdot \vec{S}, \quad (3.19)$$

sendo os vetores adimensionais  $\vec{s}$  e  $\vec{S}$ , respectivamente, spin dos elétrons de condução e spin dos elétrons localizados, e  $J_{ex}$  é a constante de troca que possui unidade de energia.

S.Zhang e Z. Li em seu trabalho [32], consideraram a dinâmica do elétron de condução separadamente da magnetização local, tratando  $\vec{s}$  como um operador quântico e aproximando  $\vec{S}$  como um vetor de magnetização clássico, i.e,

$$\vec{S} = -\frac{S}{M_s} \vec{M}, \quad (3.20)$$

onde  $M_s$  é o módulo da magnetização e é conhecida como magnetização de saturação. Então, a hamiltoniana s-d pode ser reescrita:

$$H_{sd} = \frac{J_{ex} S}{M_s} \vec{s} \cdot \vec{M}. \quad (3.21)$$

O operador  $\vec{s}$  satisfaz a equação generalizada da continuidade de spin [32]:

$$\frac{\partial \vec{s}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \hat{J} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{S}, H_{sd}] - \Gamma_{re}(\vec{S}), \quad (3.22)$$

sendo  $\hat{J}$  o operador corrente de spin e  $\Gamma_{re}(\vec{S})$  a relaxação de spin devido aos espalhamentos com impurezas, elétrons, entre outros. Fazendo a média sobre os termos da equação

$$\left\langle \frac{\partial \vec{s}}{\partial t} \right\rangle + \langle \vec{\nabla} \cdot \hat{J} \rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\vec{S}, H_{sd}] \right\rangle - \langle \Gamma_{re}(\vec{S}) \rangle, \quad (3.23)$$

teremos,

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = \left\langle \frac{d\vec{s}}{dt} \right\rangle - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (3.24)$$

onde foi definido,  $\langle \vec{s} \rangle = \vec{\mu}(\vec{r}, t)$  a densidade de spin do elétron e  $\langle \vec{J} \rangle = \vec{J}(\vec{r}, t)$ . A derivada  $\frac{d\vec{s}}{dt}$ , de acordo com as equações 3.2 e 3.3, representa um torque adimensional e pode ser representado na forma:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{s} \times \frac{\partial H_{sd}}{\partial \vec{s}} = \frac{1}{\hbar} \vec{s} \times \frac{S J_{ex}}{M_s} \vec{M} = \frac{S J_{ex}}{\hbar M_s} \langle \vec{s} \times \vec{M} \rangle. \quad (3.25)$$

Substituindo a equação 3.25 na equação 3.24, temos

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \langle \vec{s} \times \vec{M} \rangle - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (3.26)$$

logo,

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{\mu} \times \vec{M} - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (3.27)$$

onde  $\tau_{ex} = \frac{\hbar}{S J_{ex}}$ . A densidade de spin induzido  $\vec{\mu}$  pode ser representado pela soma de dois termos [32]:

$$\vec{\mu}(\vec{r}, t) = \vec{\mu}_0(\vec{r}, t) + \delta \vec{\mu}(\vec{r}, t) = \eta_0 \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{\mu}(\vec{r}, t), \quad (3.28)$$

onde  $\eta_0$  é a densidade de spin de equilíbrio local paralela à magnetização. O termo  $\vec{\mu}_0(\vec{r}, t)$  corresponde a densidade de spin adiabático, no instante  $t$  em que o spin do elétron de condução obtém seu valor de equilíbrio. O segundo termo,  $\delta \vec{\mu}(\vec{r}, t)$ , é o desvio a partir deste processo adiabático.

De forma análoga à equação 3.28, podemos escrever a densidade de corrente de spin  $\vec{J}(\vec{r}, t)$ :

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_0(\vec{r}, t) + \delta \vec{J}(\vec{r}, t) = -\left(\frac{\mu_B P}{e}\right) \vec{j}_e \otimes \frac{\vec{M}_0(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (3.29)$$

sendo  $\vec{j}_e$  a densidade de corrente,  $e$  a carga do elétron,  $\mu_B$  o magneton de Bohr e  $P$  o percentual da polarização em spin da corrente. O primeiro termo da equação representa a corrente de spin paralela à magnetização e o segundo termo, a densidade de corrente não adiabática.

Tendo agora as novas definições para as densidades  $\vec{\mu}$  e  $\vec{J}$ , podemos substituí-las na equação 3.27. Os cálculos podem ser encontrados no Apêndice C da referência [12]

$$D_o \nabla^2 \delta \vec{\mu} - \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{\mu} \times \vec{M} - \frac{\delta \vec{\mu}}{\tau_{sf}} = \frac{\eta_0}{M_s} \cdot \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{e M_s} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M}. \quad (3.30)$$

Esta é a equação aproximada da densidade de spin fora do equilíbrio. Nesta aproximação foi usado que  $\langle \Gamma(\vec{s}) \rangle = \frac{\delta \vec{\mu}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}}$  onde  $\tau_{sf}$  é o tempo de relaxação "spin flip", e a

densidade não adiabática  $\delta\vec{J} = D_0\nabla\delta\vec{\mu}$ , sendo  $D_0$ , a constante de difusão. O lado direito da igualdade da equação 3.30 possui duas variações da magnetização, uma no espaço e outra no tempo. Nota-se que estes dois termos são responsáveis pela densidade de spin fora do equilíbrio. Dado que a variação da magnetização no espaço se dá de forma lenta [32], podemos descartar o termo  $D_0\nabla^2\delta\vec{\mu}$  da equação. Considerando  $\beta = \frac{\tau_{ex}}{\tau_{sf}}$ , reescrevemos a equação 3.30 na forma

$$\delta\vec{\mu} = \frac{\tau_{ex}}{1+\beta} \left[ -\frac{\beta\eta_0}{M_s} \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} - \frac{\eta_0}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \frac{\beta\mu_B P}{eM_s} (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} + \frac{\mu_B P}{eM_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} \right]. \quad (3.31)$$

A densidade de spin apresentada acima, exerce um torque de spin sobre os momentos magnéticos localizados [32], e de acordo com a equação 3.21, é dado por

$$\vec{T} = -\frac{1}{\tau_{ex}M_s} \vec{M} \times \delta\vec{\mu}. \quad (3.32)$$

Substituindo a equação 3.31 na equação acima, encontraremos a equação para o torque de spin sobre a magnetização causada pela densidade de spin induzida  $\delta\vec{\mu}$ .

$$\vec{T} = \frac{1}{1+\beta^2} \left[ -\frac{\beta\eta_0}{M_s} \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \frac{\eta_0}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{eM_s^3} \vec{M} \times [\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M}] - \frac{\beta\mu_B P}{eM_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} \right]. \quad (3.33)$$

Analisando a equação 3.33 é possível constatar, que há duas fontes para o torque  $\vec{T}$ . A primeira, são termos onde a magnetização varia no tempo (dois primeiros termos). Note também, que estes termos não dependem da corrente induzida. A segunda, advém dos termos que descrevem a variação da magnetização no espaço (dois últimos termos), os quais apresentam o termo da corrente induzida  $\vec{j}_e$ .

A equação de LLG (equação 3.8) descreve a dinâmica de spins do material. Os dois termos que a compõem explicam a precessão e alinhamento dos momentos magnéticos frente ao campo local efetivo. Porém, como discutimos nesta sessão, quando aplicado uma corrente de spin polarizada em um nanomagnetito a densidade de spin induzida realizará um torque de spin sobre a magnetização. Tal torque deve ser adicionado a equação da dinâmica, de forma que a equação LLG 3.8 reescrita em função da magnetização e acrescida do termo de corrente, seja:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma\vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_s} \left( \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) + \vec{T}. \quad (3.34)$$

Os termos, comentados acima, relacionados à variação temporal da magnetização podem ser incorporados na redefinição da razão  $\gamma$  e da constante de amortecimento  $\alpha$ <sup>2</sup>[32]. Por consequência, podemos reescrever a equação 3.34, na forma

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} = & -\gamma\vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_S} \left( \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) - \frac{1}{(1+\beta^2)} \frac{\mu_B P}{eM_s^3} \vec{M} \times \left[ \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} \right] \\ & - \frac{1}{(1+\beta^2)} \frac{\beta\mu_B P}{eM_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Considerando que a corrente é aplicada apenas na direção  $x$ , e reescrevendo a equação em função dos termos  $v_j$  adiabático [33, 34] e  $c_j$  não adiabáticos [32], temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} = & -\gamma\vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_S} \left( \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) - \frac{v_j}{M_s^2} \vec{M} \times \left( \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dx} \right) \\ & - \frac{c_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dx}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde,

$$v_j = \frac{Pj_e\mu_B}{eM_s(1+\beta^2)}, \quad (3.37)$$

$$c_j = \beta v_j. \quad (3.38)$$

possuem unidades de velocidade.

---

<sup>2</sup> Neste trabalho, baseamos apenas no toque de spin derivado da variação da magnetização no espaço.

## 4 SKYRMIONS

Skyrmions são objetos matemáticos nomeados em homenagem a T. Skyrme, que desenvolveu uma teoria de campo não-linear para interação com píons<sup>1</sup> em 1962, mostrando que configurações de campo topologicamente estáveis ocorrem como soluções análogas a partículas [35, 36]. Porém, o conceito de skyrmion é utilizado para denotar objetos matemáticos semelhantes em diferentes contextos [36], e.g., partículas elementares, cristais líquidos [37], condensados de Bose-Einstein [38, 39], supercondutores [40] e nanofitas magnéticas [7, 36, 41].

Neste trabalho estudamos skyrmions magnéticos que podem ser encontrados em materiais magnéticos geralmente induzidos pela interação DM.

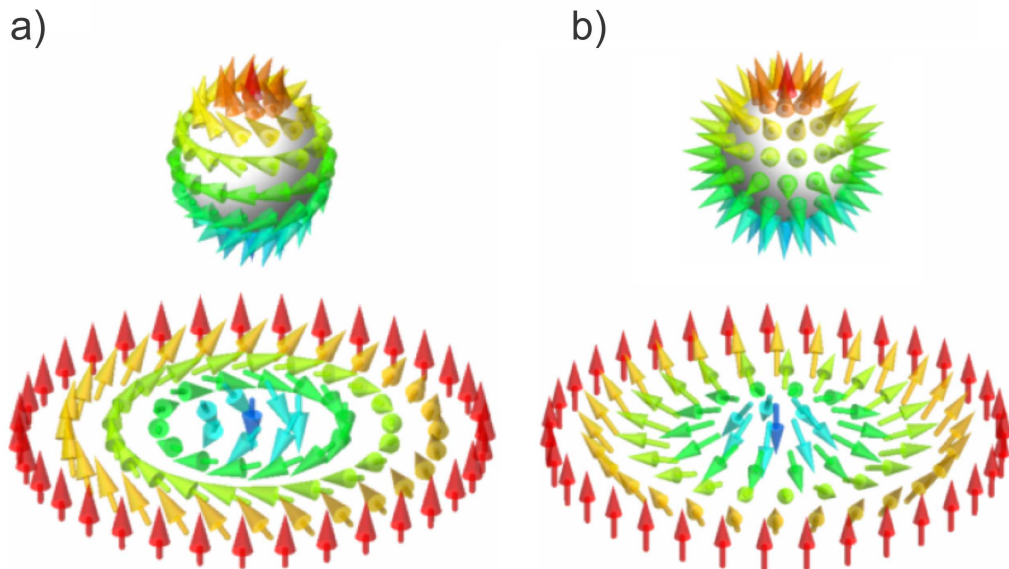


Figura 11 – Representação gráfica dos dois tipos de skyrmions. a) Skyrmion do tipo Bloch. Os spins rotacionam tangencialmente como espiral helicoidal. b) Skyrmion do tipo Néel. Os spins rotacionam do centro até a borda com quiralidade fixa. Em ambos os casos, os spins que compõem o núcleo e a borda do skyrmion são antiparalelas. As setas representam a direção do spin. Figura adaptada de [5].

A figura 11, mostra a configuração de dois skyrmions diferentes: Néel e Bloch. Nos skyrmions do tipo Néel (ver figura 11.b), os spins rotacionam do centro até a borda com quiralidade fixa [42, 43]. Já nos skyrmions do tipo Bloch (figura 11.a), os spins rotacionam tangencialmente como espiral helicoidal [7, 44]. A diferença entre os tipos Néel e Bloch está relacionada à orientação do vetor de Dzyaloshinskii  $\vec{D}_{ij}$ . Como já vimos, forte acoplamento spin-órbita e a quebra da simetria de inversão provocam uma magnetização não uniforme em materiais através da interação DM. A interação DM pode ser classificado

<sup>1</sup> Partícula mediadora da força forte.

em duas classes, interação DM interfacial e interação DM volumétrica (que neste trabalho chamaremos apenas de interação DM), dependendo do tipo de quebra de simetria de inversão [45]. A interação DM interfacial é estabelecida quando a simetria de inversão é quebrada ao longo da direção normal da interface [46, 44]. Este tipo de interação favorece a formação de skyrmions do tipo Néel. O vetor  $\vec{D}_{ij}$  da DM interfacial é ortogonal ao vetor direção  $\vec{r}_{ij}$  entre os spins, [47] de modo que a rotação no plano radial entre os momentos  $\vec{\mu}_i$  e  $\vec{\mu}_j$ , tem menor custo de energia (Figura 11.b). O sinal do vetor  $\vec{D}_{ij}$  determinará o sentido de rotação [44]. Para os skyrmions do tipo Bloch, o vetor  $\vec{D}_{ij}$  da interação DM é paralelo a  $\vec{r}_{ij}$ , favorecendo a configuração onde os spins possuem quiralidade (Figura 11.a).

Os Skyrmions são topologicamente protegidos e são bem mais estáveis frente a outras estruturas magnéticas como vórtices ou bolhas magnéticas [36].

A configuração de spin de um skyrmion dá origem a uma carga topológica, que pode ser caracterizada por um número  $N_{sk}$  conhecido como o número de skyrmions. O número skyrmion topológico  $N_{sk}$  é definido como a quantidade de vezes o spin circunda uma esfera unitária [7, 6], como está demonstrado na figura abaixo.

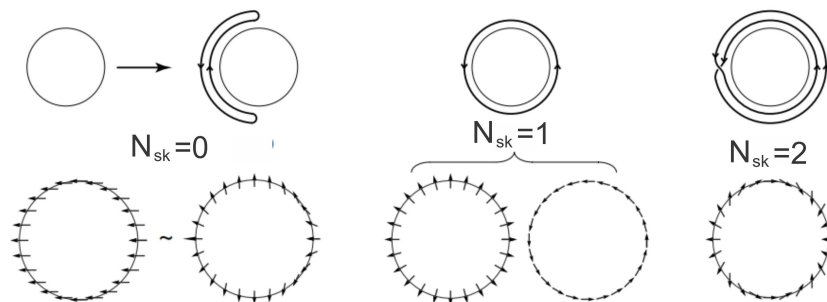


Figura 12 – Ilustração da definição do número de skyrmion  $N_{sk}$ . O número de vezes que o círculo é envolvido. Figura adaptada de [6].

Matematicamente, o número de skyrmion, em duas dimensões, é dado por:

$$N_{sk} = \frac{1}{4\pi} \int \int \vec{\mu} \cdot \left( \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (4.1)$$

com a magnetização  $|\vec{\mu}| = 1$ .

Como  $\vec{\mu}$  é um vetor unitário, podemos escrever em coordenadas esféricas [7]:

$$\vec{\mu} = (\cos\Phi(\phi)\text{sen}\Theta(r), \text{sen}\Phi(\phi)\text{sen}\Theta(r), \cos\Theta(r)), \quad (4.2)$$

onde foi introduzido as coordenadas polares  $\vec{r} = (r\cos\phi, r\text{sen}\phi)$ . O ângulo entre os spins  $\vec{\mu}$  do skyrmion e o eixo z é dado por  $\Theta(r)$  e  $\Phi(\phi)$  o angulo entre a projeção no plano  $xy$  do vetor  $\vec{\mu}$  e o eixo  $x$  [48]. Considerando que os spins apontam para cima em  $r \rightarrow \infty$  e



para baixo em  $r = 0$ , teremos:

$$\begin{aligned}
 N_{sk} &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{d\Theta(r)}{dr} \frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} \sin\Theta(r) dr d\phi \\
 &= \frac{1}{2\pi} (\Phi(2\pi) - \Phi(0)) \\
 &= m.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

A vorticidade  $m$  determinará o número de skyrmion  $N_{sk}$ , sendo fixa a condição de contorno no infinito ( $r \rightarrow \infty$ ) [7]. Para skyrmions,  $N_{sk} = 1$ . Definindo a função  $\Phi(\phi)$  em coordenadas cilíndricas como:

$$\Phi(\phi) = m\phi + \gamma, \tag{4.4}$$

onde,  $\gamma$  é uma fase vinculada ao tipo de skyrmion que queremos descrever. Especificamente,  $\gamma$  tem a ver com os componentes no plano da textura de magnetização do skyrmion [48]. Por exemplo, para um skyrmion Bloch,  $\gamma$  representa a quiralidade do skyrmion (sentido o qual ele rotaciona). Já para os skyrmions do tipo Néel,  $\gamma$  representa a polaridade (spins apontados para a borda ou para o centro). Na figura abaixo, é indicado os valores para  $\gamma$  dos skyrmions, Bloch e Néel. Os valores de  $m$  negativo, ou seja,  $N_{sk} = -1$  representam a carga topológica de anti-skyrmions.

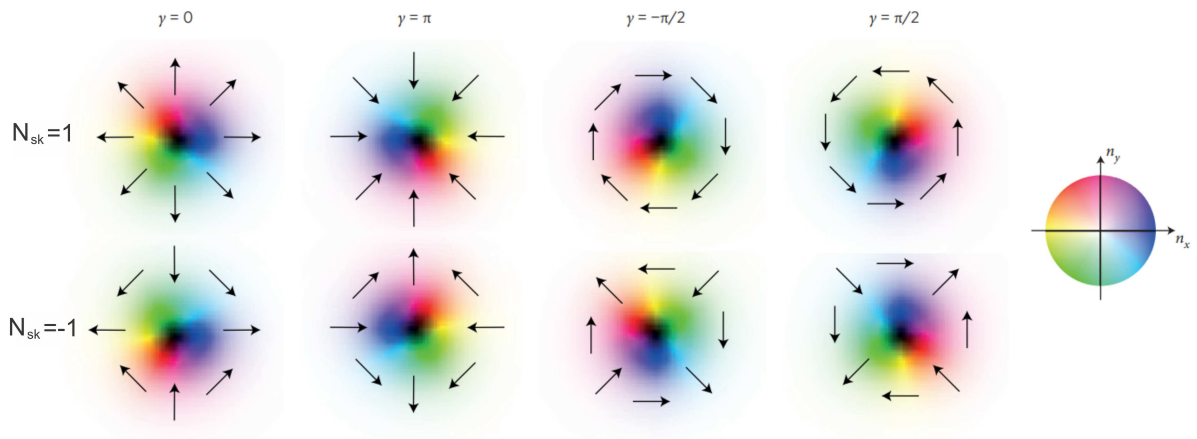


Figura 13 – Estruturas de Skyrmions para os possíveis valores de  $m$  e  $\gamma$ . As cores indicam o componente normal ao plano, com branco indicando a direção para cima e preto para baixo-Figura adaptada de [7].

#### 4.1 EQUAÇÃO DE THIELE: A EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA O SKYRMION

A equação LLG, como já mencionado, só pode ser resolvida em uma quantidade limitada de casos. Tomando algumas considerações, a partir da equação LLG, pode-se obter equações mais simples, e entre elas uma equação de grande utilidade é conhecida como equação de Thiele [49, 50].

A equação de Thiele, é uma equação de movimento de texturas magnéticas (skyrmion, parede de domínio, vórtices e etc.). Thiele considerou configurações magnéticas em um movimento de translação rígido, i.e. existe uma textura magnética  $\vec{m}$  que pode ser decomposta em uma componente dependente de posições locais  $\vec{r}$  e um movimento global que depende do tempo  $\vec{R}(t)$  [44]. Assim temos:

$$\vec{m}(\vec{r}, t) = \vec{m}_0 [\vec{r} - \vec{R}(t)]. \quad (4.5)$$

Em outras palavras, a equação 4.5 significa separar o sistema em pequenas partes representadas por cada posição de momento magnético localizada em  $\vec{r}$ , mas levando em conta que todo o sistema evolui apenas de forma global com um movimento que é o efeito emergente de todas as outras partes. Esta evolução global do sistema é representada pelo vetor  $\vec{R}(t)$ . Este, não depende de nenhuma posição de momento magnético isoladamente, mas toda via muda com o tempo de acordo com arranjo total do sistema. Desta forma,  $\vec{R}(t)$  representa o centro de carga topológica no sistema.

A equação de movimento de Thiele, pode ser dividida em função de duas forças, no caso em que descreve aproximadamente uma configuração magnética sob influência de uma corrente de spin polarizada, como podemos ver abaixo:

$$\vec{F}_{ext} + \vec{F}_{in} = 0. \quad (4.6)$$

A força externa  $\vec{F}_{ext}$ , como o próprio nome já diz, representa o conjunto de forças que agem externamente ao sistema, como a aplicação de campo magnético externo, efeito de borda, etc. Já o termo  $\vec{F}_{in}$ , indica as forças internas do sistema, as quais são:

$$\vec{F}_{in} = \vec{F}_G + \vec{F}_D. \quad (4.7)$$

A força  $\vec{F}_G$  é conhecida como a força giroscópica, sendo derivada do termo de precessão da equação LLG.  $\vec{F}_G$  é dado por

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times (\vec{v} - \vec{v}_j), \quad (4.8)$$

onde  $\vec{v}$  é a velocidade da textura magnética (neste trabalho, referenciaremos a velocidade do skyrmion),  $\vec{v}_j$  é um vetor com a direção da corrente e  $\vec{G}$  é conhecido como girovetor. Em filme finos, onde só há variações do plano da magnetização, o girovetor tem apenas uma componente [44]. Definimos aqui,  $\vec{G} = (0, 0, 4\pi N_{sk})$  [51], onde  $N_{sk}$  é a carga topológica. Desta maneira, estruturas magnéticas que possuem carga topológica diferente de zero, ao se movimentarem, são desviadas lateralmente do plano do filme [44].

A força  $\vec{F}_D$  é chamada de força dissipativa e é derivada do termo de amortecimento (*damping*). Análogo a uma força de atrito,  $\vec{F}_D$  é definido como

$$\vec{F}_D = \mathcal{D}(\beta\vec{v} - \alpha\vec{v}_j), \quad (4.9)$$

onde  $\mathcal{D}$  é um tensor chamado de tensor de *damping*

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Os termos do tensor  $\mathcal{D}$  são dados pela integral

$$D_{ij} = \int (\partial_i \hat{m} \cdot \partial_j \hat{m}) d^2 \vec{r} = \begin{cases} \mathcal{D}, & \text{para } (i,j) = (x,x), (y,y), \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (4.11)$$

Desta forma, substituindo as equações 4.8 e 4.9 na equação 4.7 e considerando  $\vec{F}_{ext} = 0$ , obtemos a equação de Thiele para um skyrmion numa nanofita infinita (sem efeito de borda):

$$\vec{G} \times (\vec{v} - \vec{v}_j) + \mathcal{D}(\alpha\vec{v} - \beta\vec{v}_j) = 0. \quad (4.12)$$

Para uma nanofita finita, podemos considerar o efeito de borda como a contribuição da força externa, isto é  $\vec{F}_{ext} \neq 0$ . No capítulo Resultados, trataremos mais detalhes sobre ela.

## 4.2 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE PAR UM SKYRMION EM UM PLANO INFINITO

Para uma fita infinita, temos que a equação de Thiele é dada por:

$$\vec{G} \times (\vec{v} - \vec{v}_j) + \mathcal{D}(\alpha\vec{v} - \beta\vec{v}_j) = 0 \quad (4.13)$$

Podemos resolver esta equação a fim de obtermos as componentes  $x$  e  $y$  da velocidade do skyrmion. Usando as seguintes definições:

$$\vec{G} = (0, 0, -4\pi N_{sk}), \quad \mathcal{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 \\ 0 & D_{yy} \end{pmatrix}.$$

. Teremos,

$$-4\pi N_{sk} \hat{z} \times (v_x \hat{x} + v_y \hat{y} - v_j \hat{x}) + \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 \\ 0 & D_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha v_x - \beta v_j \\ \alpha v_y \end{pmatrix} = 0 \quad (4.14)$$

$$-4\pi N_{sk} (v_x \hat{y} - v_j \hat{y} - v_y \hat{x}) + D_{xx} (\alpha v_x - \beta v_j) \hat{x} + D_{yy} \alpha v_y \hat{y} = 0. \quad (4.15)$$

Separando as coordenadas, teremos:

*Em x*

$$4\pi N_{sk} v_y + D_{xx} \alpha v_x - D_{xx} \beta v_j = 0 \quad (4.16)$$

$$v_y = \frac{D_{xx}}{4\pi N_{sk}} (\beta v_j - \alpha v_x). \quad (4.17)$$

*Em y*

$$-4\pi N_{sk} v_x + 4\pi N_{sk} v_j + D_{yy} \alpha v_y = 0 \quad (4.18)$$

$$v_x = v_j + \frac{D_{yy}}{4\pi N_{sk}} \alpha v_y. \quad (4.19)$$

Substituindo a equação 4.17 em 4.18:

$$-4\pi N_{sk} v_x + 4\pi N_{sk} v_j + D_{yy} \alpha \left\{ \frac{D_{xx}}{4\pi N_{sk}} (\beta v_j - \alpha v_x) \right\} = 0 \quad (4.20)$$

$$v_x \frac{((4\pi N_{sk})^2 + \alpha^2 D_{xx} D_{yy})}{(4\pi N_{sk})^2} = \frac{v_j}{(4\pi N_{sk})^2} (\alpha \beta D_{xx} D_{yy} + (4\pi N_{sk})^2),$$

encontrando a componente  $x$  da velocidade

$$v_x = v_j \frac{\alpha \beta D_{xx} D_{yy} + (4\pi N_{sk})^2}{\alpha^2 D_{xx} D_{yy} + (4\pi N_{sk})^2}. \quad (4.21)$$

De forma análoga, substituindo a equação 4.19 em 4.22:

$$4\pi N_{sk} v_y + D_{xx} \alpha \left\{ \frac{D_{xx}}{4\pi N_{sk}} (\beta v_j - \alpha v_x) \right\} - D_{xx} \beta v_j = 0$$

$$v_y \frac{((4\pi N_{sk})^2 + \alpha^2 D_{xx} D_{yy})}{4\pi N_{sk}} = D_{xx} (\beta - \alpha) v_j, \quad (4.22)$$

portanto, a componente  $y$  da velocidade é dada por:

$$v_y = v_j \frac{4\pi N_{sk} D_{xx} (\beta - \alpha)}{(4\pi N_{sk})^2 + \alpha^2 D_{xx} D_{yy}}. \quad (4.23)$$

As equações 4.21 e 4.23 podem ser usadas para o cálculo da velocidade inicial do skyrmion. Os valores teóricos estão apresentados no capítulo Resultados e Discussões.

## 5 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA MAPEAR A POSIÇÃO DO SKYRMION

### 5.1 MÉTODO DA CARGA E MÉTODO DA MÉDIA DAS MAGNETIZAÇÕES

Para estudarmos a dinâmica de skyrmions, precisamos identificar a posição de seu centro durante toda a trajetória. Na literatura, existem 2 métodos conhecidos, os quais chamaremos aqui de Método da Média das Magnetizações e o Método da Carga.

O Método da Média das Magnetizações determina a posição central do skyrmion, comparando sua posição com a localização da média  $\langle \vec{\mu}_z \rangle$  da estrutura. Desta forma, podemos encontrar a posição do skyrmion através da seguinte equação: [52]:

$$x_{\langle m_z \rangle} = \frac{\int x(m_z - 1) dV}{\int (m_z - 1) dV}; \quad y_{\langle m_z \rangle} = \frac{\int y(m_z - 1) dV}{\int (m_z - 1) dV}.$$

O segundo método já conhecido pela literatura, o Método da Carga, a partir da média distribuição da carga topológica do sistema, determina a posição do centro do skyrmion através das equações [53]:

$$x_{\langle N_{sk} \rangle} = \frac{\int x N_{sk} dV}{\int N_{sk} dV}; \quad y_{\langle N_{sk} \rangle} = \frac{\int y N_{sk} dV}{\int N_{sk} dV}.$$

Na próxima seção, apresentaremos um novo método (tratando-se da aplicação em skyrmions magnéticos) conhecido como Método dos Sapos.

### 5.2 ALGORÍTIMOS BIOINSPIRADOS: O MÉTODO DOS SAPOS

Algoritmos bioinspirados são algoritmos fundamentados em sistemas naturais utilizados para resolver, por exemplos, problemas de otimização. Problemas de otimização tratam-se de problemas onde se busca definir valores de máximo e mínimo de funções em um intervalo predefinido.

Definindo matematicamente problemas de otimização, iremos considerar uma função  $f : A \rightarrow R^n$  onde  $A$  é um subconjunto qualquer de um espaço euclidiano  $R^n$ , devemos encontrar um valor  $x_0$  pertencente a  $A$  que satisfaça  $f(x_0) < f(x)$  (para minimização) ou  $f(x_0) > f(x)$  (para maximização) para todo  $x$  pertencente a  $A$ . Diante disso, se existe um  $x_0$  que satisfaça as inequações citadas acima, dizemos que, no caso da maximização,  $x_0$  é um ponto de máximo de  $f$  em  $A$  ou, no caso da minimização, que  $x_0$  é um mínimo de  $f$  no subconjunto  $A$ .

Podemos enumerar passos para compreender os procedimentos de um algoritmo de otimização. Os passos são:

1. Determinar o conjunto  $A$ , i.e. os possíveis valores da variável  $x_0$ .
2. Indicar uma função  $f$  para obtenção do seu valor ótimo.
3. Implementar um método que faça com que um valor obtido  $x'_0$  durante o processo, aproxime sucessivamente para o valor de  $x_0$  que maximiza/minimiza a função  $f$ .

O terceiro passo é responsável por contornar possíveis impasses que dificultam a otimização do problema. Por exemplo, caso não exista um valor de  $x_0$  no subconjunto  $A$  que minimize/maximize a função, o algoritmo evoluiria para valores de  $x'_0$  onde  $f(x'_0)$  possui valor reduzido.

Um dos métodos bioinspirados de otimização é conhecido como método de otimização por sapos. Derivado do método OPS (*Particle Swarm Optimization*), o método dos sapos baseia-se em uma população de algoritmos meméticos, onde indivíduos interativos realizam trocas de informação [54].

Metaforicamente, consideraremos um grupo de sapos que saltam procurando comida em um pântano. O pântano possui  $N$  pedras com localizações definidas e conhecidas onde os sapos podem alcançá-las com saltos em busca de maior quantidade de comida [55, 54].

Para exemplificação, considerando  $x_0$  e  $x \in A$ , encontraremos  $x_0$  tal que  $f(x_0) < f(x)$ <sup>1</sup>. O número de partículas interagentes (sapos) deve ser menor que os  $N$  possíveis mínimos do sistema (pedras). Sendo  $x_i$  a posição do  $i$ -ésimo sapo, determinaremos que o valor mínimo que a função  $f(x_i)$  pode assumir como o local com maior quantidade de comida.

Os sapos, simultaneamente, saltam sobre as pedras de forma aleatória em busca da maior quantidade de alimento (valor mínimo de  $f(x_i)$ ). Os sapos interagem entre si trocando informações sobre os melhores resultados dos pulos. Estas informações influenciam nas suas próximas decisões, fazendo que a cada passo (ou pulo) encontrem melhores resultados. Apesar das informações obtidas pela interação global dos sapos, os saltos ainda são feitos de forma randomizada. Entretanto, os mesmos possuirão uma direção preferencial derivada de tais informações. Se em um dos saltos, o sapo se move para uma nova posição a qual é "pior" da que estava, o sapo retrocede o passo, voltando a posição anterior.

Em uma dimensão, podemos dizer que a posição do sapo após o primeiro pulo é dado por:

$$x_{t+1}^i = x_t^i + v_t^i, \quad (5.1)$$

---

<sup>1</sup> Não é assegurado que exista tal  $x_0$  que minimize a função, tampouco sua unicidade.

onde  $x_t^i$  é a posição do  $i$ -ésimo sapo no instante  $t$  e  $v_t^i$  a velocidade da partícula  $i$ . A variável  $v_t^i$  possui mesma unidade <sup>2</sup> de  $x_t^i$  e é definida na forma:

$$v_t^i = \frac{R_{max}^i}{\phi + 1} \left( Rand[-1, 1] + \phi Rand[0, 1] \left( \frac{g_t^i - x_t^i}{|g_t^i - x_t^i|} \right) \right), \quad (5.2)$$

onde  $R_{max}^i$  é o *range* máximo do pulo do sapo, e  $\phi$  é um parâmetro que regula a confiabilidade das informações obtidas pelos outros sapos.  $Rand[a, b]$  é uma função randômica que retorna valores entre o intervalo  $[a, b]$  e  $g_t^i$  descreve o melhor valor da posição encontrado pelo sistema até o dado momento.

Neste trabalho, utilizamos este método para encontrar a posição e o raio do skyrmion na nanofita durante a dinâmica. Falaremos sobre os procedimentos na seção Resultados.

---

<sup>2</sup> O tempo é tratado de maneira discreta, ou seja  $\delta t = 1$ .

## 6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo apresentaremos os resultados sobre o estudo das propriedades estruturais e da dinâmica de magnetização de skyrmions. Apresentamos o programa desenvolvido para a criação de diversos tipos de skyrmions e antiskyrmions, e que poderá ser integrado ao programa de dinâmica de spins do grupo. Também, foi apresentado um novo método para encontrar a trajetória de skyrmions durante a dinâmica. A partir deste estudo inicial da dinâmica buscamos entender o efeito de borda sobre o skyrmion, como a variação da carga topológica, raio, velocidade entre outros.

### 6.1 CONFIGURAÇÃO INICIAL DE SKYRMIONS

Para iniciarmos os estudos sobre a dinâmica de Skyrmions em nanofitas magnéticas, focamos em gerar as configurações iniciais de skyrmions (e anti-skyrmions) do tipo Néel e Bloch.

Basicamente, foi produzido um programa que reproduz a estrutura de um skyrmion inserido-o em qualquer lugar delimitado por uma nanofita retangular de Co/Pt. Nele, podemos controlar tanto as propriedades do skyrmion, isto é seu tipo, quiralidade, polaridade, raio, posição, quanto as propriedades da nanofita, que são o tamanho (largura, altura e espessura), o espaçamento entre sítios e sua forma. As estruturas criadas neles são utilizadas para o cálculo da dinâmica através de programas reproduzidos pelo Grupo de Física da Matéria Condensada da UFJF.

Anteriormente, definimos o vetor magnetização local como:

$$\vec{\mu} = (\cos\Phi(\phi)\text{sen}\Theta(r), \text{sen}\Phi(\phi)\text{sen}\Theta(r), \cos\Theta(r)), \quad (6.1)$$

de forma que para cada momento magnético da rede devemos calcular as componentes:

$$\begin{aligned} \mu_i^x &= \cos\Phi(\phi_i)\text{sen}\Theta(r_i), \\ \mu_i^y &= \text{sen}\Phi(\phi_i)\text{sen}\Theta(r_i), \\ \mu_i^z &= \cos\Theta(r_i). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Resta-nos definir as funções locais  $\Phi(\phi_i)$  e  $\Theta(r_i)$ .

Primeiramente, a função  $\Phi(\phi_i)$ , de acordo com o capítulo 2, é dada por:

$$\Phi(\phi_i) = m\phi_i + \gamma. \quad (6.3)$$

As variáveis  $m$  e  $\gamma$  dependem exclusivamente do tipo de skyrmion. Skyrmions possuem carga topológica  $m = 1$ , já anti-skyrmions  $m = -1$ . Para  $\gamma$  temos quatro possibilidades. Skyrmions do tipo Néel possuem  $\gamma = 0$  ou  $\gamma = \pi$  dependendo da sua polaridade. Entretanto, skyrmions do tipo Bloch apresentam valores semi inteiros, sendo eles  $\gamma = \frac{\pi}{2}$  ou  $\gamma = -\frac{\pi}{2}$



indicando sua quiralidade. O ângulo  $\phi_i$  representa angulo entre a projeção do momento  $\vec{\mu}_i$  no plano  $xy$  e o eixo  $x$ . Sendo assim, para cada sítio da rede será calculado seu respectivo ângulo  $\phi$ .

A função  $\Theta(r_i)$ , como já vimos, representa o ângulo entre o vetor  $\vec{\mu}$  e o eixo  $z$ . Dado a consideração onde os spins apontam para cima em  $r = 0$  e para baixo em  $r \rightarrow \infty$ , podemos definir  $\Theta(r_i)$  como:

$$\Theta(r_i) = \pi \frac{\frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}, \quad (6.4)$$

onde  $r_i$  é a distância do  $i$ -ésimo sítio ao centro do skyrmion,  $r_s$  o raio do skyrmion e  $s$  é um parâmetro adimensional que pode ser associado com a força das interações magnéticas no material com intervalo  $[0, 1)$ .

Nota-se que para  $r_i = 0$   $\Theta(r_i) = 0$ , logo o spin aponta para cima. Fazendo o limite da equação 6.4 com  $r \rightarrow \infty$ , obtemos:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \Theta(r) &= \lim_{r \rightarrow \infty} \pi \frac{\frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\pi}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}} \\ &= \pi, \end{aligned} \quad (6.5)$$

como já era esperado.

Por definições da direção dos eixos de coordenadas utilizado no programa que calcula a dinâmica da magnetização, vamos considerar a magnetização do eixo  $z$ :

$$\mu_i^z = -\cos\Theta(r_i). \quad (6.6)$$

Neste trabalho estudamos exclusivamente skyrmions do tipo Néel, isto é, skyrmions com carga topológica  $m = 1$  e fase  $\gamma = 0$ , como podemos ver nas figuras abaixo.

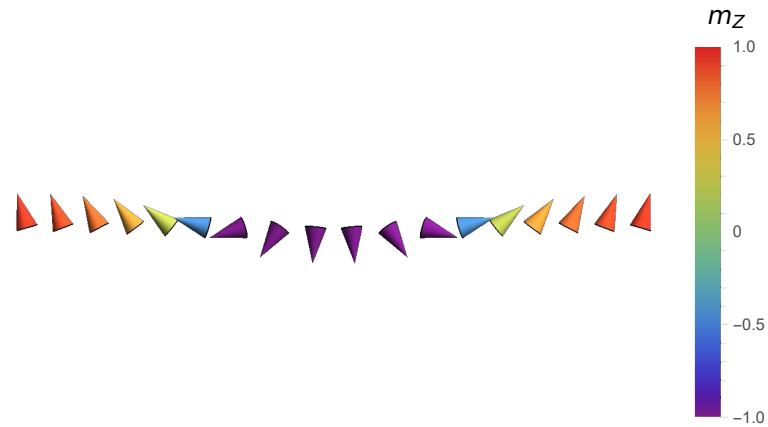


Figura 14 – Perfil da configuração de spins de um skyrmion Néel, com  $m = 1$  e  $\gamma = 0$  utilizado no cálculo da dinâmica de magnetização.

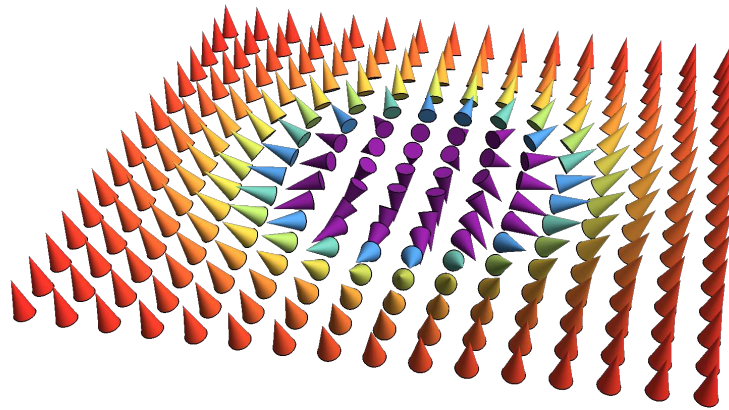


Figura 15 – Configuração de spins de um skyrmion Néel, com  $m = 1$  e  $\gamma = 0$  utilizado no cálculo da dinâmica de magnetização.

Agora, serão apresentadas todas as outras possíveis configurações skyrmions e anti-skyrmion do tipo Néel e Bloch gerados pelo programa.

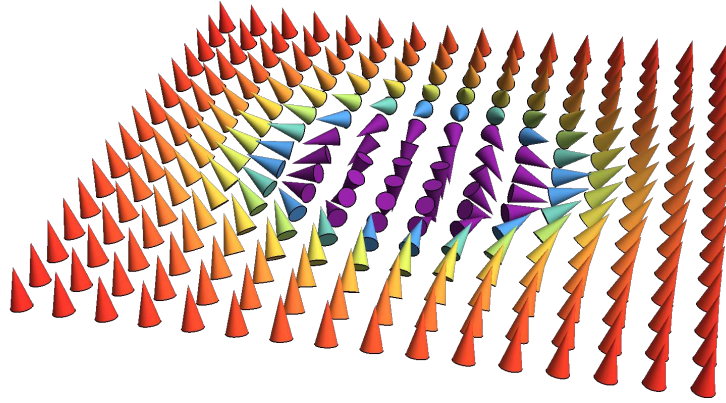


Figura 16 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Néel, com  $m = -1$  e  $\gamma = 0$ .

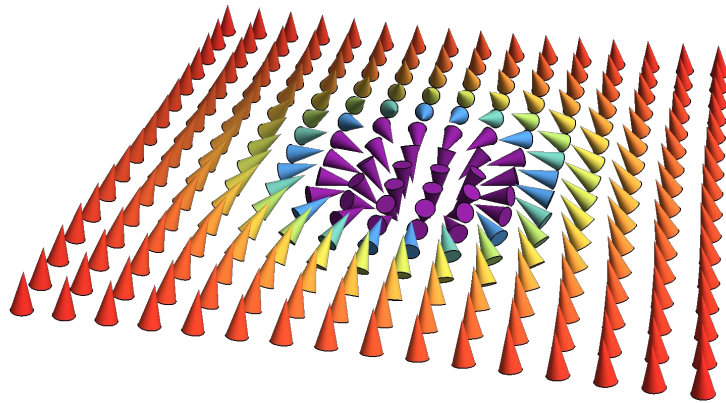


Figura 17 – Configuração de spins de um skyrmion Néel, com  $m = 1$  e  $\gamma = \pi$ .

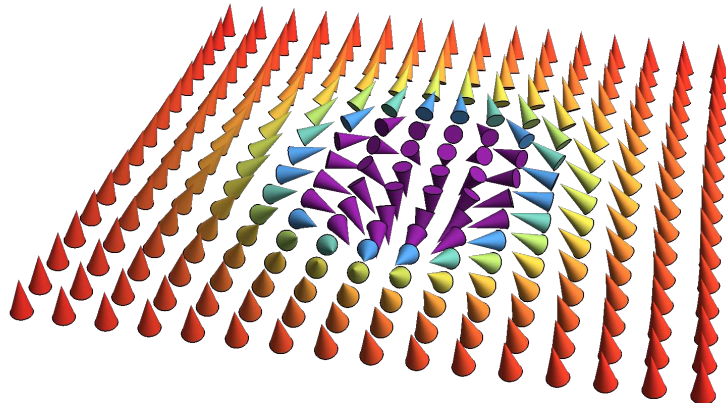


Figura 18 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Néel, com  $m = -1$  e  $\gamma = \pi$ .

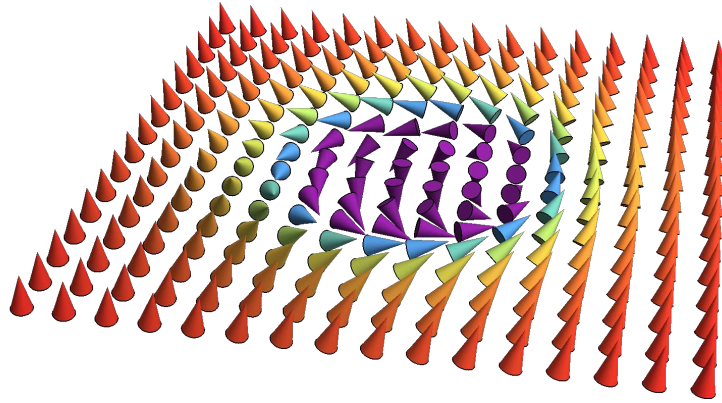


Figura 19 – Configuração de spins de um skyrmion Bloch, com  $m = 1$  e  $\gamma = \frac{\pi}{2}$ .

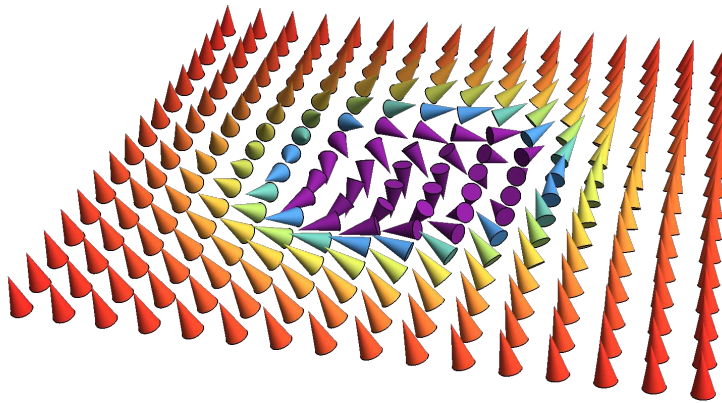


Figura 20 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Bloch, com  $m = -1$  e  $\gamma = \frac{\pi}{2}$ .

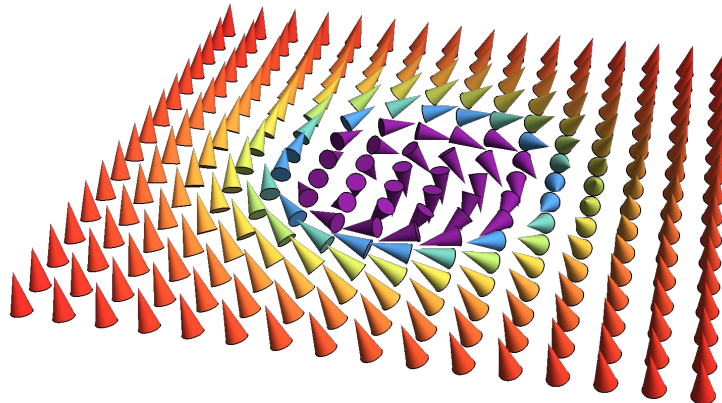


Figura 21 – Configuração de spins de um skyrmion Bloch, com  $m = 1$  e  $\gamma = -\frac{\pi}{2}$ .

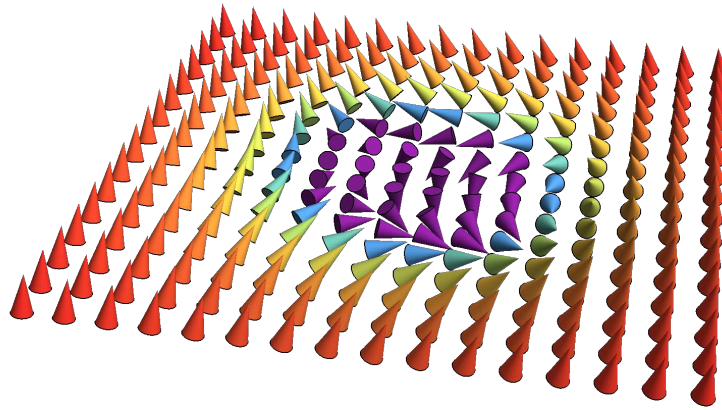


Figura 22 – Configuração de spins de um anti-skyrmion Bloch, com  $m = -1$  e  $\gamma = -\frac{\pi}{2}$ .

## 6.2 DINÂMICA DE SKYRMION

Como já foi dito, sabe-se que é possível movimentar o skyrmion ao longo da nanofita aplicando uma corrente de spin polarizada. Nesta etapa do trabalho focamos em estudar a estrutura do skyrmion durante sua dinâmica em uma fita de Co/Pt com dimensões de 500nmx80nmx2nm. O skyrmion utilizado é do tipo Néel e esta representado pela figura 15.

Na tabela abaixo estão todos os valores dos parâmetros do material utilizados no programa que calcula a dinâmica de spin.

Tabela 2 – Parâmetros do material utilizados para o cálculo da dinâmica de spins. Parâmetros retirados da referência [56]

Parâmetro	Valor	Unidade
Parâmetro de Rede ( $a$ )	$2 \times 10^{-9}$	$m$
Constante de Troca ( $J$ )	$15 \times 10^{-12}$	$J/m$
Anisotropia ( $\lambda$ )	$6 \times 10^5$	$J/m^3$
Magnetização de Saturação ( $M_s$ )	$5,8 \times 10^5$	$A/m$
Dzyaloshinskii-Moryia ( $D$ )	$4 \times 10^{-3}$	$J/m^2$
Damping ( $\alpha$ )	0,1	
Densidade de corrente ( $j$ )	$1 \times 10^{12}$	$A/m^2$
Polarização ( $P$ )	0,7	
Constante não adiabática ( $\xi$ )	0,35	

Aplicando-se uma densidade de corrente na direção  $+x$  (sentido convencional), a trajetória do skyrmion terá uma componente na direção  $-x$  e  $-y$ , como podemos ver na figura 23. Este fenômeno é conhecido como Efeito Hall de Skyrmion. A sequência de imagens abaixo demonstra a deflexão do skyrmion na nanofita, onde foi aplicado uma densidade de corrente de  $j = 1 \times 10^{12} A/m^2$ . É de grande importância destacar que durante toda a dinâmica, a corrente de spin polarizada permanece ligada.



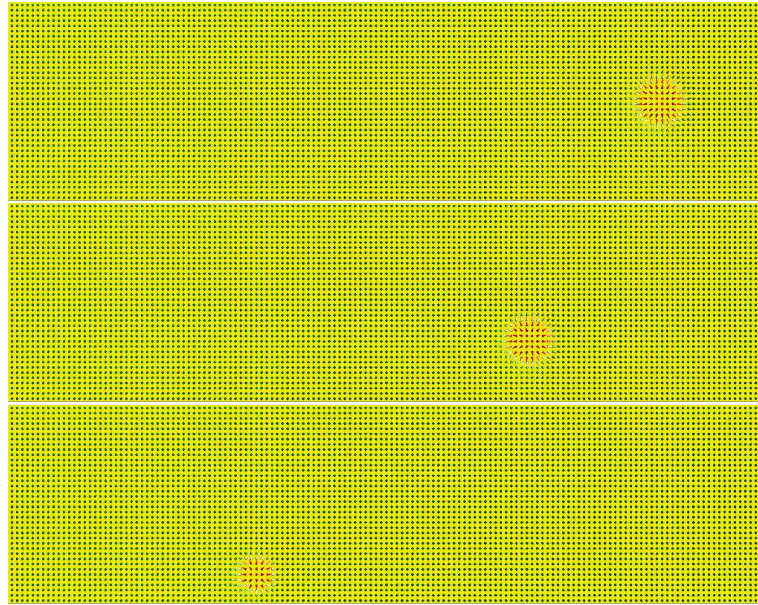


Figura 23 – Sequencia de frames da dinâmica de skyrmion em uma nanofita.

### 6.2.1 TRAJETÓRIA

Como estamos interessados em estudar a dinâmica de skyrmion, é de grande necessidade definir sua trajetória na nanofita. Nas figuras abaixo estão apresentadas as trajetórias encontradas pelos métodos já conhecidos na literatura: o Método da Média das Magnetizações e o Método da Carga.

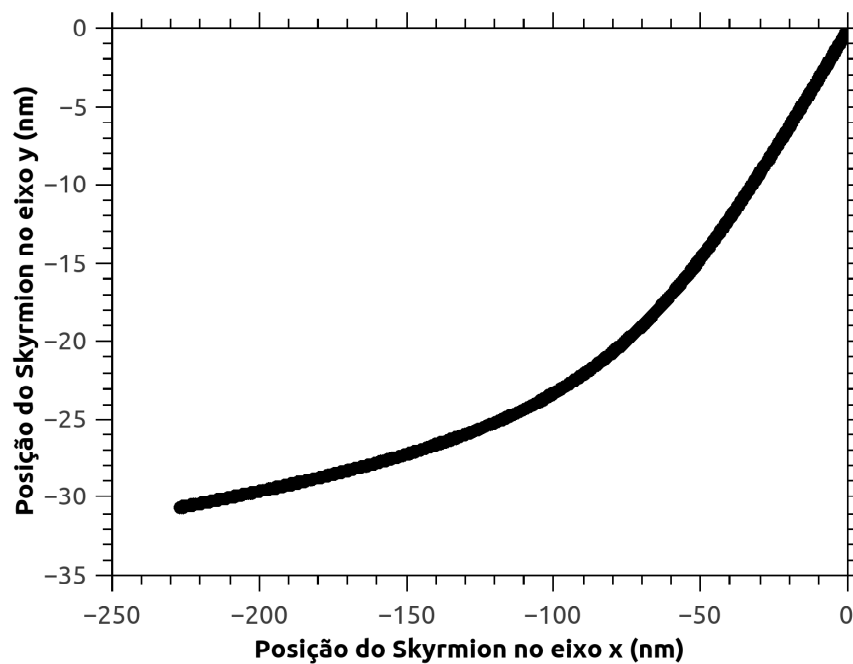


Figura 24 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões  $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método das cargas.

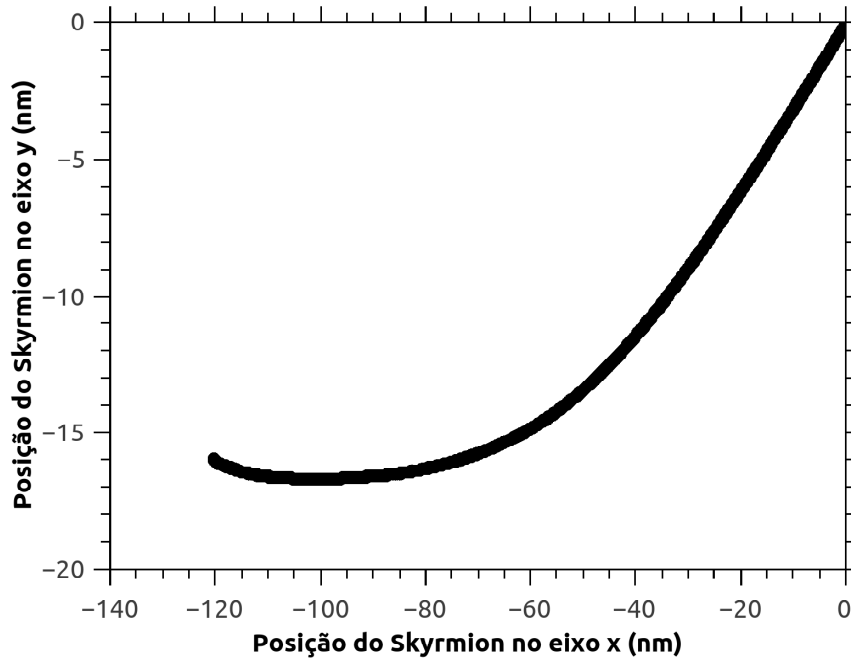


Figura 25 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões  $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método das médias das magnetizações.

No terceiro e último método, o Método dos Sapos, utilizamos não apenas para o cálculo da trajetória, mas também para a determinação do raio do skyrmion em movimento. Definimos um vetor posição quadrimensional para cada sapo:

$$\vec{x}^i(t) = (x_t^{1,i}, x_t^{2,i}, x_t^{3,i}, x_t^{4,i}), \quad (6.7)$$

onde  $x_t^{1,i}$  é a posição do centro do skyrmion no eixo  $x$  ( $x_s$ ),  $x_t^{2,i}$  é a posição do centro do skyrmion no eixo  $y$  ( $y_s$ ),  $x_t^{3,i}$  é raio do skyrmion ( $r_s$ ) e  $x_t^{4,i}$  é o parâmetro adimensional  $s$ . Após calcular cada passo dos sapos ( $x_{t+1}^i$ ), o programa deve determinar o quão preciso é a determinação da configuração proposta frente às precedentes. Para fins de comparação, foi utilizado um método de proposto na referência [57]. Neste trabalho foi proposto que os vetores magnetização do skyrmion Néel fosse escrito na forma:

$$\vec{m}_0 = \text{sen} \left( \frac{\pi}{2} \Theta(r) \right) \hat{z} + \text{cos} \left( \frac{\pi}{2} \Theta(r) \right) \hat{\theta}, \quad (6.8)$$

sendo a função

$$\Theta(r) = \frac{1 - \frac{r}{r_s} \frac{2}{1-s}}{1 + \frac{r}{r_s} \frac{2}{1-s}}, \quad (6.9)$$

com,  $s$  no intervalo  $[0, 1)$  e  $\vec{r} = r(\theta)\hat{r} + z\hat{z}$  em coordenadas cilíndricas.

Então, basicamente foi preciso determinar uma função para encontrar os melhores valores de  $x_s, y_s, r_s$  e  $s$  obtidos pelos sapos que representam de forma satisfatória os vetores

magnetização obtidos na simulação micromagnética. Esta função, é dada por:

$$f(x_s, y_s, r_s, s) = \sum_k \left| m_z - \sin \left( \frac{\pi}{2} \frac{1 - \left( \frac{(x_k - x_s)^2 + (y_k - y_s)^2}{r_s^2} \right)^{\frac{1}{1-s}}}{1 + \left( \frac{(x_k - x_s)^2 + (y_k - y_s)^2}{r_s^2} \right)^{\frac{1}{1-s}}} \right) \right|, \quad (6.10)$$

onde  $k$  é a posição do  $k$ -ésimo sítio da rede. Esta equação representa o erro total na previsão do módulo do vetor magnetização no eixo  $z$ . Desta maneira, o menor valor da função  $f$  representa a melhor posição encontrada pelos sapos. A trajetória obtida pelo método dos sapos está apresentada abaixo.

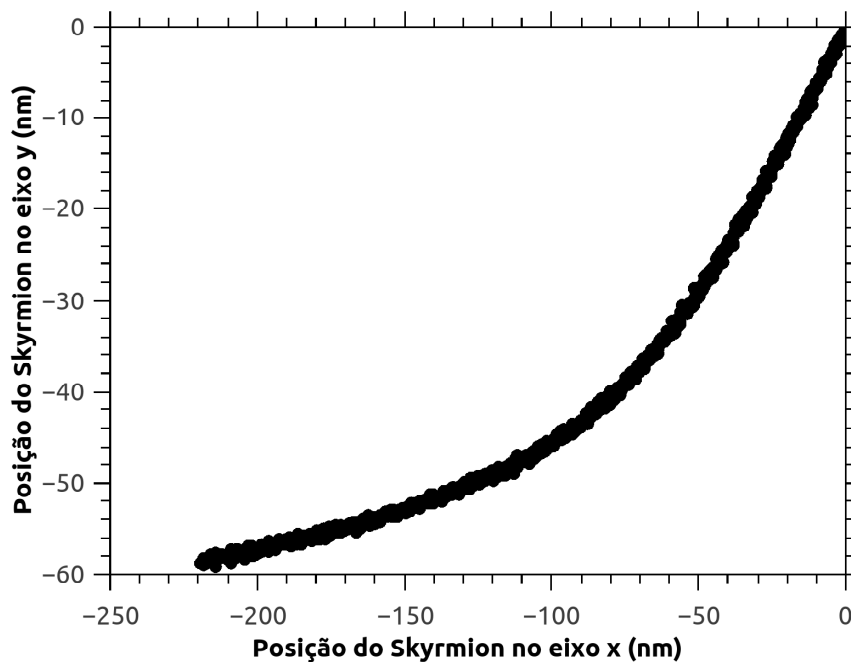


Figura 26 – Trajetória de um skyrmion Néel em uma fita de Co/Pt com dimensões  $500 \times 80 \times 2 \text{ nm}$ , calculada através do método dos sapos.

Para fins de comparação, a figura 27 apresenta as três trajetórias sobrepostas obtidas pelos métodos. Podemos observar que o método da média da magnetização é o que mais se difere dos demais. Ele apresenta um desvio quando o skyrmion tende a se aproximar da borda, sendo assim, o método menos preciso. Os outros dois métodos (carga e sapos) apresentaram trajetórias muito parecidas. Entretanto, para o método da carga, devido à quebra de simetria de translação na borda produzir uma carga topológica líquida nos extremos da fita, deslocando seu valor médio em direção à borda, o que faz com que apresente um desvio da trajetória. Enfim, o método das cargas apresenta ser o mais eficiente e correto. Apesar de que o método introduza ruído através de seus passos aleatórios, ele não apresenta nenhum viés de posição, seja ele próximo ou afastado das bordas. Isso ocorre porque cada salto dos sapos, através da função objetivo, considerará propositalmente mudanças na magnetização próximos aos limites.



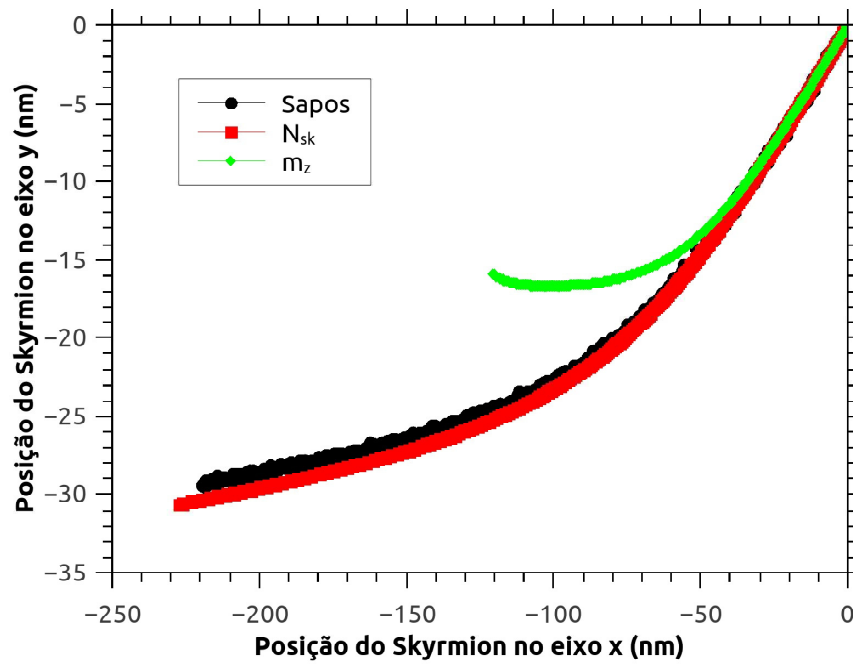


Figura 27 – Apresentação das 3 trajetórias calculadas pelos 3 diferentes métodos.

A sequência de figuras abaixo apresenta as 3 trajetórias juntamente com o skyrmion durante a dinâmica. Todas as análises feitas adiante, foram a partir das trajetórias obtidas pelo Método dos Sapos, o qual concluímos ser a mais precisa. A partir de agora, investigamos a velocidade adquirida pelo skyrmion durante a dinâmica e os efeitos que a borda exerce sobre o mesmo.

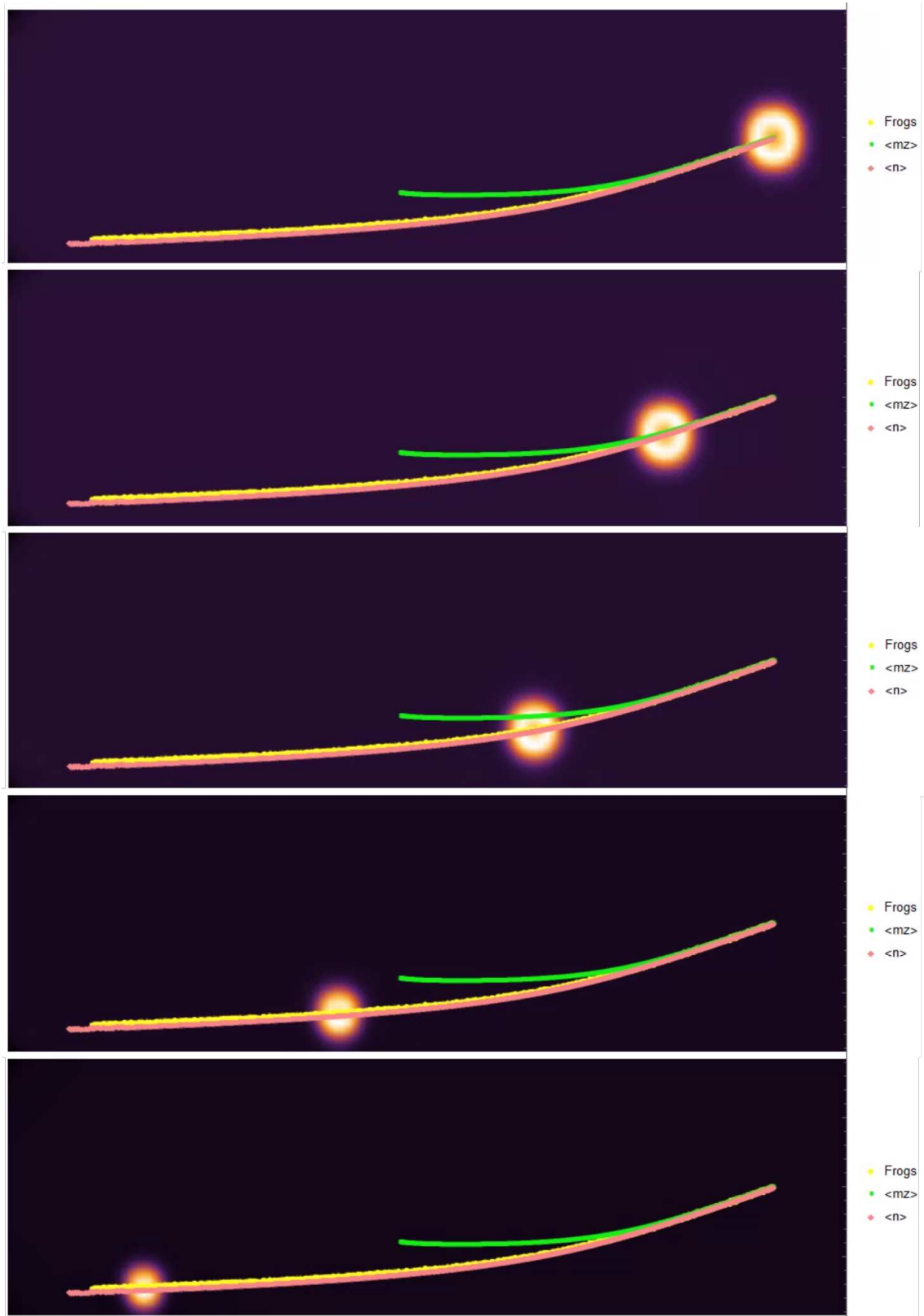


Figura 28 – Sobreposições das 3 trajetórias encontradas com a imagem da dinâmica do skyrmion na nanofita. O skyrmion está representado pelo círculo laranja.

### 6.2.2 VELOCIDADE DO SKYRMION

Como já obtemos todas as posições do skyrmion durante a dinâmica, podemos também analisar as componentes da velocidade. Dado a trajetória nas direções  $x$  e  $y$  da quasipartícula, podemos derivá-las em relação ao tempo, obtendo assim as velocidades  $v_x$  e  $v_y$  do skyrmion, que estão apresentadas pela figura 29.

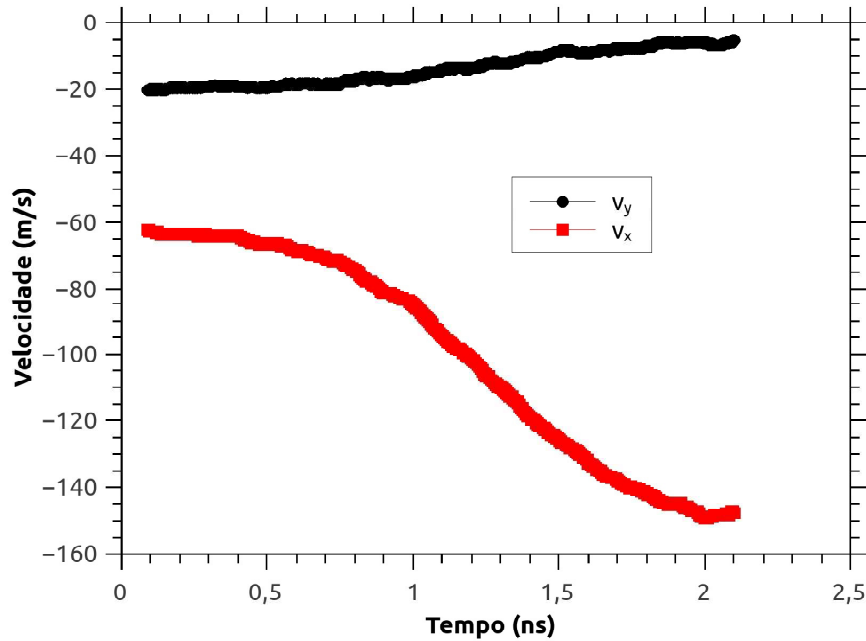


Figura 29 – Componentes  $x$  e  $y$  da velocidade do skyrmion durante sua dinâmica.

Através da equação de Thiele para uma fita infinita 4.12, podemos obter as velocidades iniciais  $v_x$  e  $v_y$  (os cálculos encontram-se no Capítulo 4):

$$v_x = v_j \frac{\alpha\beta D_{xx}D_{yy} + (4\pi N_{sk})^2}{\alpha^2 D_{xx}D_{yy} + (4\pi N_{sk})^2}, \quad v_y = v_j \frac{4\pi N_{sk}D_{xx}(\beta - \alpha)}{(4\pi N_{sk})^2 + \alpha^2 D_{xx}D_{yy}}.$$

Utilizando-se da definição do módulo do vetor  $\vec{v}_j$  (equação 3.37), teremos os seguintes valores teóricos: ,

$$v_x = -65,19 \text{ m/s}, \quad v_y = -21,25 \text{ m/s}.$$

Para encontrar a velocidade inicial da quasipartícula, analisamos os primeiros 300 passos da dinâmica, o que equivale a aproximadamente 0,7 nanossegundo (veja a figura 30). Visivelmente, podemos identificar que os gráficos da posição em  $x$  e  $y$  traçam uma reta. Desta forma, fazendo a regressão linear, podemos obter as velocidades através do coeficiente angular da reta:

$$v_x = -64,45 \pm 0,02 \text{ m/s}, \quad v_y = -19,16 \pm 0,02 \text{ m/s}.$$

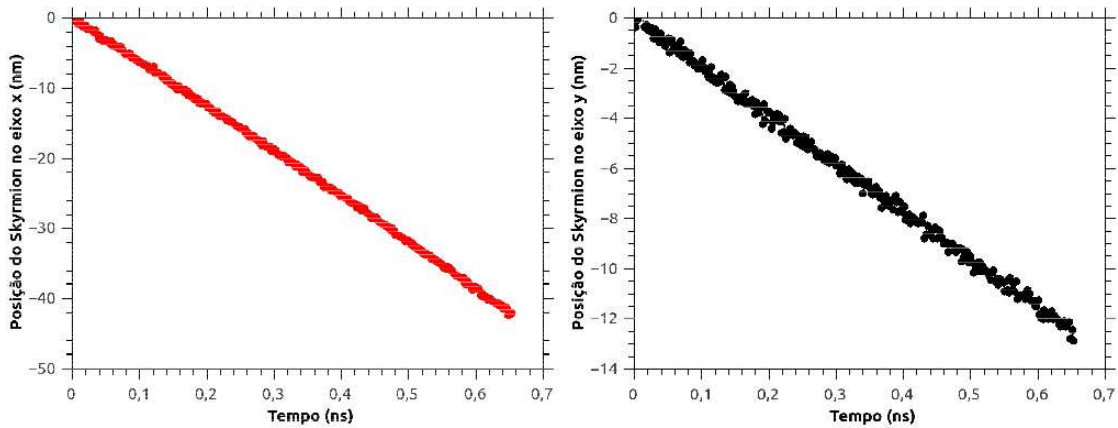


Figura 30 – Posição do skyrmions nos eixos  $x$  e  $y$  nos primeiros 300 passos computacionais da dinâmica, calculado pelo método dos sapos.

Podemos observar que os nossos resultados estão coerentes com os valores teóricos.

Apesar de nos primeiros instantes as velocidades  $v_x$  e  $v_y$  se mostrarem constantes, ao decorrer da dinâmica do skyrmion a componente  $x$  da velocidade, em módulo, aumenta e a componente  $y$  diminui e isto ocorre devido a efeitos de borda sobre o skyrmion.

### 6.2.3 EFEITO DE BORDA

Vários fenômenos podem ser observados quando o skyrmion se aproxima da borda. O primeiro deles, o qual trataremos agora, é o tamanho do skyrmion. Durante a dinâmica (figura 23), o raio do skyrmion diminui em relação a sua distância à borda. É definido como raio do skyrmion a distância entre o spin do centro do skyrmion (direção  $-z$ ) e o primeiro spin com ângulo de  $90^\circ$  referente a ele (veja a figura).

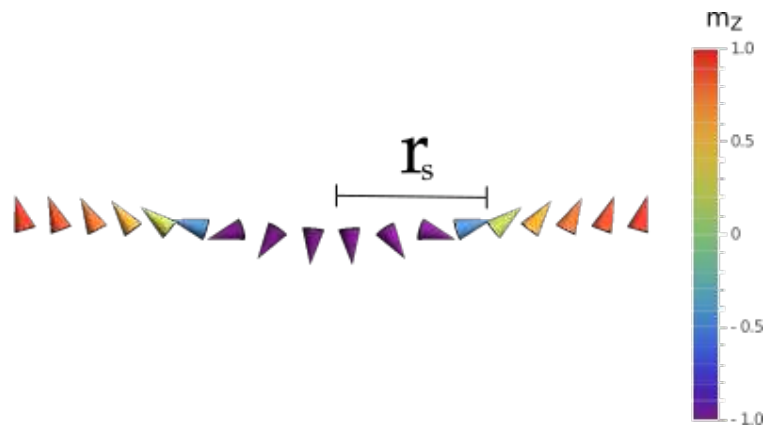


Figura 31 – Representação da definição do raio do skyrmion.

Abaixo, está apresentado a variação do raio de skyrmion e relação a posição do skyrmion no eixo  $y$ .

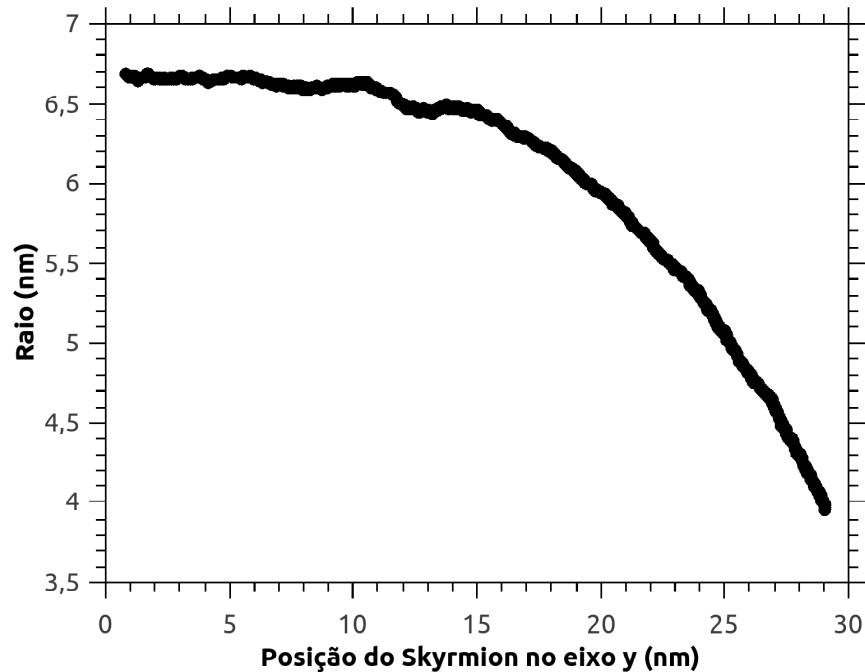


Figura 32 – Gráfico da variação do raio do skyrmion em relação a sua posição em relação ao eixo  $y$ , durante sua dinâmica em uma nanofita de Co/Pt. A nanofita possui 80 nm de largura.

Outra análise que podemos fazer é sobre o valor da carga topológica do skyrmion. Skyrmions possuem carga topológica inteira e positiva e com valor igual a 1. Porém, como tratamos de um modelo micromagnético, i.e. um sistema discreto, pela integral dada na equação 4.1 não obteremos como resultado  $N_{sk} = 1$  e sim um número razoavelmente próximo. Na figura 33 podemos encontrar os valores da carga topológica da quasipartícula durante toda sua dinâmica.

De forma análoga ao que acontece com o raio do skyrmion, a carga topológica diminui ao se aproximar da borda da nanofita. Como a carga topológica é interligada à geometria do skyrmion, de fato é aceitável este resultado, dado que o skyrmion se deforma ao se aproximar da borda.

Para aprofundarmos no estudo de tais fenômenos, calculamos a energia total de nossa configuração variando a posição do skyrmion no eixo  $y$ . Basicamente, colocamos o skyrmion no centro da fita, deixando-o termalizar e por fim calculando a energia do sistema. Variando apenas a posição no eixo  $y$ , repetimos os procedimentos acima. Diminuindo os valores de energia obtidos pela energia do sistema quando o skyrmion estava no centro da fita, ou seja, a posição onde o skyrmion está mais longe da borda e não sofre de seus efeitos, podemos encontrar o gráfico da contribuição da energia potencial da interação skyrmion-borda. A medida que a quasipartícula aproxima da borda, a energia total do sistema aumenta até atingir a um "ponto crítico", onde a energia decai (ver figura 34). Até

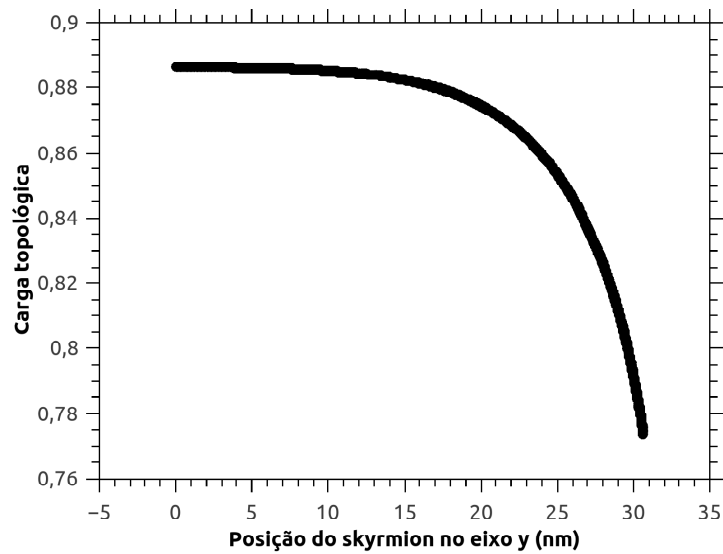


Figura 33 – Gráfico da variação da carga topológica do skyrmion em relação a sua posição em relação ao eixo  $x$ , durante sua dinâmica em uma nanofita de Co/Pt. A nanofita possui 80 nm de largura.

este ponto crítico, o skyrmion será repellido pela borda, mas ao ultrapassá-lo a nanofita o expulsará, de forma que haja uma minimização de energia do sistema. A partir deste ponto crítico, o tamanho do skyrmion também começa a influenciar, dado que o espaço restante da nanofita pode não comportar o skyrmion por inteiro, fazendo que sua estrutura não estabilize e o skyrmion se desfça. Abaixo, está apresentado o gráfico da energia de interação skyrmion-borda.

A partir do gráfico apresentado pela figura 34, podemos ver que a borda possui caráter repulsivo. Esta característica é de suma importância quando se trata da dinâmica de skyrmion. Por exemplo, esta repulsão permite que o skyrmion percorra sua trajetória sem que ele "escape" pela borda horizontal, desde que a corrente aplicada não seja grande e que forneça a energia com que o skyrmion ultrapasse esta barreira. Abaixo está apresentado uma sequência de frames cujo fenômeno acima descrito ocorre. Em uma fita de Co/Pt, foi aplicada uma densidade de corrente  $5 \times 10^{13} \frac{A}{m^2}$  o que faz com que o skyrmion saia rapidamente da nanofita.

Outros parâmetros que observamos durante a dinâmica foram os valores das componentes do tensor dissipativo  $\mathcal{D}$  ( $D_{xx}$  e  $D_{yy}$ ). Os mesmos ainda precisam de uma análise mais aprofundada, porém podemos ressaltar alguns pontos por aqui.

Como sabemos,  $D_{xx}$  e  $D_{yy}$  são calculados através da integral dada pela equação 4.11. Utilizando desta expressão, calculamos os valores das componentes, como podemos ver abaixo.

Como podemos ver na figura acima, diferentemente de uma fita infinita, as com-

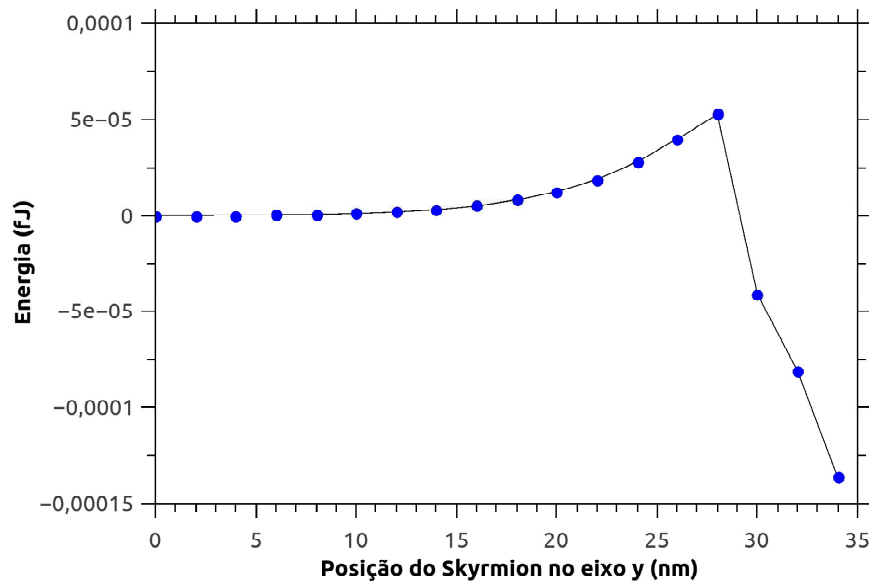


Figura 34 – Gráfico da energia de interação skyrmion-borda em relação à distância do centro do skyrmion no eixo  $y$ . Inicialmente, o skyrmion estava localizado no centro da nanofita de Co/Pt com dimensão  $(500 \times 80 \times 2) \text{ nm}^3$ .

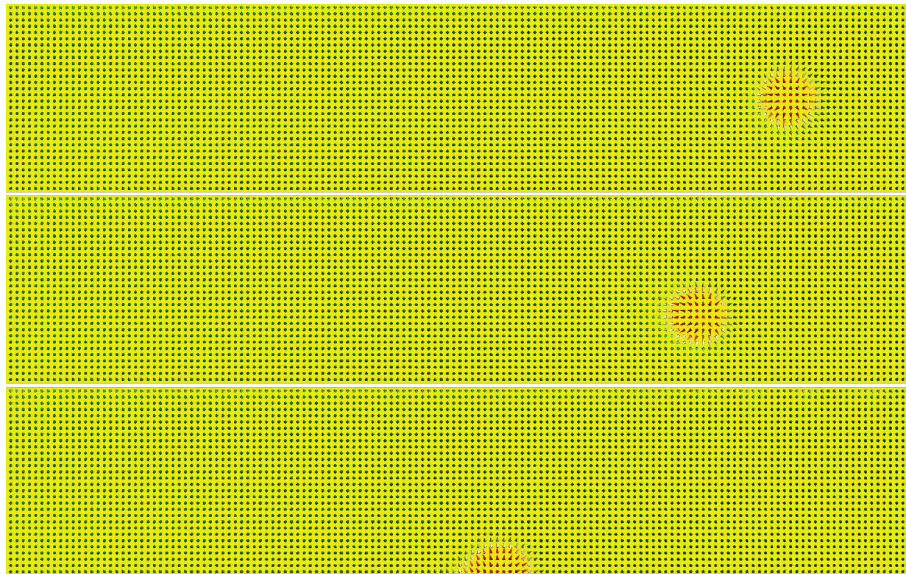


Figura 35 – Sequencia de frames da dinâmica de skyrmion em uma nanofita com uma densidade de corrente alta.

ponentes apresentam valores diferentes onde  $D_{xx} > D_{yy}$ . Ainda não temos informações suficientes para obtermos uma conclusão sobre qual são os fatores que realmente interferem neste fenômeno. Entretanto, fazendo algumas simulações, conseguimos verificar que quanto maior fosse o parâmetro  $s$  maior seria os valores para  $D_{yy}$  e  $D_{xx}$ . Desta forma, através do programa que realiza os métodos dos sapos, podemos ver a variação deste parâmetro durante a dinâmica, o qual está representada abaixo.

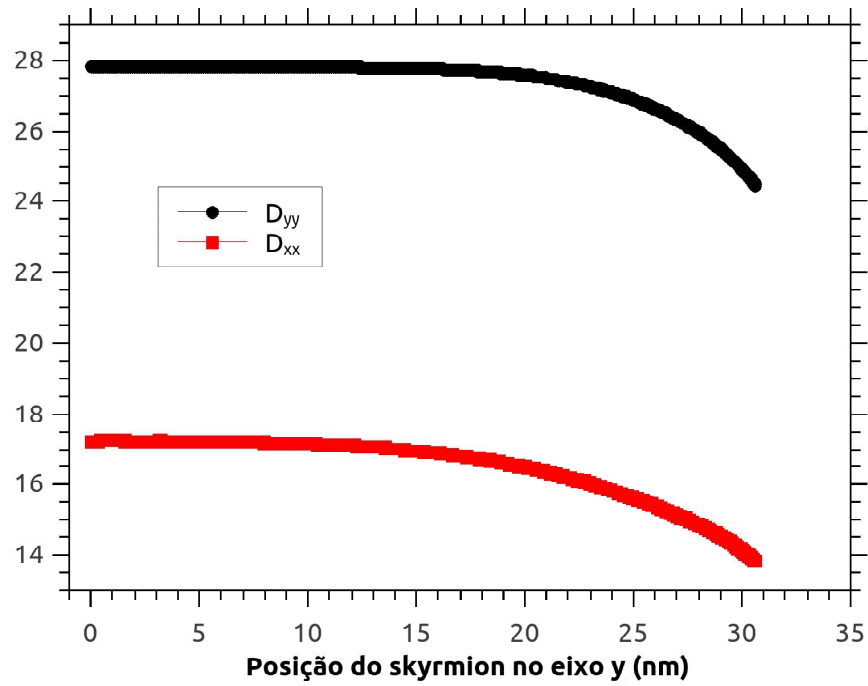


Figura 36 – Gráfico das componentes  $D_{xx}$  e  $D_{yy}$  do tensor dissipativo  $D$  em função da posição do skyrmion no eixo  $y$ .

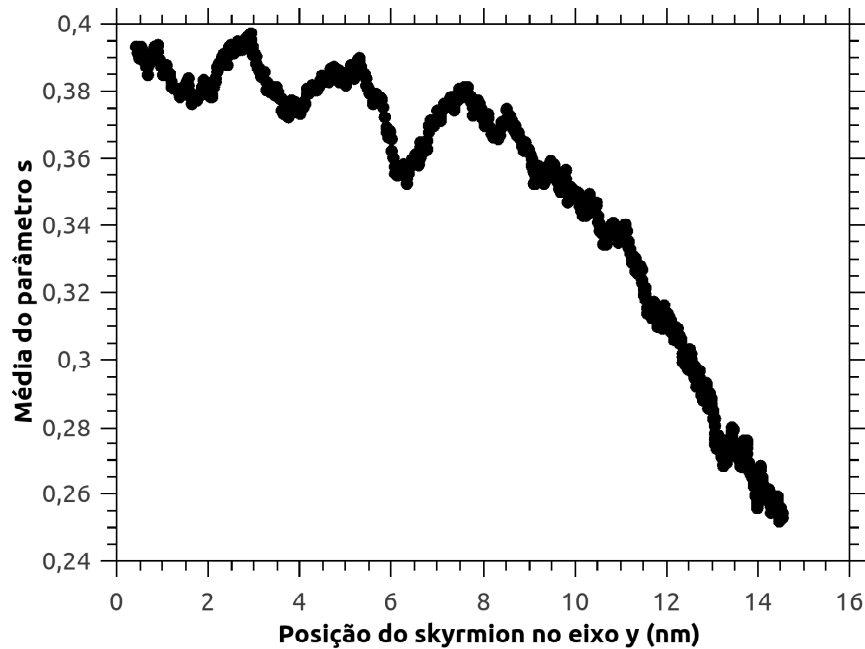


Figura 37 – Gráfico do parâmetro  $s$  em função da posição do skyrmion no eixo  $y$ .

De forma análoga as componentes  $D_{xx}$  e  $D_{yy}$ , o parâmetro  $s$  também diminui. Ainda precisamos de mais análise para associar estes parâmetros ao efeito de borda e conseqüentemente as variações das componentes da velocidade.



## 7 CONCLUSÕES

Neste presente trabalho, estudamos a dinâmica e estrutura de skyrmions em nanofitas de Co/Pt. Utilizando-se das equações  $\Theta(r)$  e  $\Phi(\phi)$ , e da definição do momento magnético unitário, criamos um programa na linguagem Fortran 90 o qual nos capacitou criar todas as possibilidades de skyrmions e anti-skyrmions do tipo Néel e Bloch. Além disso, neste programa é possível modificar a estrutura da nanofita e o local de origem do skyrmion. O programa foi amplamente testado e poderá ser incorporado no programa da dinâmica das magnetizações do nosso grupo.

Através de simulações de um modelo micromagnético descrito por uma hamiltoniana que continha contribuições de todas as interações (DM, troca, dipolar e anisotrópica), resolvemos numericamente a equação LLG obtendo a dinâmica da magnetização. A partir destes cálculos pudemos obter as trajetórias a partir dos 3 métodos descritos neste trabalho. Nas trajetórias obtidas, o método dos sapos se mostrou mais preciso comparado aos outros. O valor obtido pelo método das médias das magnetizações, metodicamente dá posições desviadas em direção ao centro da nanofita (ao não levar em conta a desmagnetização dos limites), enquanto a trajetória obtida pelo método das cargas faz o mesmo na direção das bordas. Além de encontrar adequadamente a trajetória, o método dos sapos também fornece dados como o raio do skyrmion ( $r_s$ ) e o parâmetro  $s$ .

Após obtemos as posições, utilizando-se da trajetória calculada pelo método dos sapos, analisamos o comportamento das componentes da velocidade. Nos primeiros instantes da dinâmica (aproximadamente 0,7 ns) verificamos que a velocidade é constante, e os valores obtidos pela nossa simulação aproximam-se dos valores teóricos. A medida que o skyrmion se aproxima da borda, as componentes da velocidade variam. Sistemáticamente, a velocidade  $v_x$  aumenta, enquanto a velocidade  $v_y$  diminui.

Diante deste acontecimento, investigamos outras propriedades estruturais. Além de interferir na velocidade do skyrmion, verificamos diminuição nos valores da carga topológica e de seu raio. Ao vermos o caráter repulsivo da borda, atribuímos estes fenômenos ao efeito de borda.

Uma perspectiva futura é analisar a fundo as variações das componentes da velocidade a partir da equação de Thiele. Sendo assim, entender as variações das componentes do tensor dissipativo  $\mathcal{D}$  e o parâmetro  $s$  e sua relação com a dinâmica de skyrmions. Ainda para futuros trabalhos, fazer um estudo sistêmico da interferência da discretização do modelo micromagnético nos cálculos dos parâmetros estruturais e da dinâmica de magnetização.

## REFERÊNCIAS

- [1] J. C. d. S. Gomes, “Estudo da dinâmica da parede de domínio transversal em nanofios magnéticos mediante aplicação de corrente de spin polarizada,” Master’s thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2015.
- [2] D. Toscano, “Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos,” Master’s thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2011.
- [3] H. C. Siegmann and J. Stöhr, *Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics*. Springer Bln, 2006.
- [4] T. Shinjo, *Nanomagnetism and spintronics*. Elsevier, 2013.
- [5] K. Everschor, “Current-induced dynamics of chiral magnetic structures,” *Inaugural-Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades, Universität zu Köln*, 2012.
- [6] H.-B. Braun, “Topological effects in nanomagnetism: from superparamagnetism to chiral quantum solitons,” *Advances in Physics*, vol. 61, no. 1, pp. 1–116, 2012.
- [7] N. Nagaosa and Y. Tokura, “Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions,” *Nature nanotechnology*, vol. 8, no. 12, p. 899, 2013.
- [8] M. J. Bailey, J. T. Duong, and B. A. Helms, “Research spotlight: Delivery of custom-purposed colloidal nanocrystals to cancer cells,” *Therapeutic delivery*, vol. 3, no. 9, pp. 1041–1045, 2012.
- [9] A. P. Guimarães, *Principles of nanomagnetism*, vol. 7. Springer, 2009.
- [10] S. S. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, “Magnetic domain-wall racetrack memory,” *Science*, vol. 320, no. 5873, pp. 190–194, 2008.
- [11] “Discos rígidos.” [https://www.gta.ufrj.br/grad/07\\_1/hd/func.html](https://www.gta.ufrj.br/grad/07_1/hd/func.html). acessado em 16/07/2019.
- [12] E. L. M. d. Paixão, *Estudo da parede de domínio transversal na presença de impurezas magnéticas sob efeito de corrente elétrica polarizada em spin via simulação micromagnética*. PhD thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2018.
- [13] “Magnetic skyrmions hold promise for next-gen memory devices.” [https://www.eetimes.com/document.asp?doc\\_id=1332203#](https://www.eetimes.com/document.asp?doc_id=1332203#). acessado em 16/07/2019.
- [14] S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, *Spin current*, vol. 22. Oxford University Press, 2017.
- [15] R. Resnick and R. Eisberg, “Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas,” *Editores Campus*, 1979.
- [16] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics,” 1999.
- [17] C. Kittel *et al.*, *Introduction to solid state physics*, vol. 8. Wiley New York, 1976.

- [18] D. Toscano, *Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas*. PhD thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2015.
- [19] M. G. J. Monteiro, “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] W. Nolting and A. Ramakanth, *Quantum theory of magnetism*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [21] N. Perez, E. Martinez, L. Torres, S.-H. Woo, S. Emori, and G. Beach, “Chiral magnetization textures stabilized by the dzyaloshinskii-moriya interaction during spin-orbit torque switching,” *Applied Physics Letters*, vol. 104, no. 9, p. 092403, 2014.
- [22] I. Dzyaloshinsky, “A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 4, no. 4, pp. 241–255, 1958.
- [23] T. Moriya, “Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism,” *Physical Review*, vol. 120, no. 1, p. 91, 1960.
- [24] T. L. Gilbert, “A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials,” *IEEE transactions on magnetics*, vol. 40, no. 6, pp. 3443–3449, 2004.
- [25] L. Landau and E. Lifshitz, “On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies,” in *Perspectives in Theoretical Physics*, pp. 51–65, Elsevier, 1992.
- [26] S. Mehrotra, “On the implementation of a primal-dual interior point method,” *SIAM Journal on optimization*, vol. 2, no. 4, pp. 575–601, 1992.
- [27] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, and D. B. Meade, *Elementary differential equations and boundary value problems*. Wiley New York, 9 ed., 1992.
- [28] D. Toscano, V. Ferreira, S. Leonel, P. Coura, F. Sato, R. Dias, and B. Costa, “Position of the transverse domain wall controlled by magnetic impurities in rectangular magnetic nanowires,” *Journal of Applied Physics*, vol. 115, no. 16, p. 163906, 2014.
- [29] Q. Xiao, J. Rudge, E. Girgis, J. Kolthammer, B. Choi, Y. Hong, and G. Donohoe, “Dynamics of magnetic vortex core switching in fe nanodisks by applying in-plane magnetic field pulse,” *Journal of Applied Physics*, vol. 102, no. 10, p. 103904, 2007.
- [30] Y. Gaididei, D. D. Sheka, and F. G. Mertens, “Controllable switching of vortex chirality in magnetic nanodisks by a field pulse,” *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 1, p. 012503, 2008.
- [31] L. Berger, “Exchange interaction between ferromagnetic domain wall and electric current in very thin metallic films,” *Journal of Applied Physics*, vol. 55, no. 6, pp. 1954–1956, 1984.
- [32] S. Zhang and Z. Li, “Roles of nonequilibrium conduction electrons on the magnetization dynamics of ferromagnets,” *Physical Review Letters*, vol. 93, no. 12, p. 127204, 2004.

- [33] Y. B. Bazaliy, B. Jones, and S.-C. Zhang, “Modification of the Landau-Lifshitz equation in the presence of a spin-polarized current in colossal- and giant-magneto-resistive materials,” *Physical Review B*, vol. 57, no. 6, p. R3213, 1998.
- [34] G. Tatara and H. Kohno, “Theory of current-driven domain wall motion: Spin transfer versus momentum transfer,” *Physical Review Letters*, vol. 92, no. 8, p. 086601, 2004.
- [35] T. H. R. Skyrme, “A unified field theory of mesons and baryons,” *Nuclear Physics*, vol. 31, pp. 556–569, 1962.
- [36] A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, “Skyrmions on the track,” *Nature Nanotechnology*, vol. 8, no. 3, p. 152, 2013.
- [37] D. C. Wright and N. D. Mermin, “Crystalline liquids: the blue phases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 61, no. 2, p. 385, 1989.
- [38] T.-L. Ho, “Spinor Bose condensates in optical traps,” *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 4, p. 742, 1998.
- [39] J.-y. Choi, W. J. Kwon, M. Lee, H. Jeong, K. An, and Y.-i. Shin, “Corrigendum: Imprinting skyrmion spin textures in spinor Bose-Einstein condensates (2012 New J. Phys. 14 053013),” *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 6, p. 069501, 2015.
- [40] C. Morice, D. Chakraborty, X. Montiel, and C. Pépin, “Pseudo-spin skyrmions in the phase diagram of cuprate superconductors,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 30, no. 29, p. 295601, 2018.
- [41] A. Belavin and A. Polyakov, “Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets,” *JETP Lett*, vol. 22, no. 10, pp. 245–248, 1975.
- [42] R. Wiesendanger, “Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics,” *Nature Reviews Materials*, vol. 1, no. 7, p. 16044, 2016.
- [43] A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, “Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications,” *Nature Reviews Materials*, vol. 2, no. 7, p. 17031, 2017.
- [44] J. Zang, V. Cros, and A. Hoffmann, *Topology in Magnetism*, vol. 192. Springer, 2018.
- [45] A. K. Chaurasiya, C. Banerjee, S. Pan, S. Sahoo, S. Choudhury, J. Sinha, and A. Barman, “Direct observation of interfacial Dzyaloshinskii-Moriya interaction from asymmetric spin-wave propagation in w/CoFeB/SiO<sub>2</sub> heterostructures down to sub-nanometer CoFeB thickness,” *Scientific Reports*, vol. 6, p. 32592, 2016.
- [46] A. Fert, “Magnetic and transport properties of metallic multilayers,” in *Materials Science Forum*, vol. 59, pp. 439–480, Trans Tech Publ, 1990.
- [47] A. Crépieux and C. Lacroix, “Dzyaloshinsky-Moriya interactions induced by symmetry breaking at a surface,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 182, no. 3, pp. 341–349, 1998.
- [48] D. Andrikopoulos, B. Sorée, and J. De Boeck, “Skyrmion-induced bound states on the surface of three-dimensional topological insulators,” *Journal of Applied Physics*, vol. 119, no. 19, p. 193903, 2016.

- [49] A. Thiele, “Steady-state motion of magnetic domains,” *Physical Review Letters*, vol. 30, no. 6, p. 230, 1973.
- [50] A. Thiele, “Applications of the gyrocoupling vector and dissipation dyadic in the dynamics of magnetic domains,” *Journal of Applied Physics*, vol. 45, no. 1, pp. 377–393, 1974.
- [51] X. Zhang, J. Xia, G. Zhao, X. Liu, and Y. Zhou, “Magnetic skyrmion transport in a nanotrack with spatially varying damping and non-adiabatic torque,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 53, no. 3, pp. 1–6, 2016.
- [52] C. Moutafis, S. Komineas, and J. Bland, “Dynamics and switching processes for magnetic bubbles in nanoelements,” *Physical Review B*, vol. 79, no. 22, p. 224429, 2009.
- [53] N. Papanicolaou and T. Tomaras, “Dynamics of magnetic vortices,” *Nuclear Physics B*, vol. 360, no. 2-3, pp. 425–462, 1991.
- [54] A. B. d. S. Serapião, “Fundamentos de otimização por inteligência de enxames: uma visão geral,” *Sba: Controle & Automação Sociedade Brasileira de Automatica*, vol. 20, no. 3, pp. 271–304, 2009.
- [55] M. Eusuff, K. Lansey, and F. Pasha, “Shuffled frog-leaping algorithm: a memetic meta-heuristic for discrete optimization,” *Engineering optimization*, vol. 38, no. 2, pp. 129–154, 2006.
- [56] H. T. Fook, W. L. Gan, and W. S. Lew, “Gateable skyrmion transport via field-induced potential barrier modulation,” *Scientific reports*, vol. 6, p. 21099, 2016.
- [57] D. Bazeia, M. Doria, and E. Rodrigues, “Topological excitations in magnetic materials,” *Physics Letters A*, vol. 380, no. 22-23, pp. 1947–1952, 2016.

## APÊNDICE A – Conservação do módulo do momento magnético na Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) é uma equação que descreve a dinâmica da magnetização do material a ser estudado. Provaremos aqui que o módulo do momento magnético  $\vec{\mu}$  permanece constante durante toda a evolução temporal.

Utilizando a equação LLG na forma implícita (equação 3.8):

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left( \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right), \quad (\text{A.1})$$

e fazendo o produto escalar do momento magnético em ambos os lados, teremos:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{\mu} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \cdot \left( \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (\text{A.2})$$

Temos a seguinte identidade para o produto misto

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (\text{A.3})$$

podemos reescrever a equação A.2 na forma

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{B}^{ef} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}) + \frac{\alpha}{\mu} \frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}). \quad (\text{A.4})$$

Logo

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = 0, \quad (\text{A.5})$$

ou seja,  $\vec{\mu}$  é perpendicular a  $\frac{d\vec{\mu}}{dt}$ .

Agora, usando a seguinte propriedade da derivada de um produto escalar:

$$\frac{d}{dt} (\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{dt} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{dt}, \quad (\text{A.6})$$

podemos escrever

$$\frac{d}{dt} (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) = \frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (\text{A.7})$$

Usando a comutatividade do produto escalar e a equação A.5, teremos que

$$\frac{d\mu^2}{dt} = 2\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}, \quad (\text{A.8})$$

e então,

$$\frac{d\mu^2}{dt} = 0. \quad (\text{A.9})$$

Sendo assim, provando que durante a dinâmica, o módulo do momento magnético  $\vec{\mu}$  é conservado.