

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Isaac Andrade Santece

Interação Skyrmion–Impureza em Sistemas Antiferromagnéticos: Estratégias
de Controle para Dispositivos Spintrônicos

Juiz de Fora

2025

Isaac Andrade Santece

**Interação Skyrmion–Impureza em Sistemas Antiferromagnéticos: Estratégias
de Controle para Dispositivos Spintrônicos**

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

Orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmerman Coura

Juiz de Fora

2025

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

Andrade Santece, Isaac.

Interação Skyrmion–Impureza em Sistemas Antiferromagnéticos: Estratégias de Controle para Dispositivos Spintrônicos / Isaac Andrade Santece. – 2025.

107 f. : il.

Orientador: Pablo Zimmerman Coura

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2025.

1. Skyrmions. 2. Antiferromagnetismo. 3. Spintrônica. 4. Impurezas. I. Coura, Pablo Zimmermann. II. Título.

Isaac Andrade Santece

Interação Skyrmion-Impureza em Sistemas Antiferromagnéticos: Estratégias de Controle para Dispositivos Spintrônicos

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

Aprovada em 25 de setembro de 2025.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Jakson Miranda Fonseca
Universidade Federal de Viçosa (UFV)

Prof. Dr. Vagson Luiz de Carvalho Santos
Universidade Federal de Viçosa (UFV)

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

Prof. Dr. Rodrigo Alves Dias
Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF)

Juiz de Fora, 28/08/2025.



Documento assinado eletronicamente por **Pablo Zimmermann Coura, Membro**, em 25/09/2025, às 12:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vagson Luiz de Carvalho Santos, Usuário Externo**, em 25/09/2025, às 12:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Alves Dias, Servidor(a)**, em 25/09/2025, às 12:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Maikel Yusat Ballester Furones, Membro**, em 25/09/2025, às 12:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Jakson Miranda Fonseca, Usuário Externo**, em 25/09/2025, às 12:27, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **2583024** e o código CRC **9C1630D1**.

Dedico este trabalho ao meu querido avô Expedito, com eterna gratidão por tudo o que fez por mim e por nossa família.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por me conceder força e perseverança para superar mais esta etapa.

À minha esposa, Mariângela, pelo companheirismo, amor e paciência incondicionais. Obrigado por ser meu porto seguro e por caminhar ao meu lado em todos os momentos.

Aos meus pais, Luiz e Leila, cujo esforço incansável, dedicação e sacrifícios ao longo dos anos abriram os caminhos para que eu pudesse chegar até aqui. Ao meu irmão, Miguel, por todo o apoio, pelas conversas e pelo incentivo constante que tornaram possível esta conquista. Também estendo toda minha gratidão a todos os meus familiares, que sempre estiveram presentes e torcendo por mim.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Pablo Zimmermann, pelos conselhos, pelas conversas enriquecedoras e pelas valiosas contribuições para o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também a todos os professores que fizeram parte da minha formação, desde a educação básica até o ensino superior.

Aos amigos que fizeram parte de diferentes fases da minha vida, minha sincera gratidão. Agradeço ao Robson e ao Henrique, pela amizade e apoio que se estendem da graduação até hoje. Deixo também, meu reconhecimento aos amigos João, Max, Josiel, Ísis, Cláudio, Ícaro e Wanglesio, pela parceria e pelas trocas valiosas ao longo dessa etapa. Aos amigos que estiveram comigo na sala 02 — Antônio, Ana Lúcia, Anna, Benny, Lucas, Marlon, Diego e Yuri, pelas conversas, confraternizações e momentos de descontração que tornaram a jornada mais leve e prazerosa. E, por fim, aos amigos de infância Diogo, Douglas e Guilherme, que, mesmo vindos de um tempo distante, permaneceram presentes e me acompanharam nesta caminhada.

Agradeço à Universidade Federal de Juiz de Fora, ao Laboratório de Simulação Computacional, na pessoa do Prof. Dr. Fernando Sato, bem como ao Departamento de Física e a seus funcionários pelo apoio institucional. Registro também minha gratidão às agências de fomento CAPES, CNPq, FAPEMIG e FINEP pelo suporte essencial ao desenvolvimento desta pesquisa.

“Nada estará perdido enquanto estivermos em busca.”

Santo Agostinho

RESUMO

Skymions antiferromagnéticos são fortes candidatos à composição de dispositivos spintrônicos devido à ausência do Efeito Hall de Skymion. Estes dispositivos podem operar com base em um sistema binário a partir de armadilhas que controlam a posição dos skymions em regiões predefinidas de um nanofio, e podem então ser detectados por meio de uma junção túnel magnética. O estado binário é definido pela presença (1) ou ausência (0) de um skymion dentro da zona de aprisionamento, delimitada por impureza magnética circular. Tais impurezas são modeladas por meio da modificação de parâmetros da Hamiltoniana micromagnética: a rigidez de troca, a magnetização de saturação, a anisotropia magnetocristalina e a constante de interação de Dzyaloshinskii–Moriya. Dependendo da escolha dos parâmetros magnéticos, a impureza pode apresentar caráter atrativo ou repulsivo. As posições dos skymions entre as armadilhas são manipuladas por corrente spin-polarizada. Este trabalho fornece informações relevantes sobre a eficiência das armadilhas, considerando fatores como o tamanho da armadilha, os parâmetros do hamiltoniano e a corrente spin-polarizada. Os resultados das simulações foram validados por meio da equação de Thiele, demonstrando forte consistência entre os dados numéricos e os modelos teóricos. Também foi avaliado o tempo de comutação de um skymion se deslocando entre duas armadilhas, com o objetivo de modelar a funcionalidade de dispositivos de memória. O tempo de reposicionamento foi inferior a 1 ns, destacando o potencial para operação em alta velocidade. Todas as simulações foram realizadas com um código próprio desenvolvido pelo Grupo de Física da Matéria Condensada (GFMC).

Palavras-chave: skymions; antiferromagnetismo; spintrônica; impurezas.

ABSTRACT

Antiferromagnetic skyrmions are strong candidates for the development of spintronic devices due to the absence of the Skyrmion Hall Effect. These devices can operate based on a binary system formed by traps that control the position of the skyrmion in predefined regions of a nanowire, allowing detection via a magnetic tunnel junction. The binary state is defined by the presence (1) or absence (0) of a skyrmion within the trapping zone, which is delimited by a circular magnetic impurity. Such impurities are modeled through the modification of micromagnetic Hamiltonian parameters: exchange stiffness, saturation magnetization, magnetocrystalline anisotropy, and the Dzyaloshinskii–Moriya interaction constant. Depending on the choice of magnetic parameters, the impurity may exhibit either attractive or repulsive behavior. The positions of skyrmions between traps are manipulated by spin-polarized current. This work provides relevant insights into the efficiency of these traps, considering key factors such as trap size, Hamiltonian parameters, and spin-polarized current. The simulation results were validated using the Thiele equation, showing strong consistency between numerical data and theoretical models. We also evaluated the switching time of a skyrmion moving between two traps, aiming to model the functionality of memory devices. The repositioning time was found to be below 1 ns, highlighting the potential for high-speed operation. All simulations were performed using a custom code developed by Grupo de Física da Matéria Condensada (GFMC).

Keywords: skyrmions; antiferromagnetism; spintronics; impurities.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1	– Representação do efeito de magnetorresistência gigante em uma junção FM/NM/FM.	18
Figura 1.2	– Esquema ilustrativo de um sistema de leitura e gravação baseado em MRG. A cabeça de gravação gera campos magnéticos que modificam a orientação magnética da camada de gravação. A cabeça de leitura MRG detecta as variações de magnetização à medida que a mídia se move sob o cabeçote, protegida lateralmente por uma blindagem magnética.	18
Figura 1.3	– Racetrack Memory proposta por Parkin <i>et al.</i> em 2008. Memória do tipo pista em uma nanofita FM, onde os bits (1 ou 0) são representados pela orientação dos domínios magnéticos. As PDs são movimentadas usando uma corrente elétrica polarizada em spin.	19
Figura 2.1	– Representação do momento magnético orbital gerado pelo movimento de um elétron em torno do núcleo.	22
Figura 2.2	– Representação esquemática da orientação dos momentos magnéticos atômicos em um material diamagnético na ausência e na presença e campo magnético externo.	25
Figura 2.3	– Representação esquemática da orientação dos momentos magnéticos atômicos em um material paramagnético na ausência e na presença e campo magnético externo.	26
Figura 2.4	– Representação dos domínios magnéticos contido em materiais ferromagnéticos. As setas indicam a direção resultante da Magnetização local. Esta configuração não é de mínima energia.	27
Figura 2.5	– Comparação entre o alinhamento dos momentos magnéticos em materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos.	28
Figura 2.6	– Representação esquemática dos primeiros vizinhos participantes da interação de troca. A seta preta indica o spin central, enquanto as setas vermelhas indicam os spins dos vizinhos com os quais ele interage.	29
Figura 2.7	– Representação da interação dipolar entre os momentos ($\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$), distanciados $\vec{r}_{12}$ entre si.	31
Figura 2.8	– Representação da interação dipolar em um ferromagneto. As setas vermelhas representam os momentos magnéticos que interagem com o momento representado pela seta preta.	32
Figura 2.9	– Representação esquemática das Regras de Moriya.	33
Figura 2.10	– Representação esquemática da interação Dzyaloshinskii-Moriya nos casos (a) interfacial e (b) volumétrica. O vetor $\vec{D}$ (seta laranja) representa o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya, que define a direção e o sentido da interação entre os momentos magnéticos $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$ (setas vermelhas).	34

Figura 2.11 – (a) Representação do momento magnético $\vec{\mu}$ precessionando em torno de um campo magnético efetivo. (b) Ilustração das direções dos vetores torque que atuam sobre $\vec{\mu}$, sendo $\vec{T}$ o torque de precessão e $\vec{T}_D$ o torque de amortecimento (<i>damping</i>).	38
Figura 2.12 – Dinâmica da magnetização de um momento magnético sob a ação de um campo magnético efetivo. (a) Dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$), na qual o momento magnético realiza precessão uniforme ao redor do campo. (b) Dinâmica com amortecimento ($\alpha > 0$), resultando em uma precessão amortecida que leva o momento magnético a alinhar-se com o campo ao longo do tempo.	39
Figura 3.1 – Representação gráfica de dois tipos de skyrmions. a) Skyrmion do tipo Bloch: spins rotacionam tangencialmente como espiral helicoidal. b) Skyrmion do tipo Néel: 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.	42
Figura 3.2 – Configurações de spin com diferentes cargas topológicas Q em um corte meridional da esfera unitária, mostrando as configurações de spin. Cada círculo representa uma textura de spin ao longo da borda de uma configuração magnética. Para $Q = 0$, os spins não realizam rotação ao longo do contorno. Para $Q = 1$ e $Q = 2$, os vetores de spin completam uma e duas voltas completas, respectivamente, indicando texturas com carga topológica não nula.	43
Figura 3.3 – Estruturas de skyrmions para diferentes valores de ω e ν . As setas representam os componentes do vetor de spin, enquanto as cores de fundo indicam o componente normal μ_z : tons de vermelho correspondem a $\mu_z = +1$, branco indica $\mu_z = 0$, e tons de azul correspondem a $\mu_z = -1$	45
Figura 3.4 – Influência da carga topológica na trajetória dos skyrmions. Acima: skyrmions com $Q = +1$; abaixo: skyrmions com $Q = -1$. A direção da força de Magnus, que é proporcional à carga topológica, resulta em deflexões opostas para cada caso.	47
Figura 3.5 – Representação de skyrmions FM com cargas topológicas $Q = +1$ e $Q = -1$, e um skyrmion AFM resultante da superposição dessas duas estruturas.	48
Figura 3.6 – Comparação entre a dinâmica de skyrmions ferromagnéticos (à esquerda) e antiferromagnético (à direita) sob a ação de uma corrente de spin. Em sistemas ferromagnéticos, a força de Magnus desvia a trajetória do skyrmion. Já no caso antiferromagnético, as forças de Magnus associadas às duas sub-redes se cancelam, resultando em movimento retilíneo ao longo da direção da corrente.	49

Figura 3.7	– Trajetória retilínea de um skyrmion antiferromagnético (AFM), resultado da ausência do Efeito Hall de Skyrmion (SkHE).	49
Figura 4.1	– Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. (a) Configuração real do sistema, com momentos magnéticos localizados em posições atômicas discretas. (b) Representação contínua obtida a partir da aproximação micromagnética.	53
Figura 4.2	– Configuração inicial gerada pela simulação para (a) a sub-rede a , (b) a sub-rede b e (c) a rede AFM resultante da superposição das duas sub-redes.	57
Figura 4.3	– Representação esquemática da definição do raio do skyrmion r_{sk}	57
Figura 4.4	– Representação da célula cúbica unitária do trifluoreto de potássio manganês ($KMnF_3/Pt$).	58
Figura 4.5	– Representação esquemática da interação entre o sítio 1 (impureza- em vermelho) e os sítios vizinhos 2, 3 e 4 (material anfitrião- em azul). Nesses casos, os parâmetros de interação devem ser calculados a partir das médias definidas pelas Equações 4.27, a fim de representar adequadamente os efeitos interfaciais entre o material anfitrião e a impureza magnética.	60
Figura 5.1	– Energia de interação $U(x)$ em função da posição do centro do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores do raio da impureza r_{imp} , considerando a modificação no parâmetro a) $\lambda_K = 0,70$; b) $\lambda_A = 0,90$; c) $\lambda_D = 1,15$ e d) $\lambda_M = 0,80$	63
Figura 5.2	– Energia de interação $U(x)$ em função da posição do centro do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores do raio da impureza r_{imp} , considerando a modificação no parâmetro a) $\lambda_K = 1,20$; b) $\lambda_A = 1,25$; c) $\lambda_D = 0,70$ e d) $\lambda_M = 1,30$	64
Figura 5.3	– Energia de interação $U(x)$ em função da posição do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores dos parâmetros a) λ_K ; b) λ_A ; c) λ_D e d) λ_M . Em todas as simulações foi adotado $r_{imp} = 11$ nm.	65
Figura 5.4	– Configuração inicial utilizada nas simulações: uma nanofita contendo um skyrmion e uma impureza circular, separados por uma distância de 35 nm entre seus centros.	66
Figura 5.5	– Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde indica o cenário i e o círculo vermelho indica o cenário ii	68
Figura 5.6	– Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_D e (b) λ_A . O triângulo verde representa o cenário i , o círculo vermelho representa o cenário ii e o símbolo X representa o cenário iii	69

Figura 5.7	– Diagramas ilustrando os tipos de cenários que podem ocorrer em função tanto de r_{imp} quanto da densidade de corrente polarizada em spin, para diversos valores de λ_A e λ_D . O triângulo verde representa o cenário i e o círculo vermelho representa o cenário ii	70
Figura 5.8	– Sequência ilustrativa do cenário iv . O skyrmion tem sua trajetória desviada pela impureza, devido à força de repulsão.	71
Figura 5.9	– Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde representa o cenário i , o símbolo X representa o cenário iii e o losango laranja representa o cenário iv	72
Figura 5.10	– Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde representa o cenário i , o símbolo X representa o cenário iii e o losango laranja representa o cenário iv	73
Figura 5.11	– Gráfico da Energia de interação skyrmion-impureza em função da posição do centro do skyrmion. O skyrmion é transportado por cinco diferentes densidades de corrente j_e em direção de uma impureza induzida pela modificação no parâmetro $\lambda_K = 0,90$ e com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$	75
Figura 5.12	– Perfis de energia de interação $U(x)$ obtidos para diferentes modificações nos parâmetros magnéticos: (a) λ_K com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$, (b) λ_M com $r_{imp} = 13 \text{ nm}$, (c) λ_D com $r_{imp} = 9 \text{ nm}$ e (d) λ_A com $r_{imp} = 7 \text{ nm}$. Todas as simulações foram realizadas com densidade de corrente constante $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$	76
Figura 5.13	– Força F_x em função da posição do skyrmion ao longo do eixo x , considerando uma impureza do tipo (a) $\lambda_K = 0,80$ com raio $r_{imp} = 9 \text{ nm}$, e (b) $\lambda_D = 1,05$ com raio $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. A curva $\mathcal{F}_x$ representa dados obtidos por simulações numéricas, enquanto F_x corresponde à solução numérica derivada da equação de Thiele. A região cinza define os limites da impureza no eixo x . . .	78
Figura 5.14	– (a) D_{xx} e (b) v_x em função da posição do skyrmion para uma impureza circular com $\lambda_K = 0,80$ e $r_{imp} = 9 \text{ nm}$; (c) e (d) mostram as mesmas quantidades para $\lambda_D = 1,05$ e $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. A região cinza define os limites da impureza no eixo x	79
Figura 5.15	– Componente da força no eixo x para um caso do cenário ii : o skyrmion é aprisionado no interior da impureza para $\lambda_D = 0,90$ e $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. A trajetória é interrompida devido à força repulsiva predominante. . . .	80
Figura 5.16	– Componentes a) x e b) y da força de interação entre o skyrmion e a impureza.	80

- Figura 5.17 – Raio do skyrmion r_{sk} em função do raio da impureza r_{imp} , considerando diferentes modificações nos parâmetros de interação. Em cada painel, são apresentadas duas curvas correspondentes dois valores do parâmetro: (a) λ_K ; (b) λ_M ; (c) λ_A ; e (d) λ_D 82
- Figura 5.18 – Configuração inicial utilizada nas simulações: duas impurezas circulares separadas por 60 nm (centro a centro). O estado lógico de um bit (0 ou 1) é definido pela presença ou ausência do skyrmion em um desses sítios de impureza. 83
- Figura 5.19 – Tempo de deslocamento de um skyrmion entre impurezas separadas por 60 nm (distância entre centros) em função do raio r_{imp} das impurezas, para diferentes valores de λ_K , λ_D , λ_A e λ_M . O skyrmion é impulsionado por uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12}$ A/m². 84
- Figura 5.20 – Sequência ilustrativa da dinâmica do skyrmion em um dispositivo com duas impurezas com $\lambda_{K=0,80}$ e $r_{imp} = 15$ nm. A maior parte do tempo de deslocamento é consumida na saída do skyrmion da região interna das armadilhas, devido à intensa força atrativa exercida pelas impurezas. 85
- Figura 5.21 – Posição do skyrmion em função do tempo para dois casos: $\lambda_K = 0,80$ e $\lambda_M = 0,95$, ambos com $r_{imp} = 15$ nm. O skyrmion inicia em repouso na posição $x = -30$ nm, dentro de uma impureza, e após 0,2 ns recebe um pulso de corrente $j_e = 2 \times 10^{12}$ A/m², que o leva até a impureza localizada em $x = 30$ nm. O pulso é então desligado, e o skyrmion permanece em repouso por mais 0,2 ns, até que um novo pulso, de mesma magnitude e direção oposta, o retorna à posição inicial. 85
- Figura 5.22 – Perfis de energia de interação $U(x)$ para diferentes combinações de parâmetros magnéticos modificados simultaneamente. (a) Modificação do tipo atrativo-atrativo: combinação dos parâmetros $\lambda_K = 0,80$ e $\lambda_M = 0,85$, resultando em uma interação mais intensa no caso combinado λ_{KM} . (b) Modificação do tipo repulsivo-repulsivo: combinação de $\lambda_K = 1,05$ e $\lambda_M = 1,10$, cuja soma de efeitos também intensifica a repulsão em λ_{KM} . (c) Modificação do tipo atrativo-repulsivo: combinação de $\lambda_K = 1,15$ (atrativo) e $\lambda_D = 1,10$ (repulsivo), representada por λ_{KD} , a qual resulta em uma energia de interação global reduzida. 87

- Figura 5.23 – Sequência ilustrativa da dinâmica do skyrmion para dois casos distintos: À esquerda, observa-se um exemplo do cenário *ii*, correspondente a uma impureza puramente atrativa com $\lambda_D = 1,10$ e raio $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. À direita, um caso do cenário *i* para uma impureza com modificação do tipo atrativo-repulsivo, representada por λ_{DK} , resultante da modificação combinada dos parâmetros $\lambda_D = 1,10$ e $\lambda_K = 1,15$ mantendo-se o mesmo valor de r_{imp} . Em ambas as simulações, foi aplicado uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ 88
- Figura 5.24 – Energia de interação entre o skyrmion e a impureza em função de x . Neste caso, escolhemos $r_{imp} = 15 \text{ nm}$ e a posição inicial em $x = 5 \text{ nm}$. A curva com marcadores circulares corresponde a $\lambda_K = 0,80$ (impureza atrativa), a curva com marcadores quadrados corresponde a $\lambda_D = 0,95$ (impureza repulsiva), e a curva com marcadores triangulares foi obtida por meio da modificação simultânea de ambos os parâmetros, resultando em uma impureza atrativa. 89
- Figura 5.25 – Tempo de deslocamento de um skyrmion entre duas impurezas separadas por 60 nm (distância de centro a centro) em função de r_{imp} . Foi aplicada uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ para mover o skyrmion. As curvas correspondem a diferentes combinações de parâmetros: $\lambda_K = 0,80 + \lambda_D = 0,95$, $\lambda_K = 0,80 + \lambda_M = 1,30$, e $\lambda_K = 0,80 + \lambda_A = 1,02$. 90
- Figura C.1 – Perfis de energia de interação entre um skyrmion e uma impureza para diferentes razões de λ_A , λ_K , λ_M e λ_D de uma material hipotético. Foram observados perfis tanto atrativos quanto repulsivos, consistentes com os resultados apresentados neste trabalho. Todas as simulações foram realizadas com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$ 107

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Valores da temperatura de Curie T_c para diversos materiais ferromagnéticos.	27
Tabela 4.1 – Parâmetros do material utilizados para o cálculo da dinâmica de spins.	59

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	22
2.1	MOMENTO MAGNÉTICO	22
2.2	MATERIAIS MAGNÉTICOS	24
2.2.1	Diamagnetismo	25
2.2.2	Paramagnetismo	25
2.2.3	Ferromagnetismo	26
2.2.4	Antiferromagnetismo	27
2.3	INTERAÇÕES MAGNÉTICAS	28
2.3.1	Interação de troca	28
2.3.2	Interação dipolar	30
2.3.3	Interação Dzyaloshinskii-Moriya	31
2.3.4	Anisotropia	34
2.3.5	A hamiltoniana do sistema e o campo efetivo local	35
2.4	DINÂMICA DE SPINS	36
2.4.1	A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	36
2.4.2	O termo de corrente da equação LLG	40
3	SKYRMIONS	42
3.1	EQUAÇÃO DE THIELE PARA SKYRMIONS	44
3.2	SKYRMION ANTIFERROMAGNÉTICO	47
3.2.1	Equação de Thiele para skyrmions antiferromagnéticos	50
4	METODOLOGIA	52
4.1	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	52
4.1.1	A hamiltoniana micromagnética	53
4.2	CONFIGURAÇÃO INICIAL DO SKYRMION AFM	55
4.3	CALCULO DA POSIÇÃO E DO RAIO DO SKYRMION	56
4.4	A NANOFITA ANTIFERROMAGNÉTICA DE $KMnF_3/Pt$	58
4.5	MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA	59
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	62
5.1	INTERAÇÃO SKYRMION-IMPUREZA	62
5.2	DIAGRAMAS	65
5.2.1	Cenários para interação atrativa	66
5.2.2	Cenários para interação repulsiva	70
5.3	ENERGIA DE INTERAÇÃO SKYRMION-IMPUREZA	74
5.4	ANÁLISE DA FORÇA DE INTERAÇÃO VIA EQUAÇÃO DE THIELE	75

5.5	VARIAÇÃO DO RAO DO SKYRMION INDUZIDA POR IMPUREZAS MAGNÉTICAS	81
5.6	MOVIMENTO ENTRE IMPUREZAS	82
5.7	COMBINAÇÃO	86
6	CONCLUSÃO	91
	REFERÊNCIAS	93
	APÊNDICE A - A Equação Explícita de Landau-Lifshitz-Gilbert	100
	APÊNDICE B - O Termo de Corrente da Equação LLG . . .	102
	APÊNDICE C - Potencial de aplicação da metodologia a múltiplos sistemas materiais	106

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

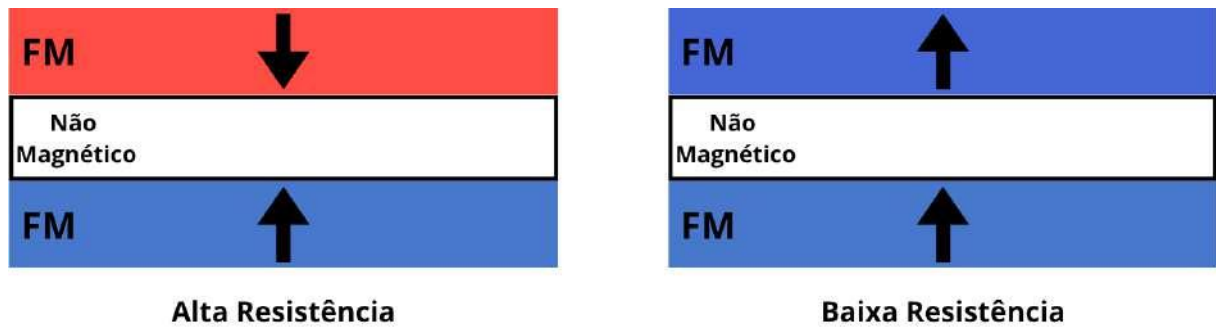
Vivemos em uma era digital, em que grande parte das atividades cotidianas dependem de soluções tecnológicas, como aplicativos móveis, redes sociais e dispositivos inteligentes conectados à Internet das Coisas (IoT), presentes até mesmo em residências. As plataformas digitais processam um volume enorme de dados para oferecer recomendações personalizadas, prevendo tendências de mercado e adaptando-se ao comportamento dos usuários. Ao mesmo tempo, assistimos a avanços impressionantes no desenvolvimento de inteligências artificiais (IA), capazes de gerar textos, imagens e vídeos com alto grau de realismo. Tais inovações só se tornam viáveis graças ao progresso contínuo das tecnologias de armazenamento e processamento de dados, sustentadas pelos avanços científicos no campo do nanomagnetismo.

O nanomagnetismo é a área da física que estuda as propriedades magnéticas de materiais, cujas dimensões se encontram na escala nanométrica, como nanopartículas, filmes finos, nanofios, entre outros. Um nanômetro — anteriormente chamado de milimícron — corresponde a $1 \times 10^{-9} \text{ m}$. O estudo das propriedades magnéticas encontra-se amplamente inserido em diversas áreas^{1,2}. Porém, do ponto de vista de aplicações, a spintrônica é uma das áreas mais relevantes.

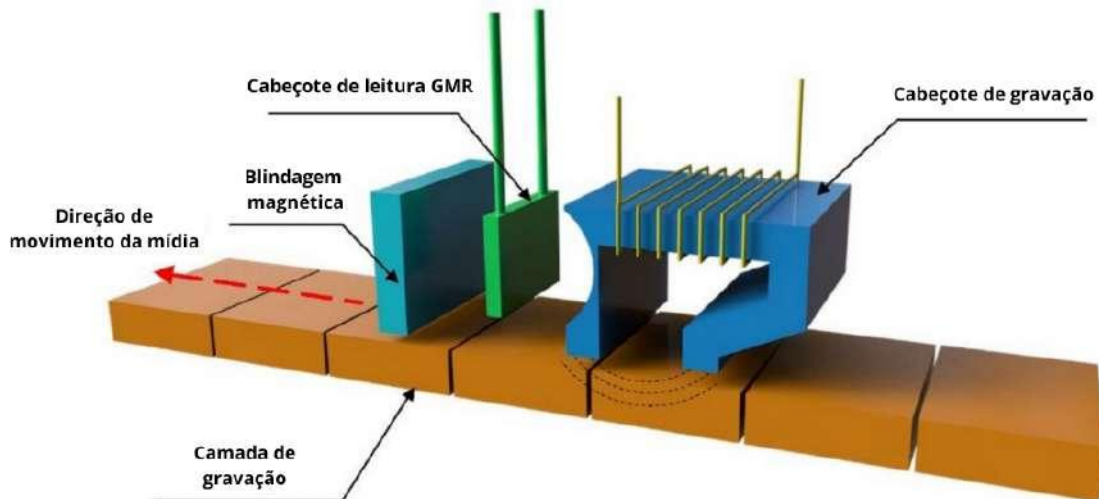
A spintrônica é baseada na utilização do grau de liberdade do spin dos elétrons, em conjunto com sua carga, para gerar, manipular e detectar correntes de spin, o que possibilita o desenvolvimento de novas tecnologias para processamento de informações. A spintrônica ganhou força após Albert Fert e Peter Grünberg descobrirem o fenômeno da magnetorresistência gigante (MRG) em um sistema de multicamadas de materiais ferromagnéticos (FM) e não magnéticos (NM), especificamente Fe/Cr/Fe³. Nesse arranjo, constituído por camadas alternadas de materiais magnéticos e não magnéticos, a resistência elétrica sofre uma redução significativa quando as magnetizações das camadas estão alinhadas paralelamente ao campo externo⁴, conforme ilustrado na Figura 1.1.

A descoberta da MRG evidenciou que o spin do elétron, além da carga elétrica, poderia ser manipulado e explorado tecnologicamente. Uma implicação direta do uso da MRG foi realizada em 1997 pela IBM ao produzir discos rígidos ou, como são conhecidos, HDDs (do inglês, Hard Disk Drive), com cabeças de leitura MRG (Figura 1.2), o que possibilitou um salto expressivo na densidade de dados e na eficiência do armazenamento digital.

Os HDDs ainda são amplamente utilizados devido a seu baixo custo, grande capacidade de armazenamento e confiabilidade. Porém, essas estruturas apresentam

Figura 1.1 – Representação do efeito de magnetorresistência gigante em uma junção FM/NM/FM.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

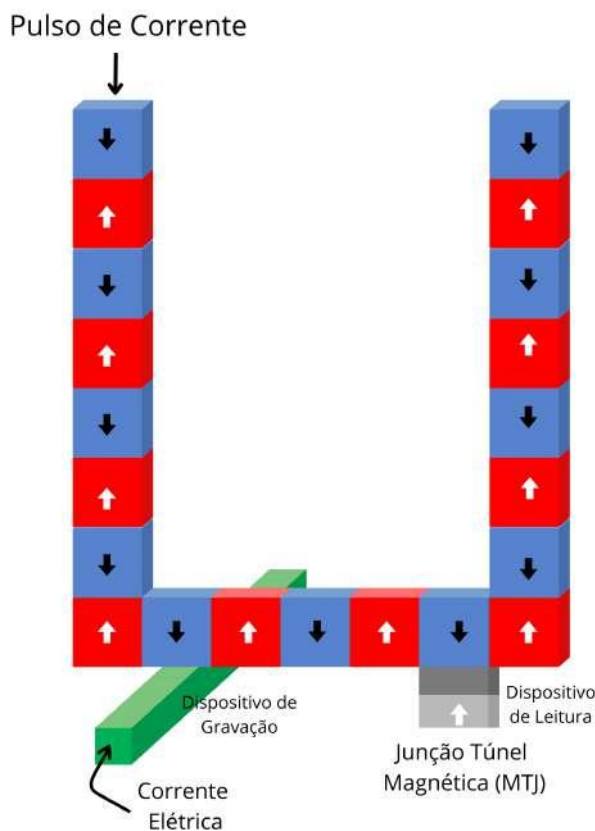
Figura 1.2 – Esquema ilustrativo de um sistema de leitura e gravação baseado em MRG. A cabeça de gravação gera campos magnéticos que modificam a orientação magnética da camada de gravação. A cabeça de leitura MRG detecta as variações de magnetização à medida que a mídia se move sob o cabeçote, protegida lateralmente por uma blindagem magnética.

Fonte: Adaptado de Kim *et al.* (2021)⁵, sob licença CC BY 4.0.

limitações associadas ao consumo de energia resultante do movimento mecânico do disco magnetizado e à velocidade de leitura/escrita⁶. Desta forma, cresceu o interesse por novos métodos de gravação magnética que venham superar os HDDs tanto em eficiência quanto em desempenho, impulsionando as investigações sobre estruturas magnéticas em nanoescala.

Nesse contexto, em 2008, S.S. Parkin *et al.* propuseram uma memória magnética conhecida como *magnetic domain-wall racetrack memory*⁷ (Figura 1.3) baseada na movimentação de paredes de domínio (PD) — uma das primeiras propostas de dispositivo que explorava o uso de texturas magnéticas para codificação e manipulação de bits. Essa arquitetura consiste em um conjunto de nanofios de material ferromagnético, em que os domínios magnéticos presentes ao longo da fita são utilizados para armazenar um bit de informação de acordo com sua orientação magnética. As PDs presentes nos limites entre

Figura 1.3 – Racetrack Memory proposta por Parkin *et al.* em 2008. Memória do tipo pista em uma nanofita FM, onde os bits (1 ou 0) são representados pela orientação dos domínios magnéticos. As PDs são movimentadas usando uma corrente elétrica polarizada em spin.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

domínios antiparalelos são movimentadas via corrente elétrica polarizada em spin.

Inspirados pela mesma lógica de manipulação de texturas magnéticas, algumas outras texturas magnéticas surgiram como alternativa às PDs, e dentre elas, destacam-se os skyrmions magnéticos. Skyrmions magnéticos são estruturas topologicamente protegidas, propostas inicialmente por Bogdanov e Ivanov^{8,9,10} ao final da década de 1980. A primeira evidência experimental direta foi relatada por S. Mühlbauer *et al.* somente em 2009. Usando espalhamento de nêutrons, eles observaram a formação espontânea de uma rede bidimensional de skyrmions em *MnSi*¹¹. Pouco mais tarde, em um trabalho intitulado “*Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions*”, Niklas Romming *et al.*¹² relataram a possibilidade de criação e deleção de skyrmions individuais em filmes finos com precisão usando correntes de tunelamento polarizadas em spin.

Os skyrmions magnéticos se comportam como quasi-partículas e podem se mover no espaço sem alterar sua estrutura interna¹³. Atualmente, as investigações sobre a dinâmica dos skyrmions vêm se intensificando, com destaque para dois mecanismos principais de acionamento: o torque de transferência de spin (STT)¹⁴, onde elétrons de condução spin-polarizados transferem momento angular para a textura magnética, modificando a

magnetização local^{15,16}, e o torque de spin-órbita (SOT), gerado pela injeção de corrente em metais pesados acoplados a camadas ferromagnéticas, via o efeito Hall de spin¹⁷.

Outra característica notável dos skyrmions é que eles podem ser movimentados com densidades de corrente muito inferiores às necessárias para deslocar outras texturas magnéticas, como as PDs^{18,19}. Nos sistemas ferromagnéticos, sua dinâmica sob a ação de correntes elétricas é marcada pela presença do chamado Efeito Hall de Skyrmion (Skyrmion Hall Effect – SkHE)^{20,21}, que se manifesta como uma deflexão transversal em relação à direção da corrente aplicada. Esta deflexão é análoga ao Efeito Hall convencional, porém sua origem está em sua estrutura magnética topologicamente não trivial e na força de Magnus que atua sobre o skyrmion¹⁹. A presença do SkHE representa um grande desafio para aplicações reais, pois, além da exigência de um movimento retilíneo dos skyrmions magnéticos ao longo da direção da corrente aplicada, tal deflexão pode causar a aniquilação do skyrmion na borda do nanofio.

Desta forma, sob a perspectiva de aplicações na área da spintrônica, algumas abordagens foram sugeridas para mitigar os efeitos indesejáveis causados pelo SkHE. Entre elas, destaca-se o uso de skyrmions em materiais antiferromagnéticos (AFM). Pesquisas demonstraram que o SkHE é suprimido em skyrmions AFM^{22,23,24,25}, permitindo o deslocamento retilíneo ao longo da direção da corrente aplicada. Além disso, a estrutura dos materiais AFMs apresenta campos dipolares praticamente nulos, que facilitam tanto a nucleação de skyrmions ultrapequenos quanto sua estabilidade sem a presença de campos externos¹³.

Diversos estudos estão propondo novos dispositivos baseados em skyrmions AFM devido a estas características altamente desejáveis para aplicações tecnológicas. Neste trabalho exploraremos uma estratégia que consiste na utilização de armadilhas magnéticas para controlar a posição dos skyrmions em regiões específicas da nanofita, cuja leitura pode ser realizada por meio de junções túnel magnéticas (MTJs)^{26,27}. A presença ou ausência de um skyrmion nessas regiões permite codificar informações binárias. Neste caso específico, as armadilhas são implementadas por alterações locais em propriedades magnéticas do material, como anisotropia, magnetização de saturação ou constante de Dzyaloshinskii–Moriya, tornando a região atrativa ou repulsiva ao skyrmion^{28,29,30}. Tais modificações funcionam como impurezas magnéticas controladas, abrindo novos caminhos para o desenvolvimento de dispositivos de memória baseados em skyrmions³¹.

Esta tese está estruturada da seguinte maneira: no Capítulo 2, é apresentada uma breve revisão sobre os principais conceitos relacionados a materiais magnéticos, seguida pela introdução das interações magnéticas fundamentais do sistema estudado. Na sequência, são apresentadas a hamiltoniana do sistema AFM e a equação Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) utilizada nas simulações para o cálculo da dinâmica de magnetização.

O Capítulo 3 trata das principais características dos skyrmions magnéticos, com

ênfase na definição dos skyrmions AFM. Também são discutidas a equação de Thiele e as adaptações necessárias para descrever a dinâmica dos skyrmions no contexto antiferromagnético.

O Capítulo 4 é dedicado à descrição da metodologia utilizada nas simulações micromagnéticas da dinâmica dos skyrmions AFM. São apresentadas a Hamiltoniana micromagnética adotada, a configuração inicial do skyrmion, o cálculo de suas propriedades geométricas (posição e raio), bem como os parâmetros físicos da nanofita antiferromagnética baseada no sistema $KMnF_3/Pt$. Além disso, é discutido o modelo de impureza magnética, responsável pela criação das armadilhas locais utilizadas para controlar a posição dos skyrmions.

No capítulo 5, são expostos todos os resultados obtidos neste trabalho, desde o estudo inicial da interação do skyrmion AFM e uma impureza magnética, até a análise do tempo de deslocamento entre impurezas, com vistas à proposição de um modelo de dispositivo baseado na posição do skyrmion AFM. Por fim, no capítulo 6, são apresentadas as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Em nível atômico, os materiais apresentam momentos magnéticos originados principalmente da estrutura eletrônica de seus átomos. Do ponto de vista clássico, tais momentos emergem de dois componentes fundamentais: o momento angular orbital e o momento angular de spin dos elétrons. O momento magnético total, representado por $\vec{\mu}$, corresponde à soma vetorial dessas contribuições e pode interagir tanto com campos magnéticos externos quanto com outros momentos magnéticos no material.

2.1 MOMENTO MAGNÉTICO

Considere um elétron que se move uniformemente em uma órbita circular com velocidade escalar v . Tal movimento orbital ocorre de forma rápida, por isso podemos tratá-lo como uma corrente estacionária, cujo valor é dado por:

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

onde e é a carga do elétron e $T = \frac{2\pi r}{v}$ é o período da órbita circular de raio r . Esta corrente circular produzirá um campo magnético $\vec{B}$ equivalente a um campo gerado por um dipolo magnético localizado no centro da órbita. O módulo do momento de dipolo magnético orbital associado a esse movimento é dado por

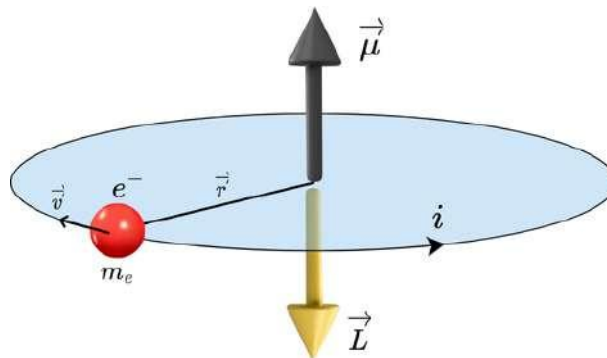
$$\mu_l = iA = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2}, \quad (2.2)$$

considerando $A = \pi r^2$ a área delimitada pela órbita (veja Figura 2.1).

O momento angular orbital do elétron é definido pelo produto vetorial

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (2.3)$$

Figura 2.1 – Representação do momento magnético orbital gerado pelo movimento de um elétron em torno do núcleo.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

onde $\vec{r}$ é o vetor posição e $\vec{p} = m_e \vec{v}$ é o momento linear do elétron de massa m_e . Como $\vec{r}$ e $\vec{p}$ são perpendiculares no movimento circular uniforme, o módulo do momento angular $\vec{L}$ é dado por:

$$L = rp = rmv. \quad (2.4)$$

Relacionando as equações 2.2 e 2.4, pode-se escrever a expressão vetorial para o momento de dipolo magnético orbital:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad (2.5)$$

verificando que $\vec{\mu}_l$ e $\vec{L}$ são antiparalelos, devido ao sinal negativo da carga do elétron.

Outra relação entre μ_l e $\vec{L}$ pode ser obtida dividindo as expressões 2.2 e 2.4:

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{evr}{2mvr} = \frac{e}{2m}. \quad (2.6)$$

Conhecendo a constante magnéton de Bohr expressa por $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m}$, a relação entre os módulos de μ_l e L pode ser reescrita como uma combinação de constantes universais:

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{g_l \mu_b}{\hbar}, \quad (2.7)$$

onde $g_l = 1$ é o fator de Landé orbital e $\hbar$ é a constante reduzida de Planck. Desta maneira, podemos reformular a equação vetorial 2.5 como:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \vec{L} \quad (2.8)$$

estabelecendo um vínculo entre o momento angular orbital e o momento de dipolo magnético associado ao movimento do elétron.

Com base no experimento de Stern-Gerlach realizado em 1922, observou-se que o elétron possui um momento angular intrínseco, denominado Spin $\vec{S}$. De forma análoga à definição dada pela equação 2.5, é possível estabelecer a relação entre o momento de dipolo magnético de spin e o momento angular de spin³², conforme a equação abaixo:

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

sendo $g_s = 1$ o fator de Landé do spin e γ a razão giromagnética.

Para um átomo em um estado quântico arbitrário, define-se o vetor momento angular total como:

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

o qual considera as contribuições do momento angular orbital $\vec{L}$ e do momento angular de spin $\vec{S}$. Devido à interação spin-órbita, $\vec{L}$ e $\vec{S}$ precessionam em torno de sua soma, de modo que o momento angular total $\vec{J}$ obedece à lei de conservação do momento angular³².

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

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

2.2 MATERIAIS MAGNÉTICOS

Uma vez definido o momento de dipolo magnético, é fundamental entender como tais momentos se comportam no interior de um material. Dizemos que um material está magnetizado quando apresenta uma magnetização $\vec{M}$, isto é, quando os n momentos magnéticos $\vec{\mu}$ contidos em um material qualquer, de volume V , produzem uma magnetização resultante por unidade de volume:

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

com unidade no sistema internacional (SI) dada por A/m . Esta magnetização pode ser espontânea ou induzida pela aplicação de um campo magnético externo $\vec{H}$.

Cada um dos momentos magnéticos presentes no material produz um campo induzido $\vec{B}$ proporcional ao módulo de $\vec{\mu}_n$. Independente da resposta do material ao campo $\vec{H}$ aplicado, podemos estabelecer uma relação fundamental entre $\vec{B}$, $\vec{H}$ e $\vec{M}$, a partir da Lei de Ampère-Maxwell para o campo $\vec{H}$ ³³:

$$\vec{H} \equiv \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}, \quad (2.13)$$

ou melhor,

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.14)$$

sendo μ_0 a permeabilidade magnética do vácuo. Esta equação nos mostra que o campo magnético total em um material é dado tanto pela contribuição de fontes externas quanto pela magnetização do material.

Materiais magnéticos lineares, homogêneos e isotrópicos obedecem à seguinte relação:

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}, \quad (2.15)$$

sendo χ_m a susceptibilidade magnética — grandeza sem dimensão que varia de uma substância para outra³³. Assim, podemos reescrever a equação 2.14 na forma:

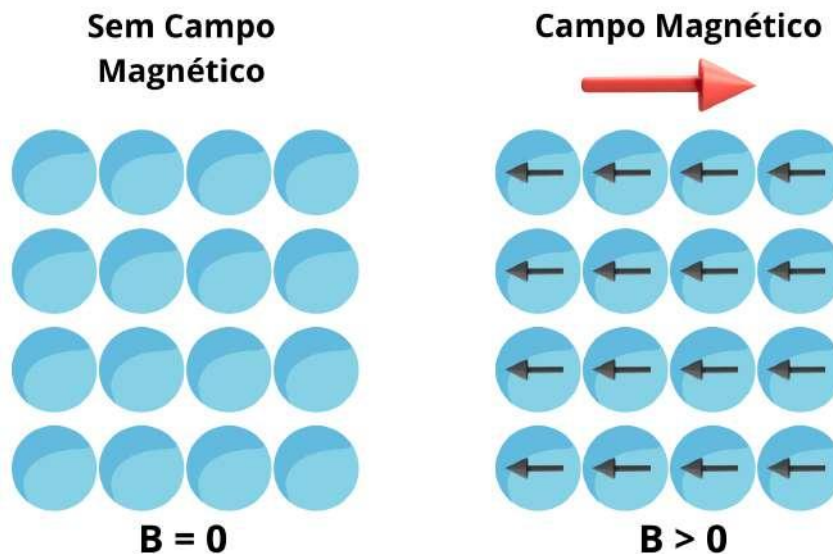
$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi_m)\vec{H} = \mu\vec{H}, \quad (2.16)$$

onde μ é definido como a permeabilidade magnética do meio, dada por:

$$\mu \equiv \mu_0(1 + \chi_m). \quad (2.17)$$

Na presença de um campo magnético, os momentos magnéticos $\vec{\mu}$ realizam um movimento de precessão ao redor da direção deste campo, em um fenômeno conhecido como a precessão de Larmor. No entanto, podemos obter distintas respostas ao campo magnético aplicado de acordo com propriedades específicas do material. As diferentes respostas classificam os materiais magnéticos dos quais falaremos a seguir.

Figura 2.2 – Representação esquemática da orientação dos momentos magnéticos atômicos em um material diamagnético na ausência e na presença de campo magnético externo.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

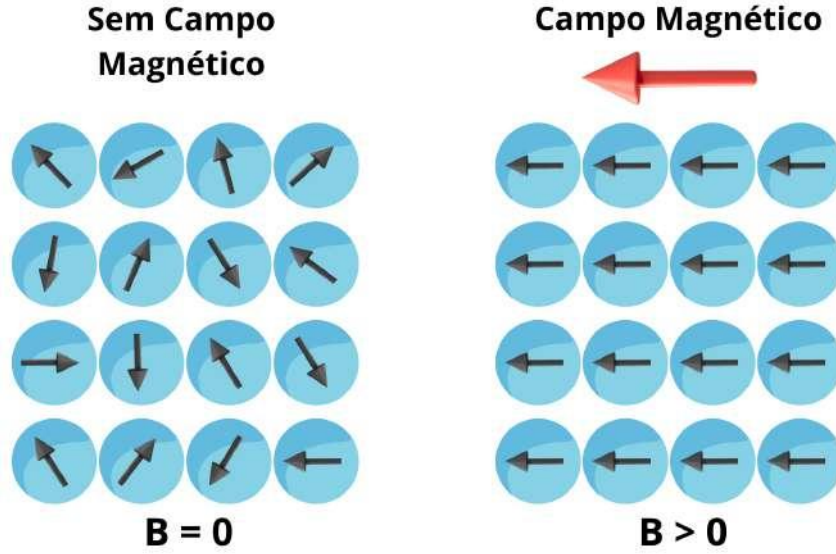
2.2.1 Diamagnetismo

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 fenômeno ocorre devido à interação entre o campo magnético aplicado e o movimento orbital dos elétrons ao redor dos átomos (precessão de Larmor). Tal precessão induz um momento magnético que, segundo a Lei de Lenz, se opõe ao campo magnético aplicado³⁴ (veja a Figura 2.2). Para esses materiais, a susceptibilidade magnética χ_m é pequena e negativa — na ordem de 10^{-5} . Alguns exemplos destes materiais são: prata, mercúrio, diamante, água e chumbo.

2.2.2 Paramagnetismo

Apesar do diamagnetismo estar presente em todos os materiais, outro fenômeno mais forte pode mascará-lo. O paramagnetismo ocorre em materiais que possuem átomos com elétrons desemparelhados, isto é, possui momento magnético permanente. 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 $\vec{B}_{ext}$ (veja a Figura 2.3) fazendo com que o campo total $\vec{B}$, no interior do material, aumente. A susceptibilidade magnética χ_m dos paramagnetos é positiva e pequena, cujo inverso varia linearmente com a temperatura, conforme descrito pela Lei de Curie³⁵. A diminuição da susceptibilidade pelo aumento da temperatura é devida ao aumento da energia térmica em relação à energia

Figura 2.3 – Representação esquemática da orientação dos momentos magnéticos atômicos em um material paramagnético na ausência e na presença de campo magnético externo.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

de alinhamento dos momentos magnéticos atômicos sob a influência do campo externo, levando ao desordenamento dos momentos magnéticos³⁵.

Exemplos de materiais paramagnéticos são: platina, magnésio, oxigênio (na forma líquida), urânio e alumínio.

2.2.3 Ferromagnetismo

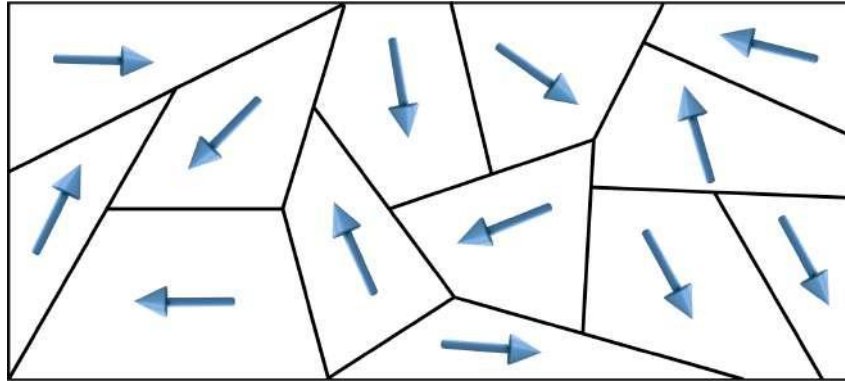
Materiais ferromagnéticos são caracterizados por apresentarem magnetização espontânea, ou seja, ao contrário dos materiais paramagnéticos, eles possuem uma magnetização mesmo na ausência de um campo magnético externo. Tal magnetização espontânea é resultado do alinhamento ordenado dos momentos magnéticos localizados em uma rede atômica³⁴.

Materiais ferromagnéticos apresentam pequenas regiões, as quais chamamos de domínios magnéticos, onde os momentos magnéticos dos átomos estão alinhados na mesma direção, como representado na Figura 2.4. Neste caso, a formação destes domínios magnéticos é uma consequência da competição entre duas interações magnéticas fundamentais: a interação de troca, que favorece o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos, e a interação dipolar, que busca minimizar a energia magnética do sistema — falaremos mais detalhadamente dessas interações. Estas pequenas regiões com magnetização local contribuem para que o material possua magnetização total $\vec{M}_{tot}$ diferente de zero,

$$\vec{M}_{tot} = \sum_i \vec{M}_i \neq 0, \quad (2.18)$$

mesmo na ausência de um campo magnético externo.

Figura 2.4 – Representação dos domínios magnéticos contido em materiais ferromagnéticos. As setas indicam a direção resultante da Magnetização local. Esta configuração não é de mínima energia.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Quando aplicado um campo externo, os materiais ferromagnéticos respondem de maneira semelhante aos materiais paramagnéticos, alinhando seus momentos magnéticos na direção do campo. Porém, devido à sua alta susceptibilidade magnética ($\chi_m \gg 1$), eles atuam de forma mais eficiente, gerando campos magnéticos de maiores intensidades. Alguns exemplos clássicos de ferromagnetos são: cobalto, níquel, ferro e gadolínio.

Materiais ferromagnéticos podem apresentar mudanças em sua magnetização conforme a temperatura. Abaixo de uma temperatura crítica, conhecida como Temperatura de Curie T_c , esses materiais exibem magnetização espontânea. No entanto, para temperaturas acima de T_c ($T > T_c$), a magnetização espontânea é suprimida, uma vez que a energia térmica é suficientemente grande para superar a interação de troca. A Tabela 2.1 apresenta valores experimentais de T_c para alguns materiais ferromagnéticos.

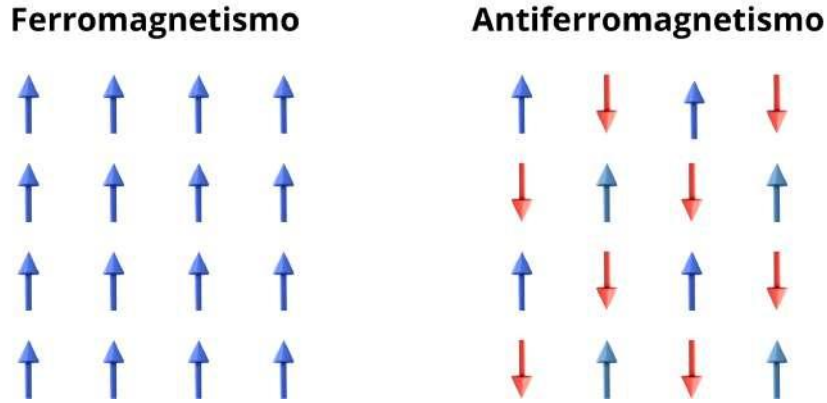
Material	$T_c(K)$
Fe	1043
Co	1388
Ni	627,2
Gd	292,5
CrO ₂	386,5
CrBr ₃	32,56
EuS	16,50

Tabela 2.1 – Valores da temperatura de Curie T_c para diversos materiais ferromagnéticos³⁶

2.2.4 Antiferromagnetismo

Em materiais antiferromagnéticos (AFM), como ilustrado na Figura 2.5, os momentos magnéticos se organizam de maneira antiparalela, em contraste com o alinhamento

Figura 2.5 – Comparação entre o alinhamento dos momentos magnéticos em materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

paralelo observado nos materiais ferromagnéticos. Este comportamento é resultado de uma interação de troca negativa, que tende a alinhá-los de maneira antiparalela.

Podemos descrever os antiferromagnetos como duas sub-redes magnéticas interpenetrantes idênticas, aqui denominadas de a e b , de tal forma que:

$$\vec{M}_a = -\vec{M}_b, \quad (2.19)$$

ou seja, ambas possuem magnetizações de mesma magnitude, mas com direções opostas.

Embora cada sub-rede possua magnetização espontânea líquida,

$$|\vec{M}_a| = |\vec{M}_b| \neq 0, \quad (2.20)$$

a soma vetorial das magnetizações das sub-redes resulta em uma magnetização total:

$$\vec{M}_{tot} = \sum_a \vec{M}_a + \sum_b \vec{M}_b = 0. \quad (2.21)$$

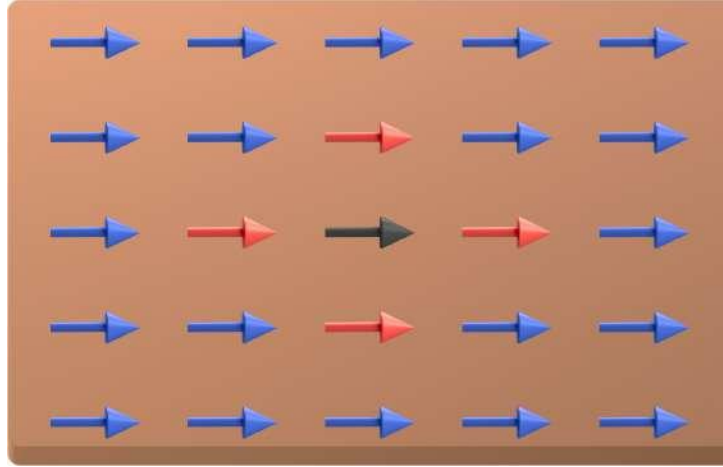
Desta forma, materiais antiferromagnéticos não apresentam magnetização espontânea líquida, comportando-se, sob a ação de campos externos, semelhantemente a materiais paramagnéticos³⁷.

2.3 INTERAÇÕES MAGNÉTICAS

2.3.1 Interação de troca

Em 1928, Werner Heisenberg³⁸ apresentou uma teoria fundamental para o magnetismo, que descreve a interação de troca entre os momentos magnéticos, sendo responsável pela origem do campo efetivo dos materiais magnéticos. De natureza quântica, a interação de troca resulta da combinação da repulsão coulombiana entre dois elétrons próximos

Figura 2.6 – Representação esquemática dos primeiros vizinhos participantes da interação de troca. A seta preta indica o spin central, enquanto as setas vermelhas indicam os spins dos vizinhos com os quais ele interage.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

(vizinhos), e do princípio de exclusão de Pauli, que proíbe dois elétrons de ocuparem o mesmo estado quântico³⁴.

No modelo clássico de Heisenberg, a energia de interação entre N elétrons com spins $\vec{S}_i$ é expressa por

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.22)$$

onde J_{ij} é a integral de troca, associada à superposição das funções espaciais dos íons i e j , sendo significativa somente para pares de íons muito próximos³⁹. 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). Utilizamos a notação $\langle i, j \rangle$, especificando que a soma é realizada somente sobre os primeiros vizinhos.

A interação de troca é caracterizada como uma interação de curto alcance, onde as interações fora dos primeiros vizinhos são desprezíveis (esta representação é ilustrada pela Figura 2.6). A razão deste curto alcance se dá na definição da constante J_{ij} , que está diretamente relacionada às integrais sobre as funções de onda, levando em consideração o efeito de superposição⁴⁰. À medida que a distância entre os sítios aumenta, essas integrais decaem de forma rápida, resultando em uma interação desprezível para sítios mais distantes. Desta forma, uma aproximação pode ser feita:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos,} \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.23)$$

Logo, para um material homogêneo, a equação 2.22 pode ser reescrita:

$$U = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i,j}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.24)$$

A partir das equações 2.9 e 2.11, que estabelecem a relação entre o momento magnético com o momento angular de spin, pode-se expressar a energia da interação de troca em função dos momentos magnéticos na forma:

$$U = -\frac{J}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j. \quad (2.25)$$

A equação da energia da interação de troca apresentada anteriormente pode assumir valores positivos e negativos, dependendo do sinal da constante J . Assim, temos:

- Se $\mathbf{J} > 0$, a configuração de mínima energia ocorre quando os momentos magnéticos alinham-se paralelamente, resultando em uma magnetização $\vec{M} \neq 0$ mesmo sem a presença de campo externo, característica dos materiais **ferromagnéticos**.
- Se $\mathbf{J} < 0$, a configuração de mínima energia ocorre quando os momentos magnéticos alinham-se antiparalelamente entre si, formando duas sub-redes magnéticas opostas. A magnetização líquida do sistema é nula ($\vec{M} = 0$), caracterizando o acoplamento **antiferromagnético**.

2.3.2 Interação dipolar

Considere um dipolo magnético $\vec{\mu}_j$ localizado em uma posição arbitrária $\vec{r}_j$. Este dipolo produz um campo magnético no ponto $\vec{r}_i$ descrito pela expressão:

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

onde

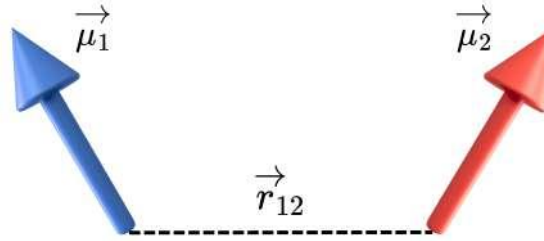
$$\hat{r}_{ij} = \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}. \quad (2.27)$$

Neste cenário, o momento magnético $\vec{\mu}_i$ da rede localizado em $\vec{r}_i$, interage com o campo $\vec{B}_j$ produzido por $\vec{\mu}_j$ (ver figura 2.7). A energia de interação dipolar entre os dois momentos magnéticos é dada por:

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

Pela expressão do campo produzido por um dipolo (eq. 2.26), podemos escrever:

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

Figura 2.7 – Representação da interação dipolar entre os momentos ($\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$), distanciados $\vec{r}_{12}$ entre si.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

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

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

Da mesma forma, 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 a dupla contagem das interações.

A interação dipolar é uma interação de longo alcance, que decai com r_{ij}^3 . Sendo assim, todos os momentos magnéticos do material interagem entre si, conforme ilustrado na Figura 2.8.

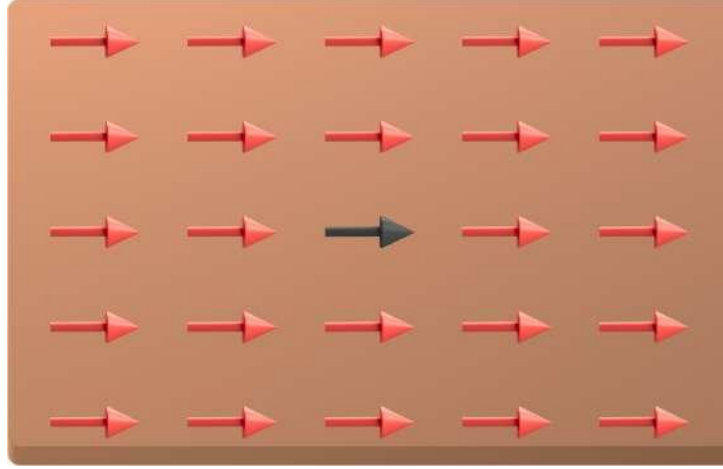
Ao analisarmos a equação 2.31, e considerando que suas constantes são positivas, podemos observar dois efeitos distintos. O primeiro termo, $\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i$, tende a alinhar os momentos magnéticos antiparalelamente, a fim de que a energia associada seja mínima. Já o segundo termo, $-3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)$, promove o alinhamento dos momentos $\vec{\mu}_i$ e $\vec{\mu}_j$ ao longo da direção que os une ($\hat{r}_{ij}$).

2.3.3 Interação Dzyaloshinskii-Moriya

A interação de Dzyaloshinskii-Moriya (IDM) é uma interação de troca antissimétrica entre spins prevista por Igor Dzyaloshinskii⁴¹ e formalizada por Tôru Moriya⁴², a fim de explicar o fenômeno do ferromagnetismo fraco. Diferente da interação de troca de Heisenberg, a IDM provoca uma magnetização não uniforme em materiais que possuem quebra de simetria de inversão — pela falta de um centro de inversão de rede ou pela presença de superfícies ou interfaces — e em materiais com forte acoplamento spin-órbita⁴³.

Em 1958, Dzyaloshinskii observou que alguns materiais antiferromagnéticos, como o Fe_2O_3 , apresentavam o fenômeno do ferromagnetismo fraco, incompatível com o modelo

Figura 2.8 – Representação da interação dipolar em um ferromagneto. As setas vermelhas representam os momentos magnéticos que interagem com o momento representado pela seta preta.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

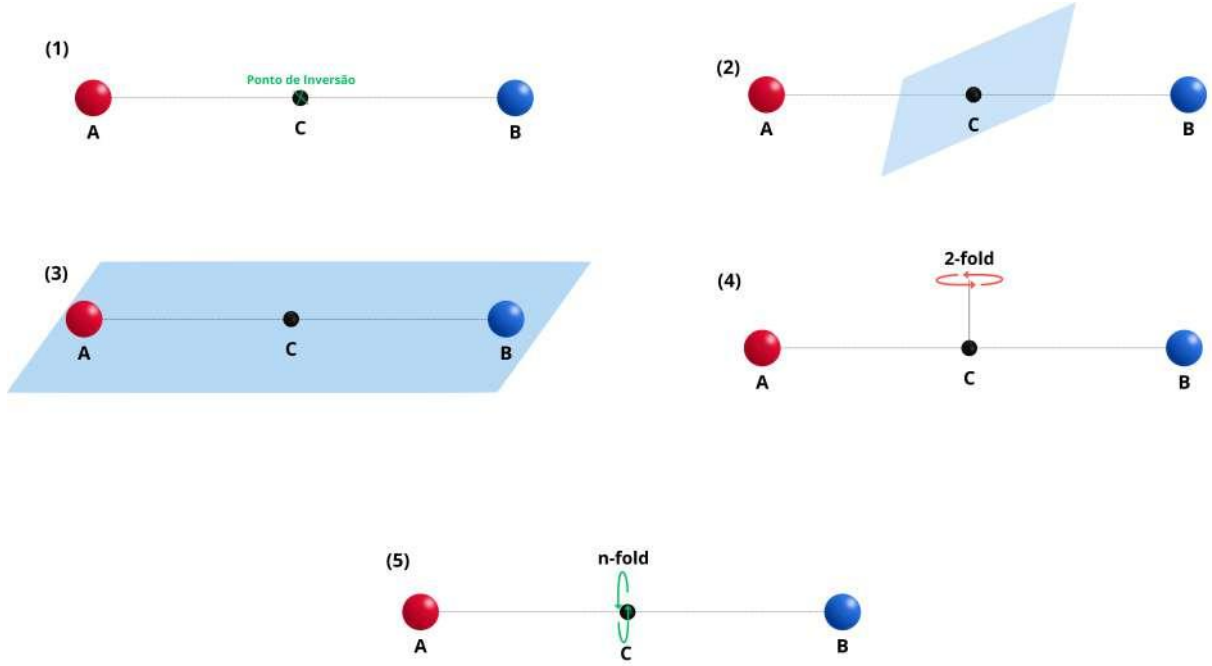
antiferromagnético convencional⁴¹. Embora não tenha determinado sua origem, propôs uma explicação baseada em considerações de simetria. Já em 1960, Moriya, ao estudar o mesmo efeito, utilizou a teoria de perturbação para investigar as contribuições de ordem superior do acoplamento spin-órbita⁴². A expressão da energia associada à IDM é dada por:

$$U^{IDM} = -\vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j), \quad (2.32)$$

sendo $\vec{D}_{ij}$ o vetor de Dzyaloshinskii, que é um vetor de acoplamento constante dependente da estrutura cristalina e da direção entre os sítios i e j . Note que a presença do produto vetorial implica na mudança de sinal de U^{IDM} quando μ_i e μ_j são trocados. Esta propriedade fundamental é responsável por diversas consequências físicas da IDM em sistemas magnéticos⁴⁴.

A estrutura cristalina do material coloca restrições no vetor de Dzyaloshinskii $\vec{D}_{ij}$. Desta forma, Moriya propôs em seu trabalho⁴² cinco critérios para a direção deste vetor, conhecidos como regras de Moriya. Considerando dois momentos magnéticos localizados nos pontos A e B , com o ponto médio C entre eles, as regras de Moriya são (Figura 2.9):

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.

Figura 2.9 – Representação esquemática das Regras de Moriya.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

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 energia da IDM total para um material com N sítios pode ser expressa na forma:

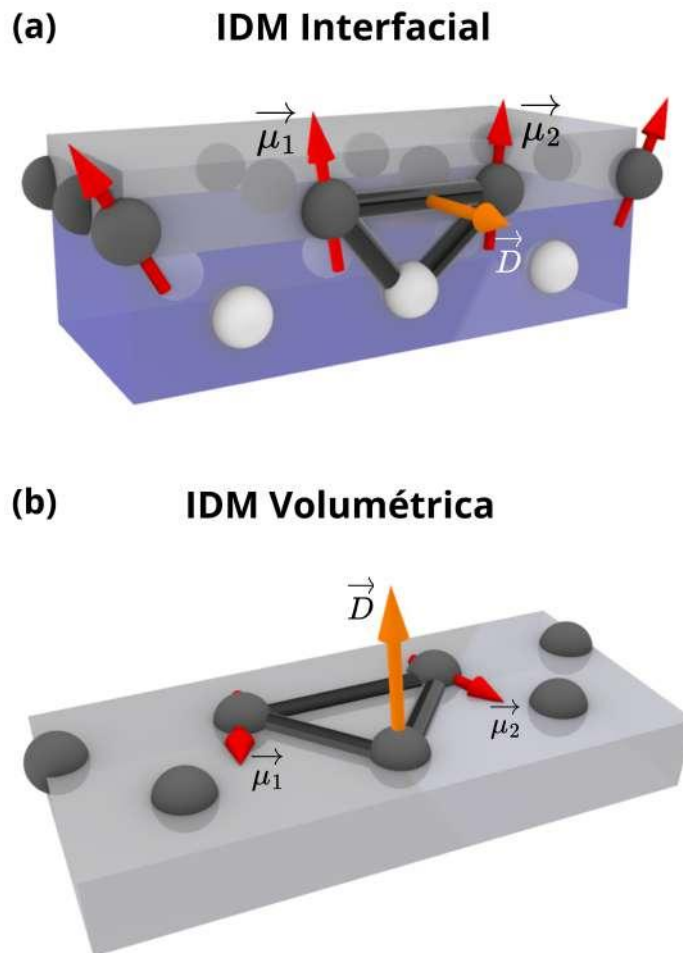
$$U^{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j), \quad (2.33)$$

onde o termo $1/2$ foi adicionado para evitar a dupla contagem e o índice $\langle i, j \rangle$, como anteriormente, 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° . Com isto, a IDM 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 IDM e a interação de troca, tem-se a formação de texturas magnéticas rotacionais de quiralidade definida⁴³, como os skyrmions — estruturas magnéticas que constituem o foco deste trabalho.

A IDM pode ser classificada em dois tipos: interfacial ou *bulk*, também conhecida como volumétrica. A IDM *bulk* surge do acoplamento spin-órbita em materiais intrinsecamente não centrossimétricos, como o $MnSi$ e $FeGe$ ^{45,46} (veja Figura 2.10.b). Já a IDM interfacial ocorre em heteroestruturas onde a simetria de inversão é quebrada pela presença de uma interface, como no caso clássico Co/Pt (Figura 2.10.a)⁴⁵.

Em cada um desses contextos, o vetor $\vec{D}_{ij}$ assume direções determinadas pela simetria local, o que pode resultar na estabilização de diferentes estruturas magnéticas,

Figura 2.10 – Representação esquemática da interação Dzyaloshinskii-Moriya nos casos (a) interfacial e (b) volumétrica. O vetor $\vec{D}$ (seta laranja) representa o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya, que define a direção e o sentido da interação entre os momentos magnéticos $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$ (setas vermelhas).



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

como skyrmions do tipo Bloch ou Néel. Esta relação será aprofundada na seção dedicada aos skyrmions.

2.3.4 Anisotropia

Um material é dito anisotrópico quando suas propriedades físicas variam com a direção em que são observadas. No contexto do magnetismo, a anisotropia magnética determina uma direção preferencial para o alinhamento da magnetização espontânea, a fim de minimizar a energia da interação de troca. A equação 2.25 representa uma energia de troca de um modelo isotrópico. Desde que os momentos magnéticos estejam alinhados entre si, qualquer direção da magnetização poderia levar a um estado de mínima energia. No entanto, este modelo não considera os efeitos da estrutura cristalina, que adicionam direções preferenciais aos momentos magnéticos.

Para cada material, existe uma direção preferida para os momentos magnéticos, conhecida como direção de fácil magnetização, ou eixo fácil³⁵. Materiais magnéticos duros, cuja magnetização $\vec{M} \neq 0$, mesmo sem a presença de um campo magnético externo, são caracterizados por uma forte anisotropia de eixo fácil. Já para materiais magnéticos macios, a anisotropia é próxima de zero.

A orientação preferencial da magnetização depende de diversos fatores, como a simetria do cristal, a distribuição eletrônica e até a forma do corpo magnético. Dos muitos tipos de anisotropia existentes, falaremos brevemente sobre dois deles: a anisotropia magnetocristalina e a anisotropia de forma.

A anisotropia magnetocristalina é uma propriedade intrínseca, derivada do acoplamento spin-órbita e da simetria cristalográfica do material. Esta propriedade faz com que alguns materiais sejam magnetizados mais facilmente em algumas direções.

A energia de anisotropia é definida como a energia necessária para reorientar o vetor magnetização para fora da direção do eixo fácil. Em conjunto com a interação de troca, a anisotropia magnetocristalina determina o alinhamento dos momentos magnéticos. Enquanto a energia de troca tende a alinhar todos os spins paralelamente entre si, a anisotropia magnetocristalina tende a orientá-los ao longo do eixo fácil⁴⁷. Podemos definir essa energia na forma:

$$U = \sum_i^N K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (2.34)$$

onde $\hat{n}$ tem a direção do eixo fácil de magnetização e K_i é uma constante uniaxial com dimensão de energia⁴⁸.

Um material ferromagnético magnetizado por um campo externo $\vec{H}_{ex}$ aplicado, produz um campo interno contrário à magnetização, conhecido como campo desmagnetizante. Este campo surge devido aos dipolos magnéticos não compensados nas extremidades do material e sua intensidade depende diretamente da forma geométrica da amostra. Como consequência, o sistema tende a alinhar a magnetização ao longo da direção em que a energia magnetostática — associada ao campo desmagnetizante — é mínima. Desta forma, a tendência de orientação a partir da geometria do material é conhecida como anisotropia de forma.

A anisotropia de forma é comum em materiais magnéticos nanoestruturados e sua origem vem da interação dipolar entre os momentos magnéticos. Ela representa a principal forma de anisotropia para partículas de pequenas dimensões, enquanto para partículas maiores sua contribuição é menor em relação à anisotropia magnetocristalina⁴⁷.

2.3.5 A hamiltoniana do sistema e o campo efetivo local

Com base em todas as interações magnéticas discutidas até o momento, podemos descrevê-las por meio de uma hamiltoniana, que representa a energia total do sistema:

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - \sum_i^N K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j) + \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_j^{N-1} \left[\frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)}{r_{ij}/a_0^3} \right]. \quad (2.35)$$

O campo efetivo local, advindo das interações magnéticas, é obtido da seguinte forma: 2.35:

$$\vec{B}_i^{ef} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_i} = -\vec{\nabla}_{\mu_i} H. \quad (2.36)$$

onde encontramos, para cada passo da simulação:

$$\vec{B}^{ef} = \frac{J}{\hbar^2\gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N (\vec{\mu}_j) + 2K_i \hat{z} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z}) + \frac{\mu_0}{4\pi a_0^3} \sum_j^{N-1} \left[\frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)\hat{r}_{ij} - \vec{\mu}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\langle j \rangle} (\vec{\mu}_j \times \vec{D}_{ij}). \quad (2.37)$$

O campo efetivo $\vec{B}^{ef}$ é utilizado no cálculo da dinâmica de spins que será tratado na próxima seção.

2.4 DINÂMICA DE SPINS

Em 1935, Lev Landau e Evgeny Lifshitz, publicaram um trabalho intitulado “*On the Theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*”⁴⁹ onde desenvolveram uma teoria fenomenológica da estrutura de domínios e da permeabilidade magnética em cristais ferromagnéticos. Esta teoria descreve como os domínios magnéticos se formam e evoluem em cristais ferromagnéticos na presença de um campo magnético.

Por muito tempo, o ferromagnetismo foi bem descrito fenomenologicamente por este modelo, porém ele ainda apresentava limitações. Uma delas era que o modelo proposto por Landau não previa corretamente casos com grandes valores de amortecimento da magnetização. Por isso, Thomas L. Gilbert propôs uma nova teoria⁵⁰ introduzindo um termo de amortecimento mais compatível com os mecanismos físicos observados, especialmente em materiais metálicos finos.

2.4.1 A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) descreve a dinâmica da magnetização de um material ferromagnético, sendo uma generalização da equação clássica que descreve a precessão de um momento de dipolo em torno de um campo magnético aplicado³⁹.

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

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}, \quad (2.38)$$

sendo $\vec{L}$ e $\vec{T}$, respectivamente, o momento angular do corpo rígido e o torque que atua sobre o mesmo. Esta equação continua válida na mecânica quântica, quando $\vec{L}$ e $\vec{T}$ podem ser representados por operadores no espaço de Hilbert⁵⁰. Desta forma, podemos reescrever a equação 2.38 em função do operador momento angular de spin $\vec{S}$:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T}. \quad (2.39)$$

Não é possível aplicar diretamente uma Lagrangiana clássica nesse sistema, pois variáveis dinâmicas como posições e ângulos não são bem definidos para o spin $\vec{S}$. Para isso, podemos relacionar o momento de spin utilizando a equação 2.9, que nos diz que:

$$\vec{\mu} = -\gamma\vec{S}.$$

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

$$\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{H}, \quad (2.40)$$

podemos expressar a equação 2.39 da seguinte maneira:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{H}. \quad (2.41)$$

Utilizando as equações 2.40 e 2.41 podemos obter uma equação de movimento para o momento magnético μ :

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{H}. \quad (2.42)$$

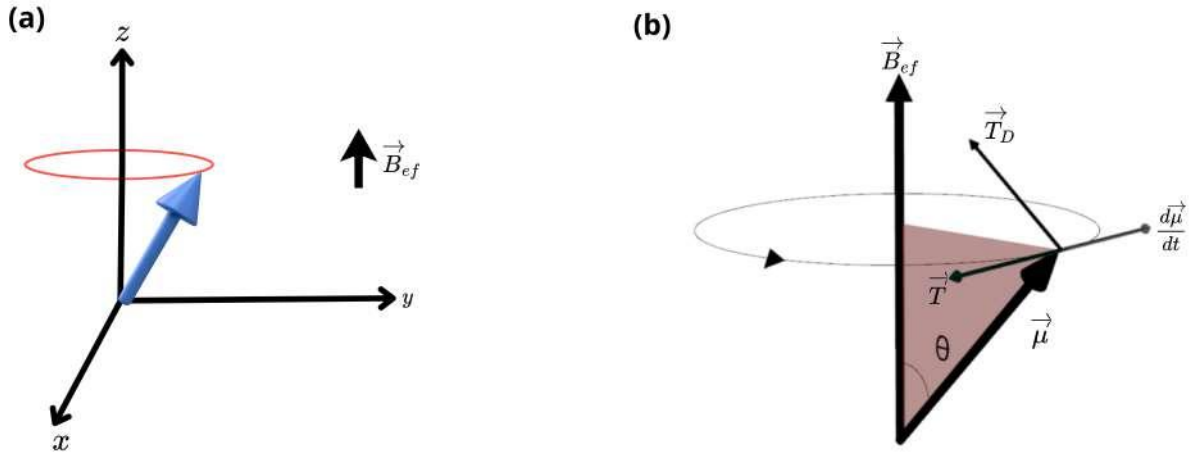
Esta equação é conhecida como Equação de Landau-Lifshitz (LL)⁴⁹, que descreve, de forma satisfatória, a dinâmica da magnetização para materiais cujo parâmetro de amortecimento $\alpha \ll 1$. Esse parâmetro, também chamado de *damping*, é análogo a uma constante de amortecimento, possuindo valores específicos para cada material. Podemos escrever a equação LL considerando os torques exercidos pelo campo magnético efetivo do material, $\vec{B}_{ef}$, como:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}_{ef}. \quad (2.43)$$

O campo efetivo (equação 2.37) 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 2.11.a.

Experimentalmente, observa-se que, em materiais ferromagnéticos, os momentos magnéticos tendem a se alinhar na direção de um campo externo aplicado. No entanto, ao analisar a equação 2.43, constata-se que ela não descreve tal fenômeno. O torque de precessão $\vec{T}$ é perpendicular ao campo magnético $\vec{B}_{ef}$, impedindo que ele provoque o alinhamento do momento na direção do campo.

Figura 2.11 – (a) Representação do momento magnético $\vec{\mu}$ precessionando em torno de um campo magnético efetivo. (b) Ilustração das direções dos vetores torque que atuam sobre $\vec{\mu}$, sendo $\vec{T}$ o torque de precessão e $\vec{T}_D$ o torque de amortecimento (*damping*).



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Em resposta a esse problema, utilizando-se de uma formulação Lagrangiana das equações de movimento incluindo o termo de amortecimento derivado da função de dissipação de Rayleigh, Gilbert propôs um termo chamado de torque de “*damping*”, descrito por⁵⁰:

$$\vec{T}_D = \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (2.44)$$

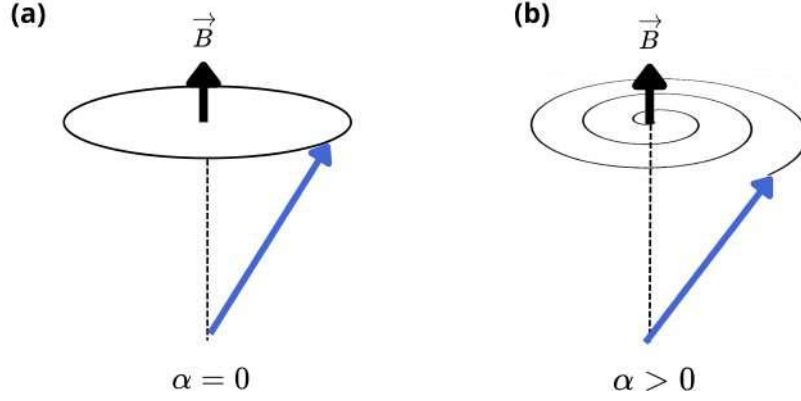
O torque $\vec{T}_D$ é perpendicular tanto ao momento magnético $\vec{\mu}$ quanto ao torque de precessão $\vec{T}$, e é responsável por promover o alinhamento gradual de $\vec{\mu}$ na direção do campo efetivo $\vec{B}_{ef}$ (Figura 2.11.b). Trata-se de um torque dissipativo, proporcional a α , que rotaciona o momento magnético em direção ao campo, sem reduzir o torque que causa a precessão. No entanto, faz com que o momento magnético realize um movimento espiral em direção ao campo⁵⁰.

Pode-se verificar a influência de $\vec{T}_D$ na Figura 2.12. Na ausência de dissipação, isto é $\alpha = 0$, o momento magnético realiza somente o movimento de precessão ao redor do campo efetivo (Figura 2.12, a). Por outro lado, quando $\alpha > 0$, o torque $\vec{T}_D$ passa a agir e o momento descreve uma trajetória espiral, convergindo gradualmente para a direção do campo (Figura 2.12, b). Este efeito é o resultado da combinação entre os termos $\frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt}$ — que tende a acelerar a precessão — e o termo $\frac{\alpha}{\mu\gamma} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right)$ — que realiza o alinhamento com $\vec{B}_{ef}$.

Portanto, adicionando o termo referente ao torque de amortecimento juntamente com o termo de precessão (equação 2.43), obtemos:

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{\mu} \times \vec{B}_{ef} + \frac{\alpha}{\mu} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right), \quad (2.45)$$

Figura 2.12 – Dinâmica da magnetização de um momento magnético sob a ação de um campo magnético efetivo. (a) Dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$), na qual o momento magnético realiza precessão uniforme ao redor do campo. (b) Dinâmica com amortecimento ($\alpha > 0$), resultando em uma precessão amortecida que leva o momento magnético a alinhar-se com o campo ao longo do tempo.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

conhecida como equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Destaca-se que a equação LLG, durante o cálculo da dinâmica de magnetização, atua somente sobre a direção do vetor momento magnético $\vec{\mu}$, de modo que sua magnitude permanece constante ao longo do tempo, como demonstraremos a seguir.

Utilizando a equação LLG na forma implícita (equação 2.45) e fazendo o produto escalar do momento magnético em ambos os lados, teremos:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{\mu} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \cdot \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (2.46)$$

Utilizando a seguinte identidade para o produto misto

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (2.47)$$

podemos reescrever a equação 2.46 na forma

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{B}^{ef} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}) + \frac{\alpha}{\mu} \frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}). \quad (2.48)$$

Como

$$\vec{\mu} \times \vec{\mu} = 0, \quad (2.49)$$

chegamos na expressão:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = 0, \quad (2.50)$$

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

Por outro lado, utilizando a propriedade da derivada de um produto escalar, que nos diz:

$$\frac{d}{dt} (\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{dt} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{dt}, \quad (2.51)$$

podemos obter:

$$\frac{d}{dt} (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) = \frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (2.52)$$

Utilizando-se da propriedade comutativa do produto escalar

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = 2\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = \frac{d\mu^2}{dt}. \quad (2.53)$$

Pela equação 2.50, temos

$$\frac{d\mu^2}{dt} = 0, \quad (2.54)$$

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

A equação 2.45 é conhecida como a forma implícita da equação LLG, porém pode ser reescrita de maneira equivalente em sua forma explícita como:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) \right]. \quad (2.55)$$

A dedução passo a passo pode ser consultada no [APÊNDICE A - A Equação Explícita de Landau-Lifshitz-Gilbert](#).

Em um material com N momentos magnéticos, é necessário resolver um sistema com $3N$ equações diferenciais acopladas, dado que os vetores que compõem a equação LGG são tridimensionais. Por isso, a equação 2.55 se torna:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}_i}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef} + \frac{\alpha}{\mu_i} \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef}) \right]. \quad (2.56)$$

A equação 2.56 descreve a dinâmica de cada momento magnético da rede, isto é, cada vetor $\vec{\mu}_i$ realiza um movimento de precessão amortecida em torno de seu respectivo campo efetivo local $\vec{B}_i^{ef}$.

A equação LLG não é linear, possibilitando soluções analíticas em alguns casos específicos. No entanto, por meio de métodos numéricos, é possível integrar o sistema de equações diferenciais para obter a dinâmica dos momentos magnéticos. Neste trabalho, utilizamos dois métodos numéricos de integração para a solução da equação de LLG: o método de Preditor–Corretor (Adams-Bashforth)⁵¹ e o método de Runge–Kutta de 1ª ordem (Método de Euler)⁵². Em nossas simulações, utilizamos o tempo de integração $dt = 1 \times 10^{-15}$ s.

2.4.2 O termo de corrente da equação LLG

A equação 2.56, conforme discutido anteriormente, descreve a dinâmica da magnetização sob a ação do campo efetivo $\vec{B}^{ef}$ e do termo de amortecimento dissipativo. Porém, novos trabalhos identificaram que uma corrente de spin polarizada induz torques adicionais

sobre a magnetização^{53,54}. Desta forma, um novo termo deve ser introduzido à equação para descrever corretamente a sua evolução temporal.

Este novo termo foi proposto por S. Zhang e Z. Li em um trabalho onde separam os elétrons em dois tipos: os elétrons de condução, que possuem energia suficiente para se mover livremente no material, e os elétrons localizados, que não participam do transporte de corrente, porém contribuem para a magnetização⁵⁵. A partir de uma hamiltoniana do tipo $s - d$, Zhang propôs um torque de spin, conhecido como torque de transferência de spin (STT - do inglês *spin torque transfer*)¹, para uma corrente aplicada na direção x :

$$\vec{T}_{STT} = -\frac{u}{M_s^2} \vec{\mu} \times \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dx} \right) - \frac{c}{M_s} \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dx}, \quad (2.57)$$

sendo $c = \beta u$ e $\vec{u}$ é dado por^{56,57}:

$$u = \frac{P j_e \mu_B}{e M_s (1 + \beta^2)}, \quad (2.58)$$

onde P é a polarização da corrente de spin, j_e é a densidade de corrente polarizada com dimensão A/m^2 . O vetor $\vec{u}$ descreve o processo adiabático dos elétrons de condução fora do equilíbrio⁵⁵ e possui dimensão de velocidade. Já o termo c está associado ao desalinhamento espacial entre o spin dos elétrons de condução e a magnetização local e é dele que origina um torque de spin não adiabático (último termo da equação 2.57). Desta forma, podemos reescrever a equação LGG adicionando o termo de corrente na forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = & -\gamma \vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_s} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) - \frac{u}{M_s^2} \vec{\mu} \times \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dx} \right) \\ & - \frac{c}{M_s} \vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dx}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

¹ A dedução passo a passo do termo de corrente pode ser consultada no [APÊNDICE B - O Termo de Corrente da Equação LGG](#)

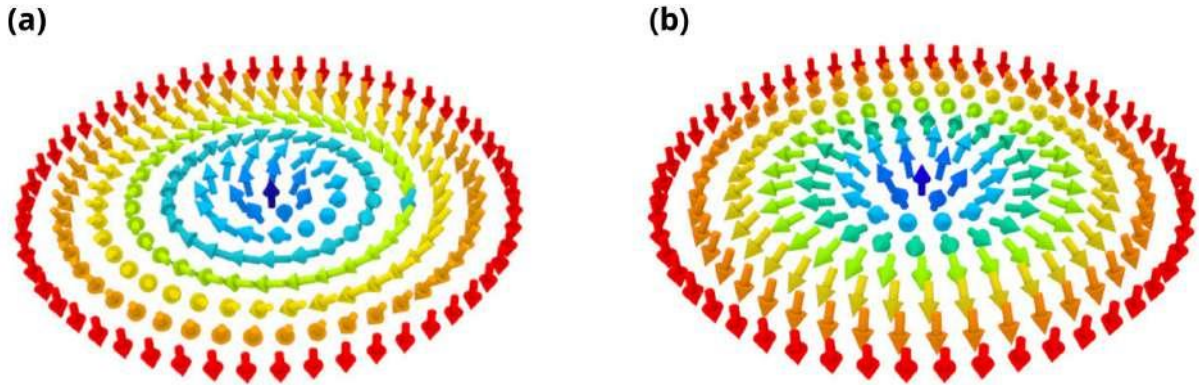
Capítulo 3

SKYRMIONS

Originalmente, skyrmions foram propostos por Tony Skyrme, em 1962, no contexto da física de partículas, como uma solução topológica do modelo sigma não linear, para explicar a estabilidade de hádrons a partir de configurações estáveis do campo^{58,59}. Embora o conceito de skyrmion tenha se originado na física de partículas, é também utilizado para descrever objetos matemáticos análogos em diversos contextos⁶⁰, como cristais líquidos⁶¹, condensados de Bose–Einstein^{62,63}, supercondutores⁶⁴ e nanofitas magnéticas^{19,60,65}.

No contexto do magnetismo, skyrmions são estruturas topológicas de spin, onde os momentos magnéticos no centro e na borda são antiparalelos. Entre essas regiões, os vetores $\vec{\mu}$ giram de forma contínua. Esse giro pode ocorrer de maneira radial ou helicoidal, a depender do tipo de skyrmion, como nos casos de Bloch ou Néel apresentados na Figura 3.1.

Figura 3.1 – Representação gráfica de dois tipos de skyrmions. a) Skyrmion do tipo Bloch: spins rotacionam tangencialmente como espiral helicoidal. b) Skyrmion do tipo Néel: 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.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

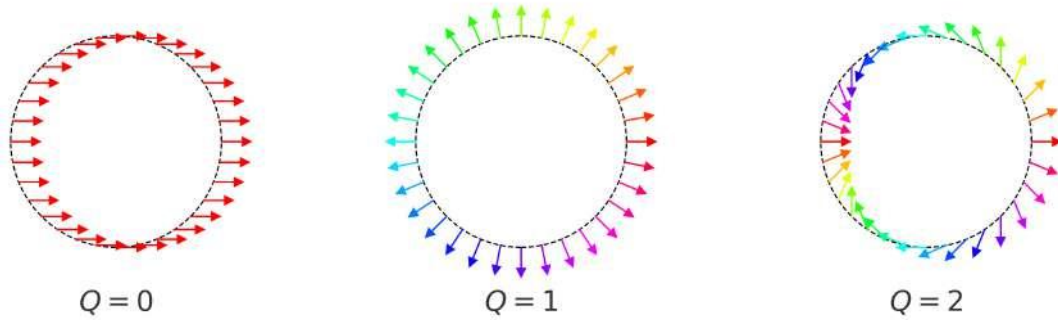
Conforme discutido na subseção 2.3.3, os diferentes tipos de skyrmions estão diretamente relacionados à natureza da IDM presente no material. Skyrmions estabilizados por IDM interfacial são conhecidos como skyrmions do tipo Néel (ou skyrmions do tipo ouriço). Nessa configuração, os spins rotacionam do centro do skyrmion até sua borda, formando espirais cíclicas com quiralidade fixa^{66,67,68}. Em materiais onde a quebra de simetria de inversão acontece ao longo da direção normal da interface, o vetor $\vec{D}_{ij}$ se alinha

no plano do filme e aponta para a direção normal ao vetor $\vec{r}_{ij}$ que liga as posições dos spins na rede. No termo de energia da IDM, dado pela equação 2.32, observa-se que, quando $\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j$ é paralelo ao vetor $\vec{D}_{ij}$, a energia é minimizada, favorecendo as configurações em que os momentos μ giram em um plano que contenha o vetor $\vec{r}_{ij}$.

Skyrmions do tipo Bloch são estabilizados por uma IDM *bulk*. Os momentos magnéticos dentro deste skyrmion rotacionam como espirais de spin helicoidais (Veja figura 3.1.a). Para materiais onde se têm a IDM *bulk*, o vetor $\vec{D}_{ij}$ é perpendicular ao vetor $\vec{r}_{ij}$ e, conforme a equação 2.32, a energia é mínima quando $\vec{\mu}_i \times \vec{\mu}_j$ é perpendicular a $\vec{D}_{ij}$, favorecendo uma configuração onde os momentos magnéticos $\vec{\mu}$ giram em torno do eixo perpendicular ao vetor $\vec{r}_{ij}$ — movimento em espirais helicoidais. Ressalta-se que, em ambos os casos da IDM, o sinal do vetor $\vec{D}_{ij}$ determinará o sentido de rotação dos momentos magnéticos⁶⁸.

Podemos caracterizar um skyrmion através de três parâmetros: a carga topológica Q , sua vorticidade ω e sua helicidade ν . A carga topológica é definida como a quantidade de vezes que o spin circunda uma esfera unitária^{19,69}, como está demonstrado na figura 3.2. Matematicamente, em duas dimensões, a carga topológica do skyrmion é definida como:

Figura 3.2 – Configurações de spin com diferentes cargas topológicas Q em um corte meridional da esfera unitária, mostrando as configurações de spin. Cada círculo representa uma textura de spin ao longo da borda de uma configuração magnética. Para $Q = 0$, os spins não realizam rotação ao longo do contorno. Para $Q = 1$ e $Q = 2$, os vetores de spin completam uma e duas voltas completas, respectivamente, indicando texturas com carga topológica não nula.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

$$Q = \frac{1}{4\pi} \iint \vec{\mu} \cdot \left(\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (3.1)$$

com a magnetização normalizada $|\vec{\mu}| = 1$. O sinal de Q está diretamente relacionado à orientação do núcleo do skyrmion⁶⁷. Skyrmions possuem carga topológica inteira $Q = \pm 1$, o que confirma que essas texturas magnéticas são estáveis e topologicamente protegidas.

Considerando a simetria de um skyrmion Néel, podemos escrever o vetor unitário

$\vec{\mu}$, em função das coordenadas esféricas¹⁹:

$$\vec{\mu}(r, \phi) = (\cos\Phi(\phi)\sin\Theta(r), \sin\Phi(\phi)\sin\Theta(r), \cos\Theta(r)), \quad (3.2)$$

onde foram introduzidas as coordenadas polares $\vec{r} = (r \cos \phi, r \sin \phi)$. Observa-se que o vetor $\vec{\mu}$ foi descrito pelo ângulo $\Theta(r)$ — que representa o ângulo entre $\vec{\mu}$ e o eixo z — e pelo ângulo $\Phi(\phi)$ — que define o ângulo entre a projeção de $\vec{\mu}$ no plano xy e o eixo x ⁷⁰.

Com isso, a equação 3.1 pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{d\Theta(r)}{dr} \frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} \sin\Theta(r) dr d\phi \\ &= \frac{1}{4\pi} [-\cos\Theta(r)]_0^{+\infty} [\Phi(\phi)]_0^{2\pi} \\ &= \omega \cdot \mathcal{P} \end{aligned} \quad (3.3)$$

sendo $\mathcal{P}$ a polaridade definida por:

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} [-\cos\Theta(r)]_0^{+\infty} = \pm 1, \quad (3.4)$$

e ω definida por:

$$\omega = [\Phi(\phi)]_0^{2\pi}. \quad (3.5)$$

Note que, se consideramos $\vec{\mu}(0) = (0, 0, 1)$ para $r = 0$ (centro do skyrmion) e $\vec{\mu}(\infty) = (0, 0, -1)$ para $r \rightarrow +\infty$, teremos $\mathcal{P} = +1$. Analogamente, se $\vec{\mu}(0) = (0, 0, -1)$ para $r = 0$ (centro do skyrmion) e $\vec{\mu}(\infty) = (0, 0, +1)$ para $r \rightarrow +\infty$, teremos $\mathcal{P} = -1$.

Podemos definir a função $\Phi(\phi)$ relacionando ω e ν por meio da expressão:

$$\Phi(\phi) = \omega\phi + \nu, \quad (3.6)$$

onde a helicidade ν representa uma fase associada ao tipo de skyrmion que se deseja descrever, relacionada aos componentes no plano da textura de magnetização do skyrmion⁷⁰.

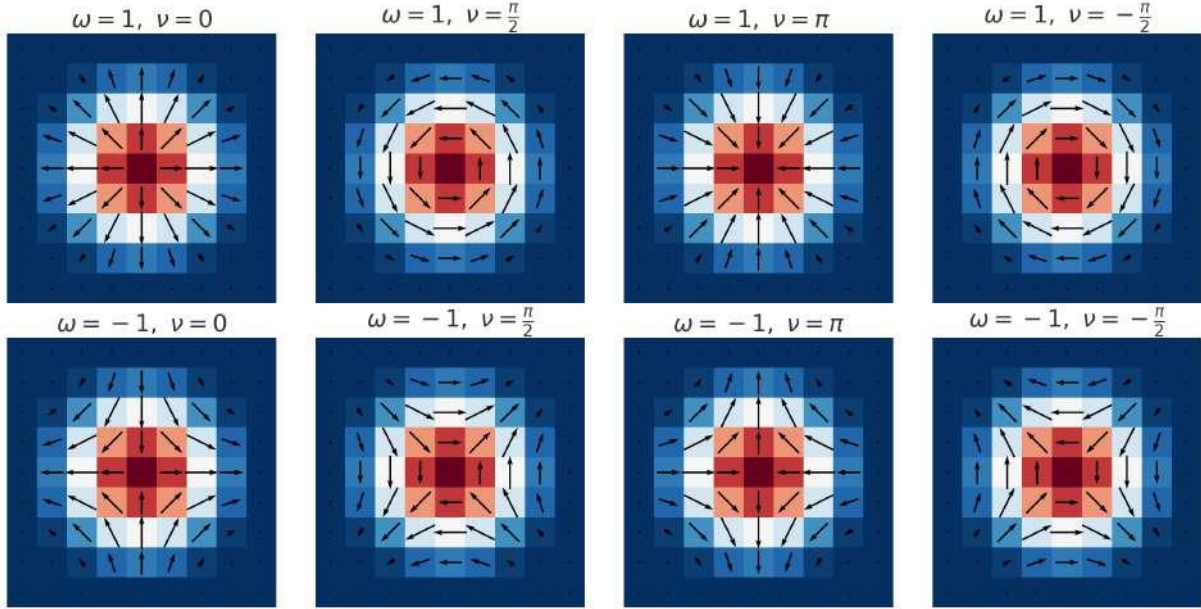
Essa relação pode ser exemplificada por meio da Figura 3.3. Para os skyrmions do tipo Néel, a helicidade assume valores inteiros de π , ou seja, $\nu = \{0, \pi\}$. Já para skyrmions do tipo Bloch, a helicidade pode assumir valores semi-inteiros de π , isto é, $\nu = \{\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\}$. A Figura 3.3 também ilustra as configurações em que a vorticidade assume os valores $\omega = \pm 1$. Especificamente, $\omega = 1$ caracteriza skyrmions, enquanto $\omega = -1$ corresponde a antiskyrmions.

O skyrmion pode ser movimentado em uma nanofita por meio da aplicação de uma corrente elétrica de spin polarizado. No entanto, sua dinâmica apresenta uma característica importante, que pode ser compreendida de forma analítica por meio da equação de Thiele.

3.1 EQUAÇÃO DE THIELE PARA SKYRMIONS

Como mencionado anteriormente, a equação LLG só pode ser resolvida em uma quantidade limitada de casos. Todavia, ao fazer algumas considerações e aproximações a

Figura 3.3 – Estruturas de skyrmions para diferentes valores de ω e ν . As setas representam os componentes do vetor de spin, enquanto as cores de fundo indicam o componente normal μ_z : tons de vermelho correspondem a $\mu_z = +1$, branco indica $\mu_z = 0$, e tons de azul correspondem a $\mu_z = -1$.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

partir dela, é possível obter equações mais simples. Entre elas, destaca-se a equação de Thiele^{71,72}.

A equação de Thiele foi originalmente proposta para descrever a dinâmica de sólitons magnéticos, mas foi posteriormente modificada para compreender, de forma analítica, os movimentos dos skyrmions induzidos por corrente⁶⁸. Para isso, deve-se assumir que o skyrmion move-se como uma partícula rígida, isto é, não há modificações em sua forma durante seu deslocamento. Logo, podemos dizer que 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 $\vec{R}(t)$ ⁶⁸. Assim temos:

$$\vec{m}(\vec{r}, t) = \vec{m}_0 [\vec{r} - \vec{R}(t)]. \quad (3.7)$$

No caso em que descrevemos uma configuração magnética sob ação de uma corrente de spin polarizada, a equação de movimento de Thiele pode ser decomposta em duas contribuições principais:

$$\vec{F}_{ext} + \vec{F}_{in} = 0, \quad (3.8)$$

onde

$$\vec{F}_{in} = \vec{F}_G + \vec{F}_D + \vec{F}_r^{in}. \quad (3.9)$$

A força externa $\vec{F}_{ext}$, como o próprio nome já diz, representa o conjunto de forças aplicadas ao sistema, como a aplicação de campo magnético externo, correntes elétricas, efeito de

borda, entre outros. Já o termo $\vec{F}_{in}$, está associado às contribuições internas, que, no formalismo de Thiele, é decomposta por uma força giroscópica $\vec{F}_G$, uma força dissipativa $\vec{F}_D$ e uma força reversível interna $\vec{F}_r^{in}$.

A força giroscópica $\vec{F}_G$, derivada do termo de precessão da magnetização da equação LLG, é dada por

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times (\vec{v} - \vec{u}), \quad (3.10)$$

onde $\vec{v}$ é a velocidade da textura magnética — neste trabalho, referenciaremos como a velocidade do skyrmion — e $\vec{G}$ é o girovetor. Em filmes finos, onde as variações da magnetização ocorrem predominantemente no plano, o vetor $\vec{G}$ possui somente uma componente não nula, perpendicular ao plano do filme⁶⁸:

$$G_z = \frac{M_S}{\gamma} \int_{\Delta\Phi\Delta\cos\Theta dz} d(\cos\Theta)d\Phi dz. \quad (3.11)$$

Note que, esta integral é justamente a densidade de carga topológica do skyrmion, de forma que podemos definir o girovetor $\vec{G} = (0, 0, -4\pi Q)$ ⁷³.

A força giroscópica $\vec{F}_G$, também é conhecida como a força de Magnus. Esta força, como se pode observar na equação 3.10, atua perpendicularmente à velocidade relativa do skyrmion $(\vec{v} - \vec{u})$, fazendo com que o skyrmion realize um movimento transversal. Esse efeito é conhecido como SkHE^{21,20}. A direção do SkHE é dada pelo valor da carga topológica do skyrmion, como ilustra a Figura 3.4.

O segundo termo da equação de Thiele, o vetor $\vec{F}_D$, é conhecido como uma força dissipativa. Derivada do termo de amortecimento (*damping*), $\vec{F}_D$ descreve o efeito das forças dissipativas no skyrmion em movimento⁷⁴, e é definido como:

$$\vec{F}_D = \overleftrightarrow{D}(\beta\vec{v} - \alpha\vec{u}), \quad (3.12)$$

onde $\overleftrightarrow{D}$ é conhecido como o tensor de *damping*

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

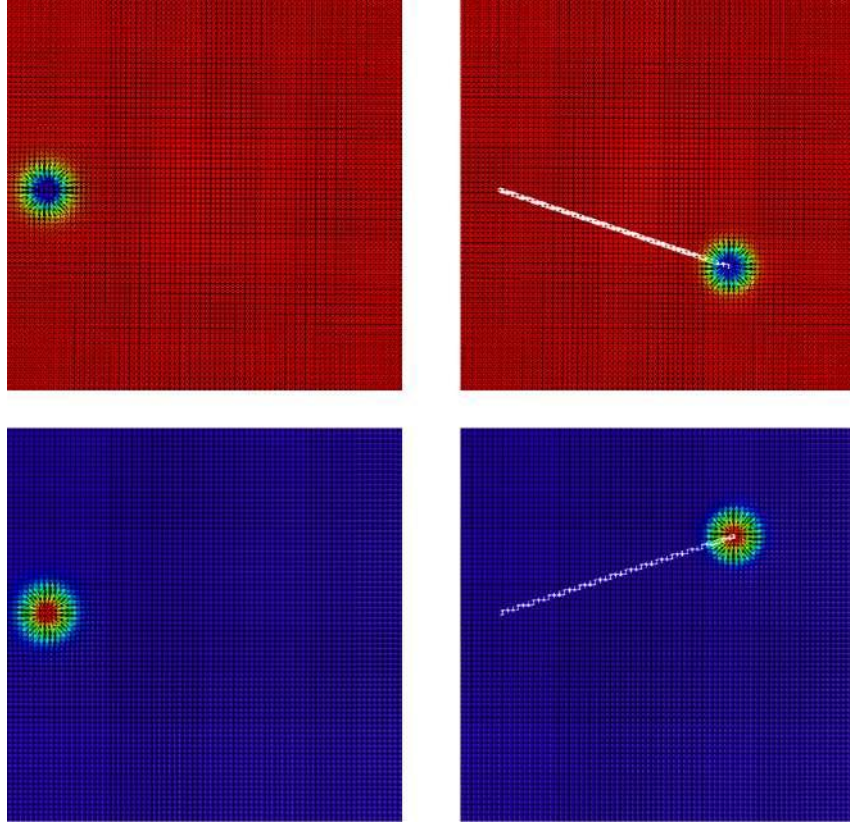
Os termos do tensor $\overleftrightarrow{D}$ podem ser expressos pela integral:

$$D_{ij} = \int \delta_i \vec{\mu} \cdot \delta_j \vec{\mu} d^2r = \begin{cases} D, & \text{para } (i,j) = (x,x), (y,y), \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.14)$$

Desta forma, podemos escrever a equação de Thiele para um skyrmion sob ação de uma corrente de spin polarizado:

$$\vec{G} \times (\vec{v} - \vec{u}) + \overleftrightarrow{D}(\beta\vec{u} - \alpha\vec{v}) + \frac{\gamma}{M_{sa}} \vec{F}_{ext} = 0. \quad (3.15)$$

Figura 3.4 – Influência da carga topológica na trajetória dos skyrmions. Acima: skyrmions com $Q = +1$; abaixo: skyrmions com $Q = -1$. A direção da força de Magnus, que é proporcional à carga topológica, resulta em deflexões opostas para cada caso.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

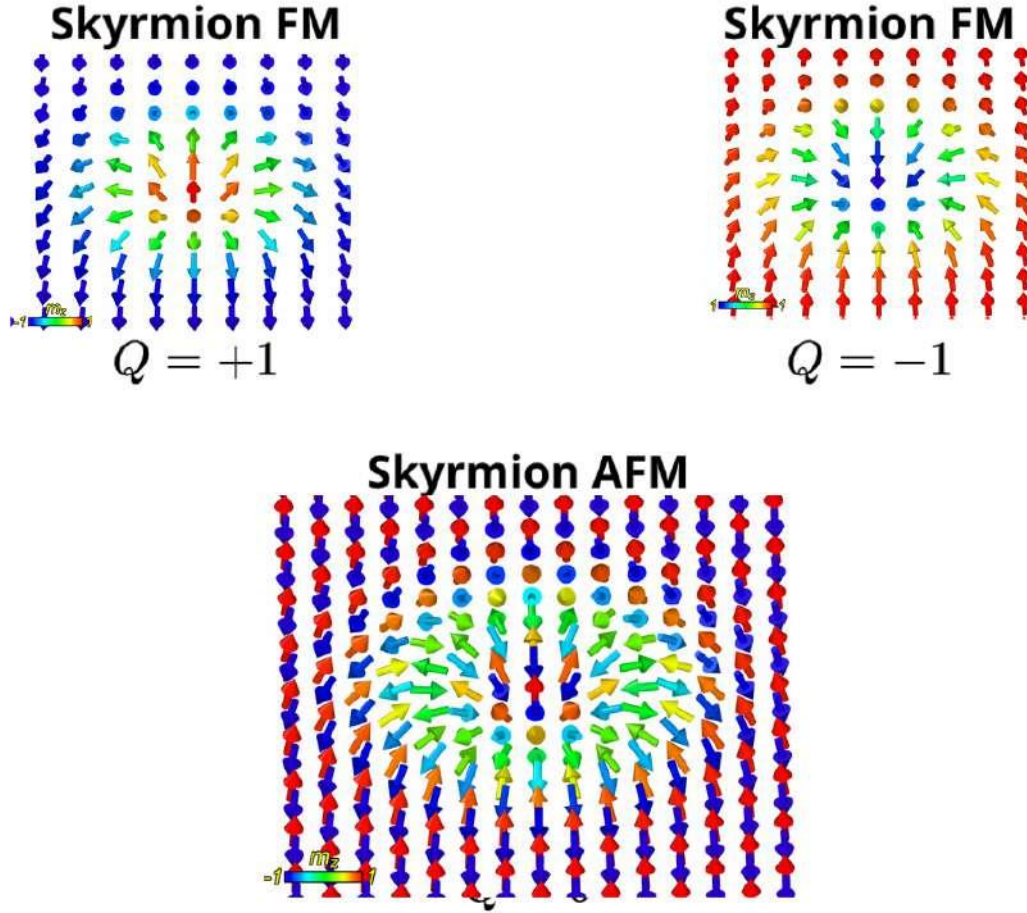
3.2 SKYRMION ANTIFERROMAGNÉTICO

Como foi mostrado, ao movimentarmos um skyrmion magnético em uma nanofita via aplicação de corrente, ele apresenta uma trajetória com componente transversal à direção da corrente aplicada, devido à Força de Magnus. Em contraste a este comportamento, skyrmions em materiais AFM aparecem como uma solução ao SkHE.

Um skyrmion AFM é definido como uma excitação topológica em materiais anti-ferromagnéticos, onde os momentos magnéticos das duas sub-redes estão orientados em direções opostas. Essa estrutura pode ser interpretada como a superposição de dois skyrmions ferromagnéticos com cargas topológicas opostas $Q = \{+1, -1\}$, que são fortemente acoplados via interação de troca antissimétrica²², conforme ilustrado na Figura 3.5.

Uma consequência direta dessa estrutura composta por sub-redes, é observada na dinâmica dos skyrmions AFM sob a ação de uma corrente elétrica de spin polarizado. Como as cargas topológicas das sub-redes são opostas, as forças de Magnus geradas em cada uma ($\vec{F}_G^a$ e $\vec{F}_G^b$) têm o mesmo módulo, porém, com direções contrárias, resultando em um cancelamento efetivo $\vec{F}_G^a = -\vec{F}_G^b$, conforme ilustrado na Figura 3.6. Por essa razão, diferentemente dos skyrmions ferromagnéticos, o skyrmion AFM desloca-se em uma

Figura 3.5 – Representação de skyrmions FM com cargas topológicas $Q = +1$ e $Q = -1$, e um skyrmion AFM resultante da superposição dessas duas estruturas.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

trajetória retilínea na direção da corrente aplicada (veja Figura 3.7).

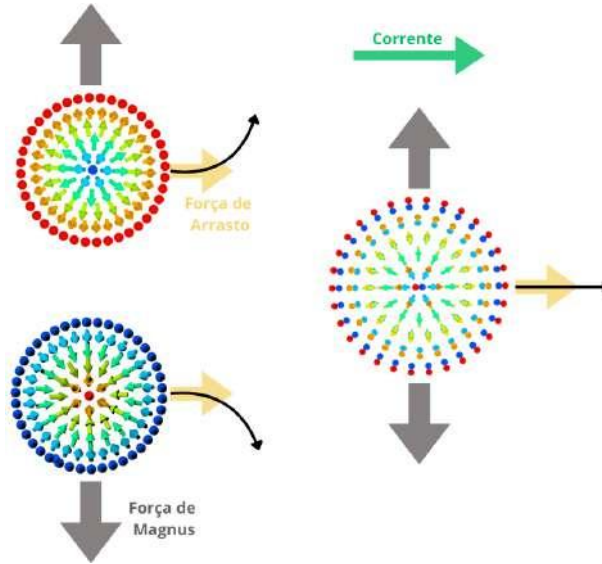
Além de não apresentarem o SkHE, os skyrmions AFM apresentam características especialmente vantajosas para aplicações em dispositivos spintrônicos. Materiais AFM não são sensíveis a campos externos, o que contribui significativamente para sua estabilidade. Outra forte característica é que a IDM, interação fundamental para a formação e estabilização de skyrmions, é mais comum em materiais AFM do que em materiais FM. Assim, ampliam-se as possibilidades de sua implementação em sistemas reais²².

O material AFM pode ser descrito por dois vetores característicos⁷⁵. O primeiro corresponde à magnetização líquida total $\vec{M}_{tot}$, que em um AFM perfeito é nula. O segundo vetor é o parâmetro de ordem $\vec{L}$, também conhecido como vetor de Néel, definido como:

$$\hat{L} = \frac{\hat{M}^a - \hat{M}^b}{2} \quad (3.16)$$

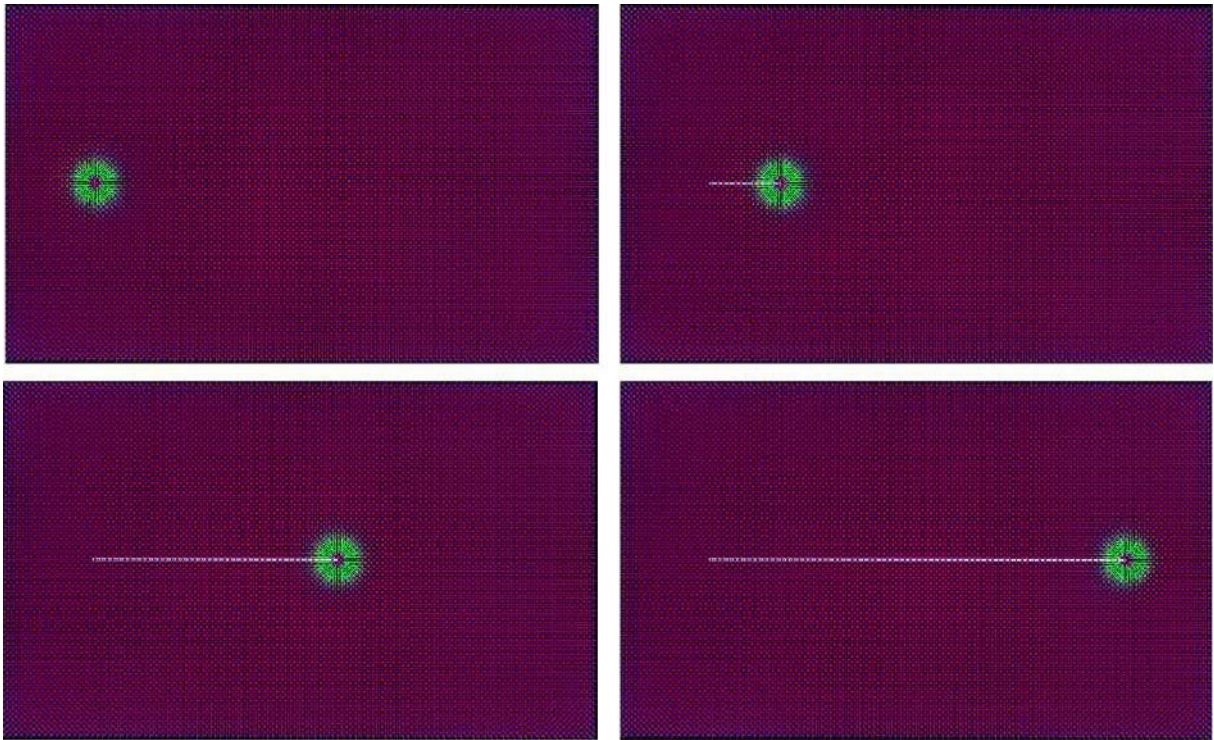
onde $\hat{M}^a$ e $\hat{M}^b$ são as densidades de magnetização normalizadas das duas sub-redes⁷⁵. Observe que o parâmetro de ordem $\hat{L}$ está indissoluvelmente ligado ao vetor $\vec{M}_{tot}$, dado que qualquer mudança na magnetização provoca variação em $\hat{L}$.

Figura 3.6 – Comparação entre a dinâmica de skyrmions ferromagnéticos (à esquerda) e antiferromagnético (à direita) sob a ação de uma corrente de spin. Em sistemas ferromagnéticos, a força de Magnus desvia a trajetória do skyrmion. Já no caso antiferromagnético, as forças de Magnus associadas às duas sub-redes se cancelam, resultando em movimento retilíneo ao longo da direção da corrente.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Figura 3.7 – Trajetória retilínea de um skyrmion antiferromagnético (AFM), resultado da ausência do Efeito Hall de Skyrmion (SkHE).



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Para materiais AFM, a textura magnética não é descrita pela magnetização total, mas sim pela configuração espacial de $\hat{L}$, sendo possível calcular a carga topológica do skyrmion através do vetor de Néel, pela equação:

$$Q_{AFM} = \frac{1}{4\pi} \int \hat{L} \cdot (\partial_x \hat{L} \times \partial_y \hat{L}) dx dy \quad (3.17)$$

e demonstrar que os skyrmions AFM também possuem carga topológica igual a ± 1 ^{22,75}.

3.2.1 Equação de Thiele para skyrmions antiferromagnéticos

Verificamos que skyrmions AFM não sofrem deflexão do seu movimento, devido ao cancelamento da força de Magnus. Logo, a equação de Thiele deve ser modificada. Originalmente, a equação de Thiele é dada por:

$$\vec{G} \times (\vec{v} - \vec{u}) + \overleftrightarrow{D}(\beta\vec{u} - \alpha\vec{v}) + \frac{\gamma}{M_s a} \vec{F}_{ext} = 0.$$

Para um skyrmion AFM, podemos considerar o vetor $\vec{G} = 0$, de forma que a equação de Thiele para um skyrmion AFM se torna:

$$\overleftrightarrow{D}(\beta\vec{u} - \alpha\vec{v}) + \frac{\gamma}{M_s a} \vec{F}_{ext} = 0. \quad (3.18)$$

Escrevendo a equação 3.18 na forma matricial, teremos:

$$\begin{pmatrix} D_{xx} & 0 \\ 0 & D_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta u - \alpha v_x \\ -\alpha v_y \end{pmatrix} + \frac{\gamma}{M_s a} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Podemos decompor a equação 3.19 em duas equações distintas, uma para cada componente x e y :

$$D_{xx}(\beta u - \alpha v_x) + \frac{\gamma}{M_s a} F_x = 0 \quad (3.20)$$

$$D_{yy}(\alpha v_y) + \frac{\gamma}{M_s a} F_y = 0 \quad (3.21)$$

Destaca-se que as equações encontradas resultam em um sistema desacoplado, onde as equações para a componente x e y dependem exclusivamente da coordenada correspondente. Seguindo a análise das equações desacopladas, podemos observar matematicamente o comportamento linear do movimento do skyrmion AFM. Portanto, a velocidade no eixo x de um skyrmion magnético, impulsionado por uma corrente elétrica de spin polarizado, é dada por:

$$v_x = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\gamma}{M_s a D_{xx}} F_x + \beta u \right). \quad (3.22)$$

Assumindo que não há nenhuma força externa atuando sobre o skyrmion AFM, v_x se torna:

$$v_x = \frac{\beta}{\alpha} u. \quad (3.23)$$

Já a equação para a velocidade transversal, v_y :

$$v_y = -\frac{\gamma F_y}{M_S a \alpha D_{yy}}, \quad (3.24)$$

onde podemos verificar que, na ausência de forças externas, $v_y = 0$.

Capítulo 4

METODOLOGIA

4.1 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

Ainda que já compreendamos como as interações se comportam no nível atômico — como seus spins e momentos magnéticos interagem — tem-se dificuldade para prever como essas interações se manifestam coletivamente, por exemplo, em uma amostra magnética real em escala nanométrica.

O micromagnetismo surgiu com o desafio de desenvolver um formalismo no qual se descreve o comportamento magnético real, considerando as propriedades das interações atômicas fundamentais para serem simuladas.

Para isso, o micromagnetismo caracteriza amostras magnéticas substituindo o spin por um campo contínuo clássico de vetores de magnetização, permitindo a determinação dos campos magnetostáticos do sistema. Podemos escrever⁷⁶:

$$\vec{M}(\vec{r}) = M_S \vec{\mu}(\vec{r}) \quad (4.1)$$

onde M_S é a magnetização de saturação e $\vec{\mu} \cdot \vec{\mu} = 1$.

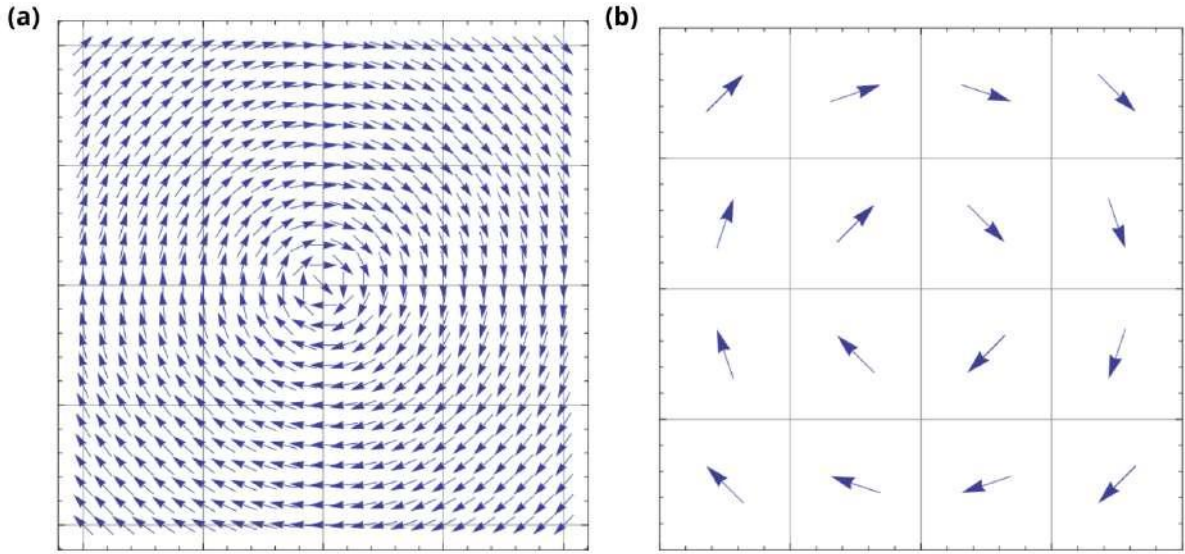
A simulação micromagnética permite realizar um conjunto de simplificações a fim de descrever o comportamento de materiais ferromagnéticos em escalas muito reduzidas (na ordem de 10^{-6} a 10^{-9} metros). Sem tais simplificações, a simulação de materiais magnéticos, que são compostos por um número elevado de átomos, tornaria-se computacionalmente impraticável, devido tanto à complexidade das interações quanto ao custo dos cálculos envolvidos.

Portanto, o sistema é discretizado em *clusters* contendo N momentos magnéticos, conhecidos como células de trabalho. Essa abordagem reduz, significativamente, o número de interações calculadas na simulação, que, consequentemente, reduz o tempo de simulação e a demanda de memória RAM nos computadores.

A escolha da dimensão da célula de trabalho a ser utilizada em uma simulação deve garantir que os momentos magnéticos atômicos em seu interior estejam, em sua maioria, alinhados na mesma direção, ou seja, comportando-se como uma magnetização praticamente uniforme. Ao mesmo tempo, esse volume deve conter um número significativo de momentos atômicos, permitindo a aplicação do modelo contínuo do micromagnetismo. A Figura 4.1 apresenta a redefinição de um sistema bidimensional de rede quadrada sob a perspectiva da aproximação micromagnética.

As células de trabalho possuem o mesmo tamanho e, por conseguinte, contêm

Figura 4.1 – Representação esquemática do modelo de aproximação micromagnética. (a) Configuração real do sistema, com momentos magnéticos localizados em posições atômicas discretas. (b) Representação contínua obtida a partir da aproximação micromagnética.



Fonte: Figura adaptada da referência ⁷⁷.

aproximadamente a mesma quantidade de momentos magnéticos atômicos. Assim, para cada célula, podemos associar um vetor magnetização local $\vec{M}_i$, o qual possui módulo constante, porém aponta em diferentes direções ao longo do material. Considerando uma célula de trabalho de volume $V_{cel} = a^3$, podemos escrever

$$\vec{M}_i = \frac{1}{V_{cel}} \sum_j^N \vec{\mu}_j = \frac{\vec{m}_i}{a^3}, \quad (4.2)$$

onde $\vec{m}_i$ representa o momento magnético resultante de cada célula de trabalho, a é conhecido como parâmetro de rede e a soma é feita sobre os N momentos magnéticos $\vec{\mu}_j$ contidos em seu interior. Pela definição apresentada na equação 4.1, podemos reescrever a equação 4.2, obtendo o momento magnético da célula:

$$\vec{m}_i = M_s a^3 \hat{m}_i. \quad (4.3)$$

4.1.1 A hamiltoniana micromagnética

Os termos da Hamiltoniana do sistema, apresentados na equação 2.35, descrevem as interações entre momentos magnéticos discretos, localizados na rede cristalina do material. Ao adotarmos a aproximação micromagnética, é necessário renormalizar os termos da Hamiltoniana (equação 2.35) de forma que não mais trabalharemos com momentos magnéticos isolados, e sim uma densidade média de momento magnético em pequenas células de trabalho cúbicas de lado a .

Nesse novo formalismo, a energia de troca pode ser escrita como:

$$U^{tr} = -\frac{J_{cel}C^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j, \quad (4.4)$$

onde definimos a constante adimensional $C = \frac{M_s a^3}{\hbar \gamma}$ e $J_{cel} = 2aA$ é a constante de interação de troca reescalada. Por conveniência, é comum absorver o fator C em J_{cel} , reescrevendo a energia de troca como:

$$U^{tr} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j, \quad (4.5)$$

A interação de anisotropia magnetocristalina, por sua vez, originalmente descrita na equação (2.34), pode ser reformulada como:

$$U^{ani} = \sum_i^K K_{cel} (\hat{m}_i \cdot \hat{n})^2, \quad (4.6)$$

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

Para o termo da energia dipolar na aproximação micromagnética, devemos primeiramente reescrever a equação 2.31 em função do parâmetro de rede a :

$$U^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_i^K \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_i)}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (4.7)$$

Agora, utilizando-se das equações 4.2 e 4.3, teremos:

$$\begin{aligned} U^{dip} &= \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \{M_s a^3\}^2 \sum_i^K \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \\ U^{dip} &= \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{8\pi} \sum_i^K \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

Definindo o parâmetro de interação dipolar

$$M_{cel} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{8\pi}, \quad (4.9)$$

podemos, enfim, escrever a energia dipolar micromagnética:

$$U^{dip} = M_{cel} \sum_i^K \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (4.10)$$

De forma análoga, a energia da IDM pode ser escrita, no formalismo micromagnético, como:

$$U^{DM} = D_{cel} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j), \quad (4.11)$$

com $D_{cel} = a^2 D \mathcal{N}$, onde D é o parâmetro de intensidade da interação, também conhecido como valor da constante de Dzyaloshinskii-Moriya e $\mathcal{N}$ é o número de camadas. Especialmente, neste trabalho assumimos $\mathcal{N} = 1$,

Por fim, a Hamiltoniana micromagnética total do sistema assume a forma:

$$H = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) + M_{cel} \sum_i \sum_j^{N-1} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a^3)} \right] - \sum_i^K K_{cel} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{2} D_{cel} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{d}_{ij} \cdot (\hat{m}_i \times \hat{m}_j). \quad (4.12)$$

4.2 CONFIGURAÇÃO INICIAL DO SKYRMION AFM

Como já comentado, descrevemos os materiais AFM como duas sub-redes (a e b) magnéticas interpenetrantes idênticas. Também verificamos que podemos definir um skyrmion AFM como a superposição de dois skyrmions FM com cargas topológicas opostas fortemente acoplados. Desta forma, aqui definiremos a configuração inicial do skyrmion AFM em nossas simulações.

No Capítulo 3 definimos o vetor magnetização local pela equação 3.2. Desta forma, na aproximação micromagnética, podemos escrever:

$$\hat{m}(r, \phi) = (\cos\Phi(\phi)\sin\Theta(r), \sin\Phi(\phi)\sin\Theta(r), \cos\Theta(r)). \quad (4.13)$$

Para podermos definir a configuração inicial do skyrmion na nanofita AFM, é necessário definir as funções locais $\Phi(\phi_i)$ e $\Theta(r_i)$ para cada sub-rede. A função azimutal $\Phi(\phi_i)$, já introduzida no capítulo 3, é dada por $\Phi(\phi) = \omega\phi + \nu$. Como aqui estudaremos somente sobre skyrmions do tipo Néel, adotaremos $\nu = 0$.

Descrevemos a função $\Theta(r_i)$ como o ângulo entre o vetor unitário $\hat{m}$ e o eixo z . Considerando a sub-rede a , onde os spins apontam para cima em $r = 0$ e para baixo em $r \rightarrow \infty$, utilizamos a seguinte expressão para $\Theta(r_i)$ por⁷⁸:

$$\Theta(r_i) = \pi \frac{\frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}, \quad (4.14)$$

onde r_i é a distância do i -ésimo sítio ao centro do skyrmion, r_s representa o raio característico do skyrmion e $s \in [0, 1)$ é um parâmetro adimensional que controla a intensidade efetiva das interações magnéticas. Tal parâmetro é relevante para estabelecer conexão com modelos realistas, conforme discutido em⁷⁸.

Podemos verificar que a equação 4.14, satisfaz as condições impostas. Fazendo $r_i = 0$, teremos:

$$\Theta(r_i)_a = \pi \frac{0}{1+0} = 0, \quad (4.15)$$

indicando que, no centro do skyrmion, o vetor de magnetização aponta ao longo do eixo $+z$. No limite $r_i \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \Theta(r) &= \lim_{r \rightarrow \infty} \pi \frac{\frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\pi}{1 + \frac{r_i}{r_s} \frac{2}{1-s}} \\ &= \pi, \end{aligned} \quad (4.16)$$

o que nos diz que, no exterior do skyrmion, a orientação de $\hat{m}$ é antiparalela ao eixo z , conforme esperado para um skyrmion do tipo Néel.

De forma análoga, para a sub-rede b , consideramos a orientação oposta dos momentos magnéticos: os spins apontam para baixo no centro do skyrmion ($r_i = 0$) e para cima no infinito ($r_i \rightarrow \infty$). Assim, para a rede b , definimos:

$$m_i^z = -\cos\Theta(r_i), \quad (4.17)$$

garantindo que os vetores de magnetização das duas sub-redes permaneçam antiparalelos em cada ponto do espaço. A Figura 4.2 apresenta a configuração inicial do skyrmion gerada pelo código desenvolvido pelo grupo de pesquisa para este trabalho: a) sub-rede a ; b) sub-rede b e c) na rede AFM resultante.

4.3 CALCULO DA POSIÇÃO E DO RAI DO SKYRMION

Para determinar a posição do skyrmion na nanofita utilizamos um método relativamente simples, dado pela seguinte equação⁷⁹:

$$x = \frac{\int x(m_z \pm 1) dV}{\int (m_z \pm 1) dV}; \quad y = \frac{\int y(m_z \pm 1) dV}{\int (m_z \pm 1) dV}.$$

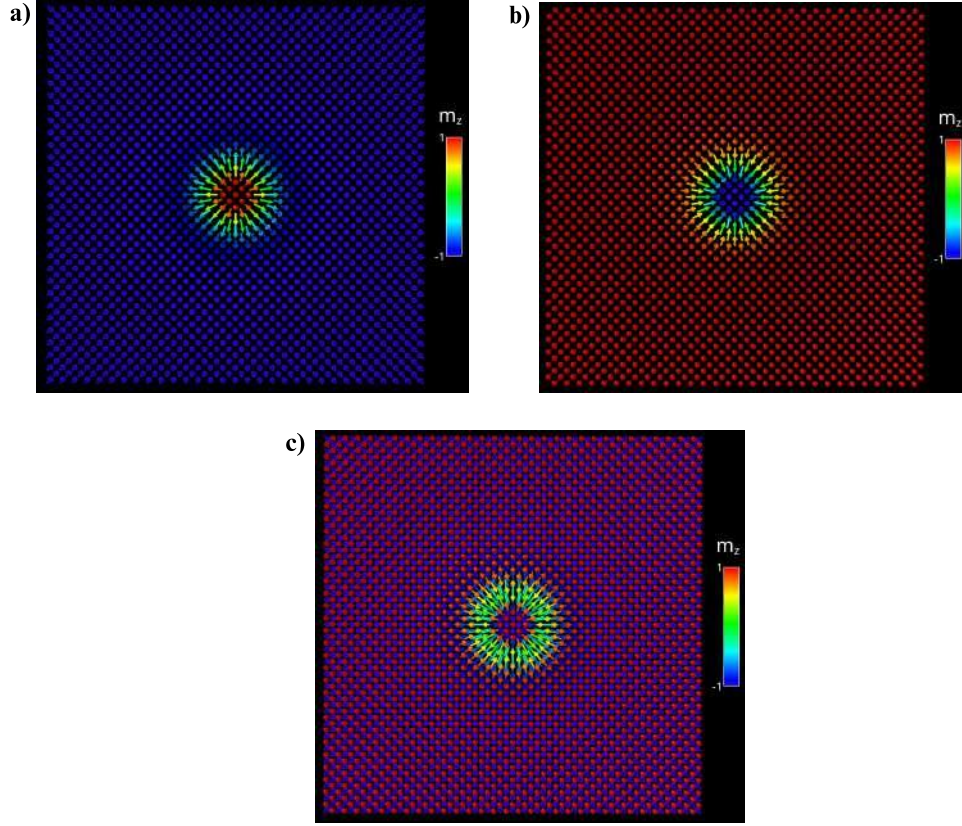
Este método permite determinar a posição central do skyrmion ao identificar a região onde a componente m_z da magnetização se desvia significativamente da magnetização uniforme presente fora do skyrmion. A escolha do sinal na função de peso ($m_z \pm 1$) depende da sub-rede considerada e da orientação do vetor de magnetização no centro do skyrmion. Por exemplo, para a sub-rede a , onde o momento magnético aponta para $+z$ no centro do skyrmion, teremos:

$$x = \frac{\int x(m_z + 1) dV}{\int (m_z + 1) dV}; \quad y = \frac{\int y(m_z + 1) dV}{\int (m_z + 1) dV},$$

em que a função de peso ($m_z + 1$) assegura que somente as regiões onde m_z são diferentes de -1 , contribuam significativamente para a integral.

O raio do skyrmion é definido a distância entre o momento magnético do centro do skyrmion e o momento magnético cuja componente m_z seja nula, ou o mais próximo disso (Veja a Figura 4.3).

Figura 4.2 – Configuração inicial gerada pela simulação para (a) a sub-rede *a*, (b) a sub-rede *b* e (c) a rede AFM resultante da superposição das duas sub-redes.



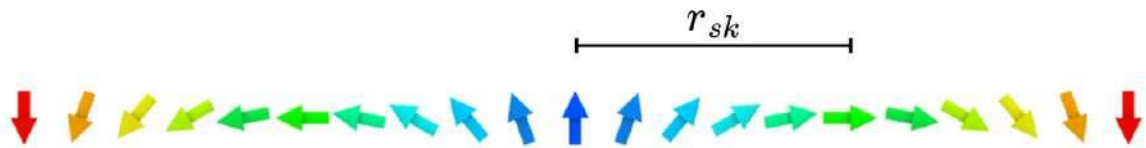
Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Uma alternativa para calcularmos o raio do skyrmion é através da seguinte equação⁸⁰:

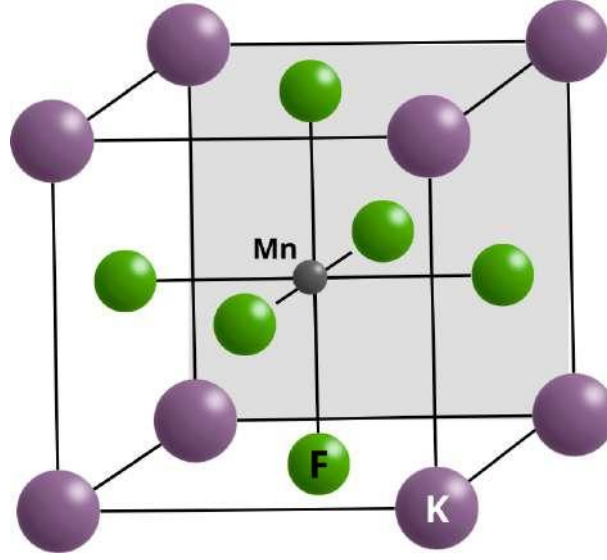
$$r_{sk} = \frac{\sum_k d_s e^{-\Omega |m_k^z|}}{\sum_k e^{-\Omega |m_k^z|}}, \quad (4.18)$$

onde d_s é a distância do sítio k ao centro do skyrmion, m_k^z é a componente z da magnetização nesse sítio, e Ω é um parâmetro adimensional de ajuste positivo que controla a função de peso $e^{-\Omega |m_k^z|}$. Podemos observar que quando $|m_k^z| \approx 1$ (centro ou fora do skyrmion), o termo exponencial tende a zero, reduzindo sua contribuição para a média. Por outro lado, quando $|m_k^z| \approx 0$, a exponencial atinge seu valor máximo, destacando as regiões de transição. Assim, a equação retorna uma média ponderada das distâncias centrada nas regiões onde m_z se anula, características do raio da estrutura.

Figura 4.3 – Representação esquemática da definição do raio do skyrmion r_{sk} .



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

Figura 4.4 – Representação da célula cúbica unitária do trifluoreto de potássio manganês ($KMnF_3/Pt$).

Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

4.4 A NANOFITA ANTIFERROMAGNÉTICA DE $KMnF_3/Pt$

Neste trabalho, estudamos a dinâmica de um skyrmion AFM em uma nanofita na presença de uma impureza magnética. Para isso, utilizamos um modelo micromagnético discreto de um skyrmion em uma nanofita bicamada AFM de trifluoreto de potássio manganês sobre platina ($KMnF_3/Pt$). Este fluoreto antiferromagnético possui uma estrutura cristalina do tipo perovskita (veja Figura 4.4), e sua característica antiferromagnética está ligada à maneira como os íons de manganês interagem magneticamente dentro dessa estrutura⁸¹.

Vimos que, ao adotarmos a aproximação micromagnética, foi necessário redefinir as constantes de interação magnética de modo que seus valores passaram a depender explicitamente do parâmetro de rede a , isto é, da dimensão da célula micromagnética utilizada na discretização do sistema. A escolha da dimensão da célula magnética deve considerar três comprimentos característicos do material. São estes: comprimento de troca λ (equação 4.19), largura de parede Δ (equação 4.20) e o comprimento associado a IDM ξ (equação 4.21).

$$\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \approx 8,61 \text{ nm} \quad (4.19)$$

$$\Delta = \sqrt{\frac{A}{K}} \approx 7,54 \text{ nm} \quad (4.20)$$

$$\xi = \frac{2A}{|D|} \approx 16,48 \text{ nm} \quad (4.21)$$

Na aproximação magnética, o parâmetro de rede a deve ser menor que o menor comprimento característico do material:

$$a < \min(\lambda, \Delta, \xi), \quad (4.22)$$

de forma que o volume da célula micromagnética escolhida seja capaz de preservar a uniformidade local da magnetização e a validade da descrição contínua do modelo.

A tabela 4.1, apresenta os parâmetros do material $KMnF_3/Pt$ ^{22,82,83} utilizados nas simulações micromagnéticas do presente trabalho.

Tabela 4.1 – Parâmetros do material utilizados para o cálculo da dinâmica de spins.

Parâmetro	Valor	Unidade
Constante de Troca (A)	$-6,59 \times 10^{-12}$	J/m
Constante de Anisotropia (K)	$1,16 \times 10^5$	J/m^3
Magnetização de Saturação (M_s)	$3,76 \times 10^5$	A/m
Dzyaloshinskii-Moryia (D)	8×10^{-4}	J/m^2
Damping (α)	0,1	
Constante não adiabática (β)	0,1	
Polarização (P)	0,5	
Comprimento de troca (λ)	8,61	nm
Parâmetro de largura da parede (Δ)	7,54	nm
Comprimento associado à IDM (ξ)	16,48	nm
Parâmetro de Rede (a)	1	nm

4.5 MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA

Estudaremos a interação de um skyrmion e uma impureza magnética durante sua dinâmica em uma nanofita. Para isso, modificamos as propriedades magnéticas de uma região específica da nanofita, alterando uma ou mais constantes definidas no hamiltoniano (A , K , M e D)¹. Chamamos essa região de impureza magnética ou hóspede, pois é composta por um material distinto daquele do nanofio AFM de $KMnF_3/Pt$ (devido a mudança dos parâmetros da hamiltoniana), ou anfitrião. As constantes no hamiltoniano são definidas da seguinte forma⁸⁸:

$$J_{ij} = 2a \begin{cases} A, \\ A_i \\ A_h, \end{cases} \quad (4.23)$$

$$D_{ij} = a^2 \begin{cases} D, \\ D_i, \\ D_h, \end{cases} \quad (4.24)$$

¹ Algumas modificações experimentais desses parâmetros foram reportadas em estudos como^{84,85,86,87}.

$$K_i = 2a^3 \begin{cases} K, \\ K_h, \end{cases} \quad (4.25)$$

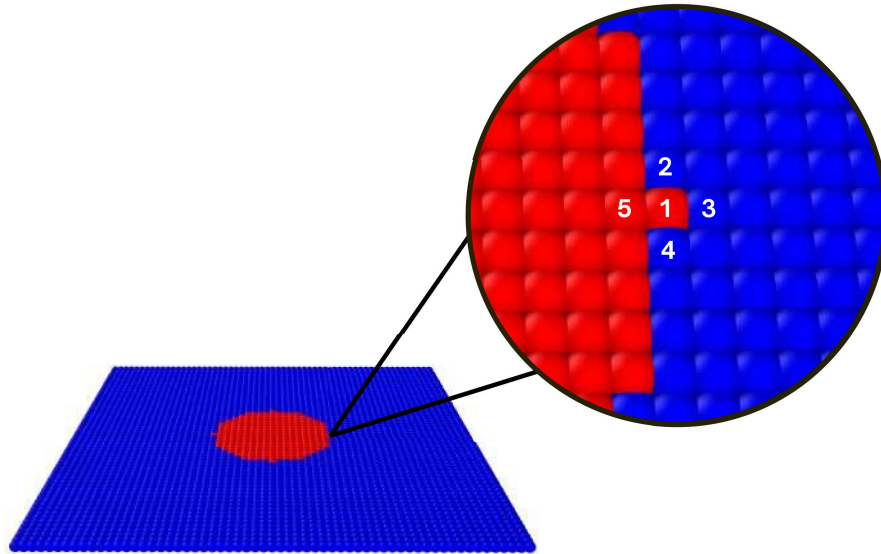
$$M_{ij} = \left(\frac{\mu_0 a^3}{8\pi} \right) \begin{cases} MM \\ MM_h \\ M_h M_h \end{cases} \quad (4.26)$$

Os parâmetros sem subscritos correspondem ao material anfitrião, enquanto os subscritos h e i indicam, respectivamente, os valores associados à impureza magnética e à interface entre o anfitrião e a impureza. Quando há interação entre sítios vizinhos pertencentes a regiões com propriedades distintas, como ilustrado na Figura 4.5, é necessário definir parâmetros efetivos para a interface. Neste contexto, adotamos médias geométricas para as constantes de troca e da IDM, definidas:

$$A_i = \sqrt{A \cdot A_h}, \quad D_i = \sqrt{D \cdot D_h}. \quad (4.27)$$

Não é necessário definir parâmetros de interface para a anisotropia magnetocristalina K e para a magnetização M . A constante de anisotropia K é um parâmetro local, definido ponto a ponto no sítio da rede, e sua contribuição no Hamiltoniano não depende de interações entre diferentes regiões. Já na interação dipolar, o termo M_{ij} depende diretamente dos momentos magnéticos nos sítios i e j , o que permite que todas as

Figura 4.5 – Representação esquemática da interação entre o sítio 1 (impureza- em vermelho) e os sítios vizinhos 2, 3 e 4 (material anfitrião- em azul). Nesses casos, os parâmetros de interação devem ser calculados a partir das médias definidas pelas Equações 4.27, a fim de representar adequadamente os efeitos interfaciais entre o material anfitrião e a impureza magnética.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2025.

combinações: anfitrião–anfitrião, anfitrião–impureza e impureza–impureza, sejam tratadas naturalmente sem a necessidade de um valor intermediário específico para a interface.

Os parâmetros da região de impureza A_h , D_h , K_h e M_h definem a natureza da interação skyrmion-impureza. Desta forma, a intensidade da atração ou repulsão pode ser controlada definindo os seguintes fatores de razão:

$$\lambda_A = \frac{A_h}{A}, \quad \lambda_D = \frac{D_h}{D}, \quad \lambda_K = \frac{K_h}{K}, \quad \lambda_M = \frac{M_h}{M}. \quad (4.28)$$

Capítulo 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 INTERAÇÃO SKYRMION-IMPUREZA

Com o objetivo de compreender o comportamento da interação do skyrmion com a impureza, realizamos inicialmente o cálculo da energia de interação skyrmion-impureza. Para isso, fixamos a impureza circular de diferentes r_{imp} no centro da nanofita e variamos a posição do skyrmion ao longo do eixo longitudinal. A energia total do sistema $E(x)$ é, então, obtida pela hamiltoniana micromagnética do sistema em função da posição x do centro do skyrmion. Desta forma, definimos a seguinte equação:

$$U(x) = E(x) - E(x \rightarrow \infty). \quad (5.1)$$

que corresponde somente à energia de interação devido à presença da impureza.

Os gráficos das Figuras 5.1 e 5.2 apresentam a energia de interação $U(x)$ em função da posição do centro do skyrmion no eixo x para diferentes valores de λ_K , λ_A , λ_D , λ_M e para diferentes tamanhos de impureza. Vale destacar que, nos gráficos apresentados, todos os demais parâmetros magnéticos não explicitamente indicados são iguais à 1, de modo a evidenciar unicamente o efeito da variação do parâmetro em análise.

A Figura 5.1.a apresenta as curvas da energia de interação $U(x)$ em função da posição do skyrmion no eixo x , obtidas para diferentes valores do raio da impureza r_{imp} , considerando $\lambda_K = 0.70$. Os perfis de energia exibem a presença de mínimos localizados (poço de potencial), indicando uma interação atrativa entre o skyrmion e a impureza. Esse comportamento sugere que o skyrmion tende a ser energeticamente favorecido ao se posicionar próximo ao centro da impureza. Considerando $\lambda_K = 1.20$, observa-se um comportamento distinto daquele apresentado na Figura 5.1.a. Conforme mostra a Figura 5.2.a, os perfis de energia apresentam máximos localizados (barreira de potencial), indicando uma interação skyrmion-impureza repulsiva, impedindo que o skyrmion permaneça próximo a ela.

Observa-se que os parâmetros λ_A (Figuras 5.1.b e 5.2.b) e λ_M (Figuras 5.1.d e 5.2.d) apresentam comportamentos semelhantes ao de λ_K . Quando as modificações dos parâmetros $\lambda_K, \lambda_A, \lambda_M < 1$ resultam em impurezas com potenciais atrativos, enquanto para $\lambda_K, \lambda_A, \lambda_M > 1$, resultam em impurezas com barreiras de potencial, associadas à interação repulsiva. Em contraste com este padrão, o parâmetro λ_D apresenta comportamento oposto: $\lambda_D < 1$ resultam em um potencial repulsivo e $\lambda_D > 1$ favorecem a formação de potenciais atrativos.

À medida que r_{imp} aumenta, verifica-se uma intensificação nas interações skyrmion-

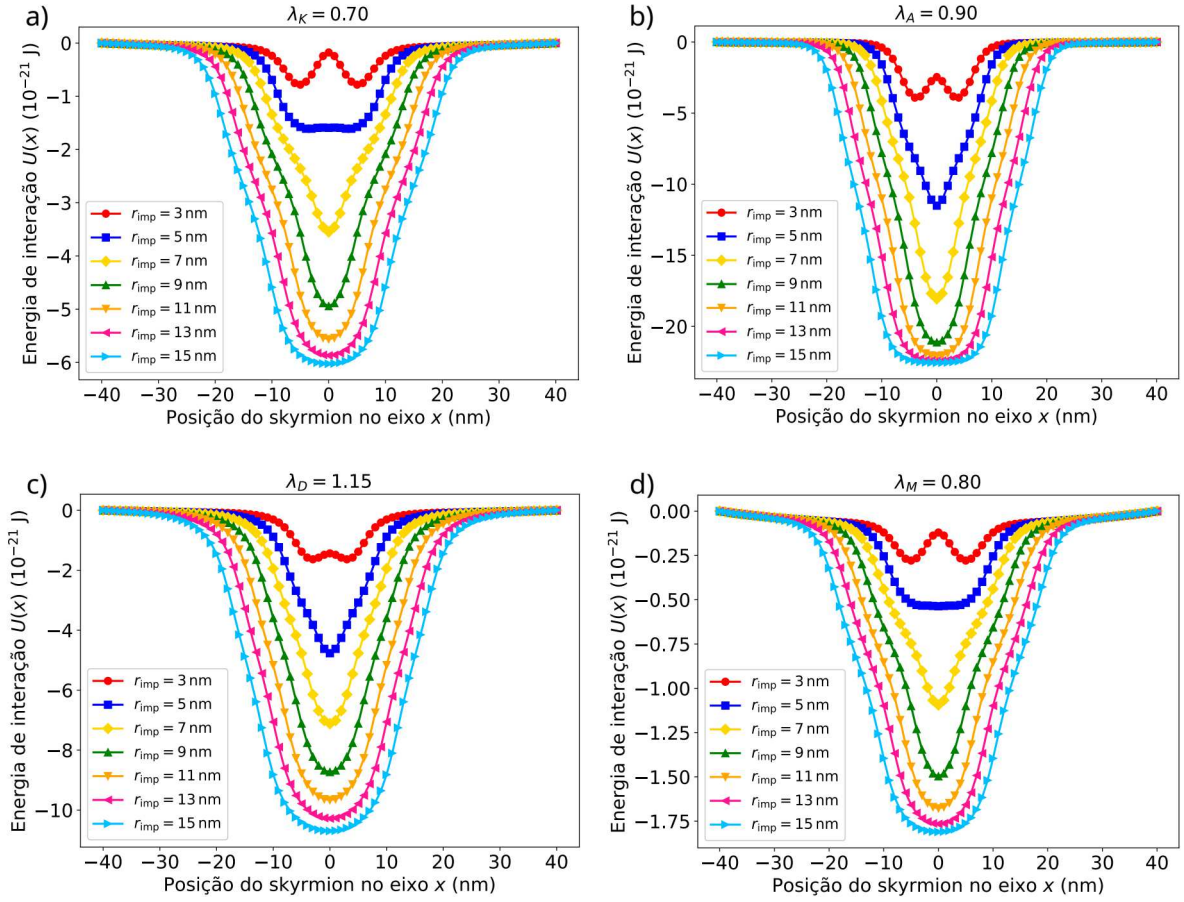


Figura 5.1 – Energia de interação $U(x)$ em função da posição do centro do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores do raio da impureza r_{imp} , considerando a modificação no parâmetro a) $\lambda_K = 0,70$; b) $\lambda_A = 0,90$; c) $\lambda_D = 1,15$ e d) $\lambda_M = 0,80$.

impureza, refletidas em perfis de energia com poços e barreiras de potenciais mais acentuadas, indicando o fortalecimento da interação skyrmion-impureza. A mudança do valor de r_{imp} , isto é, o tamanho da impureza desempenha um papel importante na eficiência do aprisionamento ou repulsão do skyrmion.

A Figura 5.3 apresenta os gráficos de $U(x)$ obtidos para diferentes valores de λ_K , λ_A , λ_D e λ_M , variando no intervalo de 0.7 a 1.30 com incremento de 0.05. Ressalta-se que, neste conjunto de simulações apresentadas, adotamos $r_{imp} = 11 \text{ nm}$.

Observando os efeitos decorrentes, exclusivamente da variação das propriedades magnéticas, podemos fazer algumas considerações. Com base nas curvas de energia $U(x)$, nota-se que a intensidade da interação varia significativamente conforme o parâmetro modificado. Em termos de magnitude, as interações skyrmion-impureza induzidas por alterações no parâmetro λ_M apresentam menor intensidade, seguidas por λ_K e λ_D , sendo as variações em λ_A as que induzem as interações mais fortes.

Destaca-se ainda, que as curvas de energia de interação $U(x)$ obtidas para as modificações nos parâmetros λ_K , λ_A , λ_D são simétricas em relação ao eixo horizontal (veja Figura 5.3. a, b e c). Em contraste, para as modificações no parâmetro λ_M , os

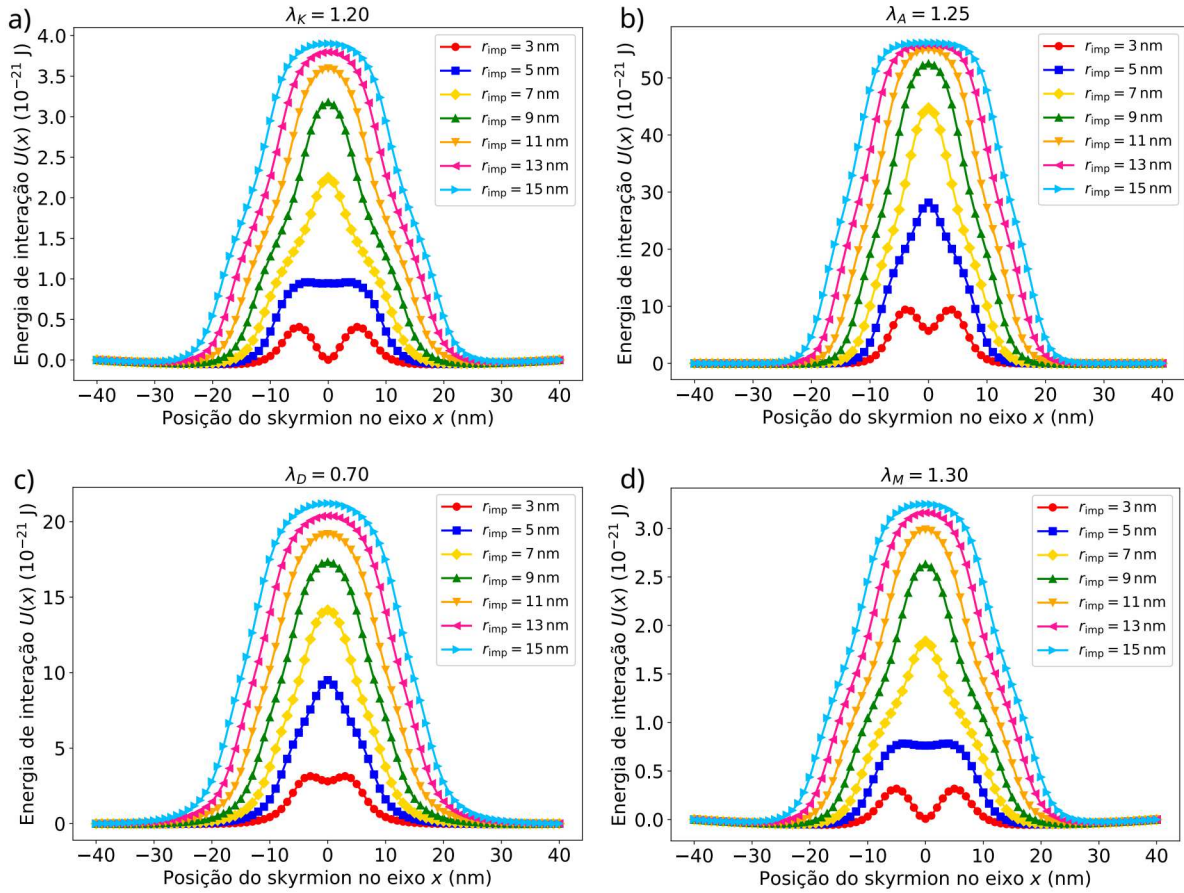


Figura 5.2 – Energia de interação $U(x)$ em função da posição do centro do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores do raio da impureza r_{imp} , considerando a modificação no parâmetro a) $\lambda_K = 1,20$; b) $\lambda_A = 1,25$; c) $\lambda_D = 0,70$ e d) $\lambda_M = 1,30$.

perfis de $U(x)$ apresentam uma clara assimetria em relação ao eixo horizontal (Figura 5.3.d). Entendemos que essa diferença pode ser causada pela interação dipolar que depende diretamente do quadrado da magnetização de saturação M_s , enquanto as interações ligadas aos demais parâmetros (A , D e K) têm dependência linear⁸⁸.

A análise de nossas simulações nos permite identificar três possíveis estratégias para o controle da intensidade das interações skyrmion-impureza: o ajuste do raio da impureza r_{imp} , a escolha do tipo de parâmetro magnético alterado e a variação da amplitude da modificação dos parâmetros. A combinação adequada destes fatores possibilita um controle de ajuste da energia de interação, que pode ser utilizada para o controle posicional do skyrmion, fator importante para a aplicação em dispositivos magnéticos lógicos e de memória.

Embora os resultados apresentados nesta subseção correspondam a configurações de equilíbrio, isto é, sem a presença de qualquer estímulo externo que induza a movimentação do skyrmion, os perfis de energia obtidos fornecem informações importantes sobre o comportamento do skyrmion diante da modificação dos parâmetros magnéticos.

Na próxima subseção, exploraremos a interação skyrmion-impureza em um contexto

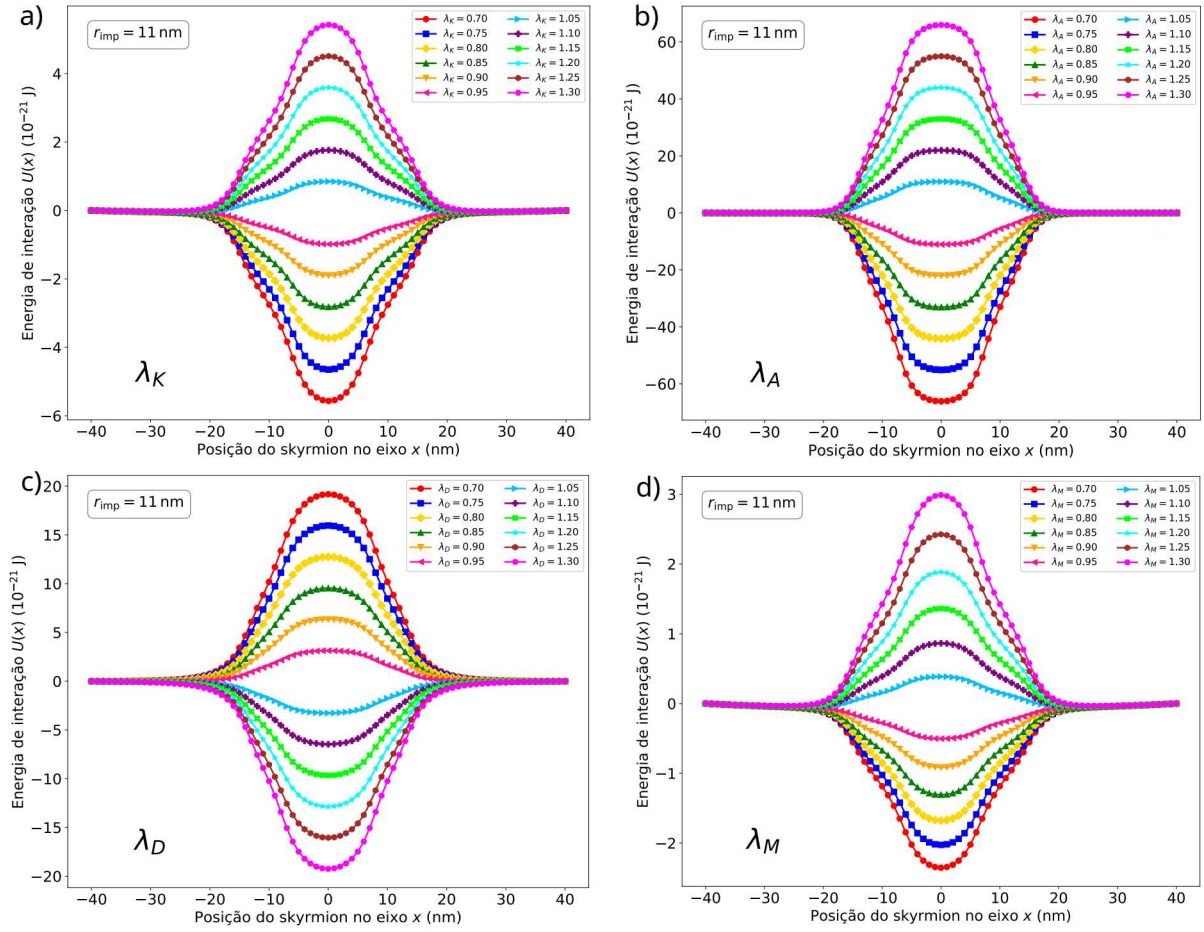


Figura 5.3 – Energia de interação $U(x)$ em função da posição do skyrmion ao longo do eixo x , para diferentes valores dos parâmetros a) λ_K ; b) λ_A ; c) λ_D e d) λ_M . Em todas as simulações foi adotado $r_{imp} = 11$ nm.

dinâmico, onde é aplicada uma corrente elétrica polarizada em spin para movimentar o skyrmion. Este estudo nos permite investigar a aplicabilidade das impurezas como mecanismos de controle da posição do skyrmion, aprofundando nosso entendimento sobre o comportamento dinâmico dessa quasipartícula na presença de defeitos magnéticos.

5.2 DIAGRAMAS

Com base nos resultados previamente obtidos com os perfis de energia, iniciou-se uma nova investigação que consiste em analisar a dinâmica de um skyrmion AFM enquanto este se desloca em uma nanofita com uma impureza magnética. Para isto, posicionamos o centro do skyrmion em $x = -30$ nm e o centro da impureza magnética em $x = 5$ nm — como ilustrado na Figura 5.4). Dividiremos os resultados para os dois tipos de interação: atrativa e repulsiva.

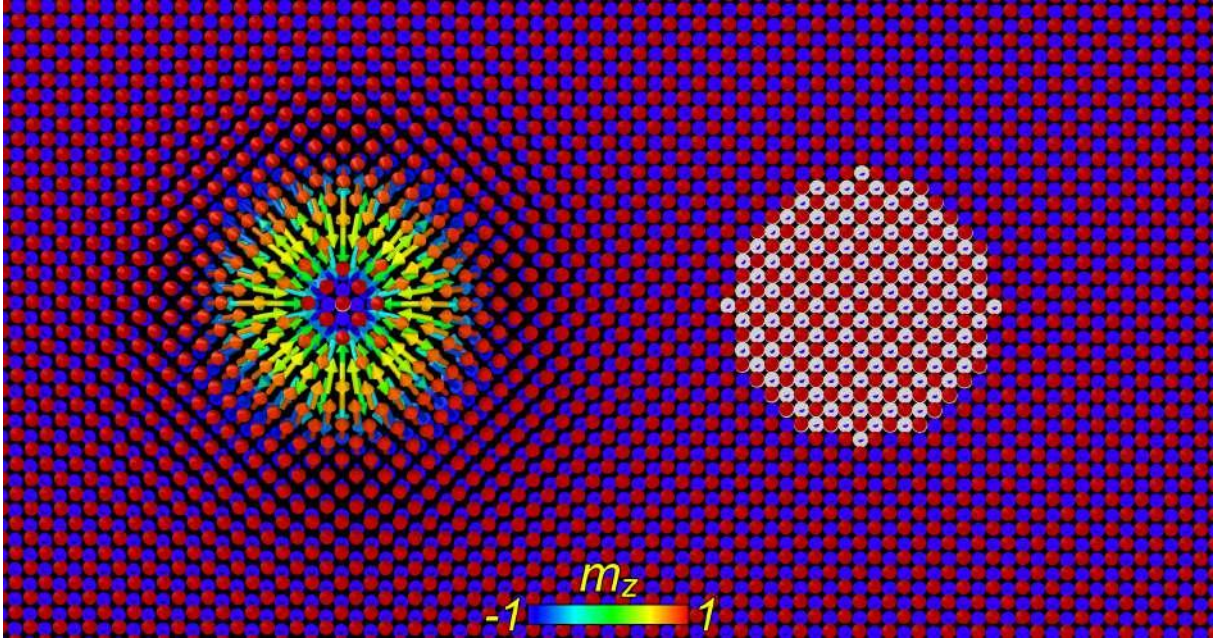


Figura 5.4 – Configuração inicial utilizada nas simulações: uma nanofita contendo um skyrmion e uma impureza circular, separados por uma distância de 35 nm entre seus centros.

5.2.1 Cenários para interação atrativa

Devido à aplicação de uma corrente polarizada em spin, à medida que o skyrmion vai se aproximando da impureza, a interação entre eles se intensifica, resultando em três possíveis cenários para a interação atrativa: (i) o skyrmion atravessa a impureza magnética; (ii) o skyrmion fica preso na região da impureza magnética; (iii) o skyrmion é aniquilado ao interagir com a impureza^{29,30,31}. Para entender melhor a natureza desta interação, realizamos simulações variando sistematicamente:

- O raio da impureza (r_{imp}), variando de 7 a 15 nm , com incrementos de 2 nm ;
- A densidade de corrente aplicada (j_e), com valores de $0, 5, 0, 8, 1, 0, 2, 0$, e $5, 0 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$;
- Os parâmetros magnéticos λ_K , λ_A , e λ_M , variando de $0,70$ até $1,0$, com incrementos de $0,05$;
- O parâmetro λ_D , variando de $1,0$ até $1,30$, também com incrementos de $0,05$.

Nesta parte do trabalho, optamos por utilizar valores de r_{imp} maiores ou iguais à 7 nm . Como visto anteriormente, para $r_{imp} < 7 \text{ nm}$ a interação skyrmion-impureza torna-se excessivamente fraca, resultando em armadilhas ineficientes. Além disso, nestes casos, observa-se o surgimento de um potencial característico de poço duplo (veja Figura 5.1), no qual aparecem dois mínimos locais em vez de um único centro de aprisionamento. Essa condição conduz o skyrmion às posições fora do centro do defeito, comprometendo a

previsibilidade da posição final^{82,88,89}. Os resultados das simulações são apresentados nos diagramas das Figuras 5.5 e 5.6. Nestes diagramas, o triângulo verde representa o cenário *i*, o círculo vermelho indica o cenário *ii*, e o símbolo X indica o cenário *iii*.

Os diagramas das figuras 5.5 e 5.6 validam os resultados obtidos na análise dos perfis de energia de interação $U(x)$, os quais mostraram a seguinte ordem crescente de magnitude da intensidade da interação skyrmion-impureza: $\lambda_M < \lambda_K < \lambda_D < \lambda_A$.

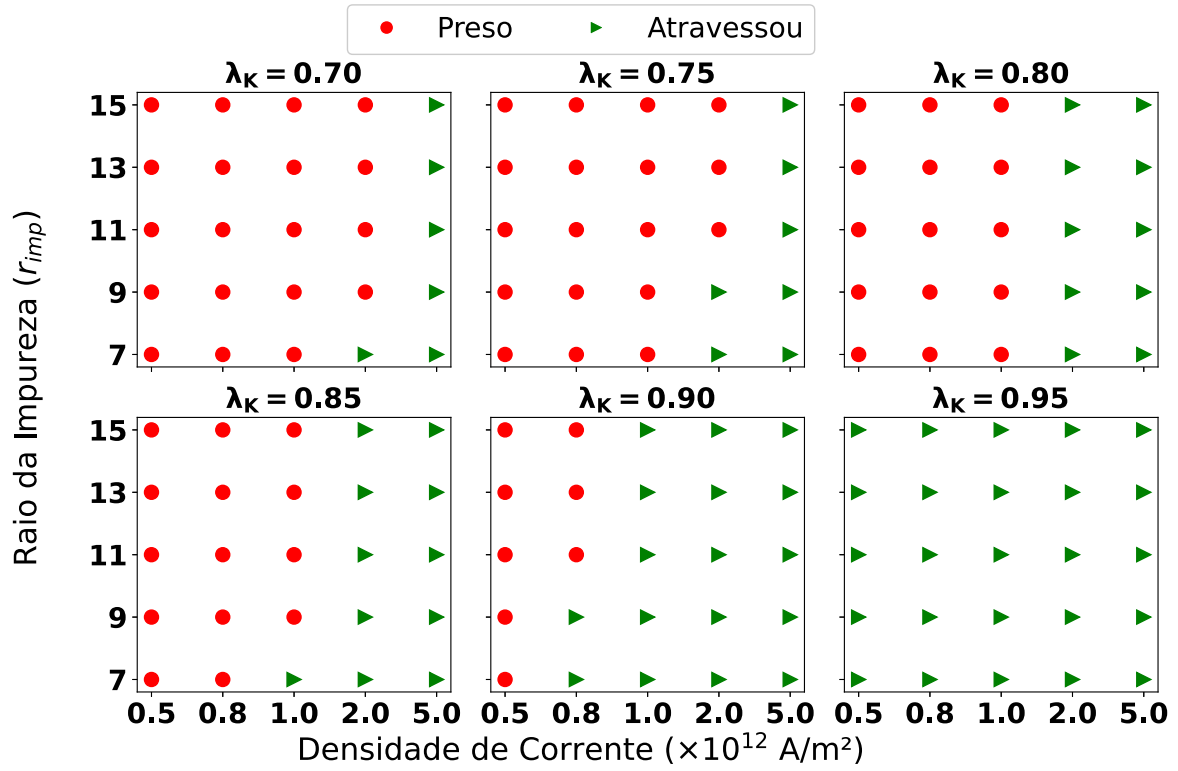
Com base nos cenários obtidos nas simulações e apresentados nos diagramas, podemos separar os resultados em três grupos distintos. O primeiro grupo corresponde às impurezas associadas à modificação do parâmetro λ_M (Figura 5.5.b), onde apresenta, em sua maioria, resultados correspondentes ao cenário *i*. O aprisionamento do skyrmion ocorreu somente para $\lambda_M \leq 0.85$ e com densidades de corrente $j_e = 5 \times 10^{11} \text{ A/m}^2$ e $j_e = 1 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$. Isto é, o aprisionamento do skyrmion só se torna possível para as menores densidades de corrente consideradas neste estudo, representando as menores velocidades do skyrmion.

O segundo grupo de resultados está relacionado às impurezas associadas pela modificação de λ_K (figura 5.5.a), onde há uma distribuição equilibrada entre passagem e aprisionamento do skyrmion pela impureza. Neste grupo, para todo valor de λ_K escolhido, temos a existência dos cenários *i* e *ii*. Para $\lambda_K \leq 0.85$, somente densidades de corrente maiores do que $j_e = 1 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ conseguem fazer com que o skyrmion atravesse a impureza, exceto pelo único caso: $\lambda_K = 0.85$ e $r_{imp} = 7 \text{ nm}$. Já para $\lambda_K \leq 0.90$, temos um grande número de casos do cenário *i*, destaque para $\lambda_K = 0.95$, onde o skyrmion não é aprisionado em nenhum caso.

Já o terceiro grupo configura as simulações para λ_D (Figura 5.6.a) e λ_A (Figura 5.6.b). Neste grupo há uma disparidade em relação ao número de casos do cenário *i* e *ii*. Para λ_D podemos destacar que, somente com $j_e \geq 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ é possível fazer com que o skyrmion atravesse a impureza. Para $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, o skyrmion atravessa a impureza para valores menores que $\lambda_D = 1.10$, ou seja, os dois valores com menor intensidade de interação (veja Figura 5.3). Na Figura 5.6.b, estão apresentados os diagramas das simulações realizadas para λ_A . Constata-se que o skyrmion só atravessa a impureza com a densidade de corrente mais alta deste estudo, $j_e = 5 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, e para o menor valor de $\lambda_A = 0.95$. Novamente, o diagrama destaca a magnitude da interação skyrmion-impureza quando modificado o parâmetro λ_A . Destaca-se que, somente para λ_A obtemos casos do cenário *iii*. Estes casos ocorreram quando $r_{imp} = 7 \text{ nm}$ e $j_e = 5 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$.

Devido à alta magnitude da interação skyrmion-impureza associadas às modificações dos parâmetros λ_D e λ_A , realizamos novas simulações sistemáticas (Figura 5.7) variando discretamente: λ_D em incrementos de 0.01 no intervalo $[1.02, 1.04]$ e λ_A em incrementos de 0.01 no intervalo $[0.97, 0.99]$. Os diagramas revelam que pequenas variações nas constantes do material provocam mudanças significativas na interação skyrmion-impureza,

(a)



(b)

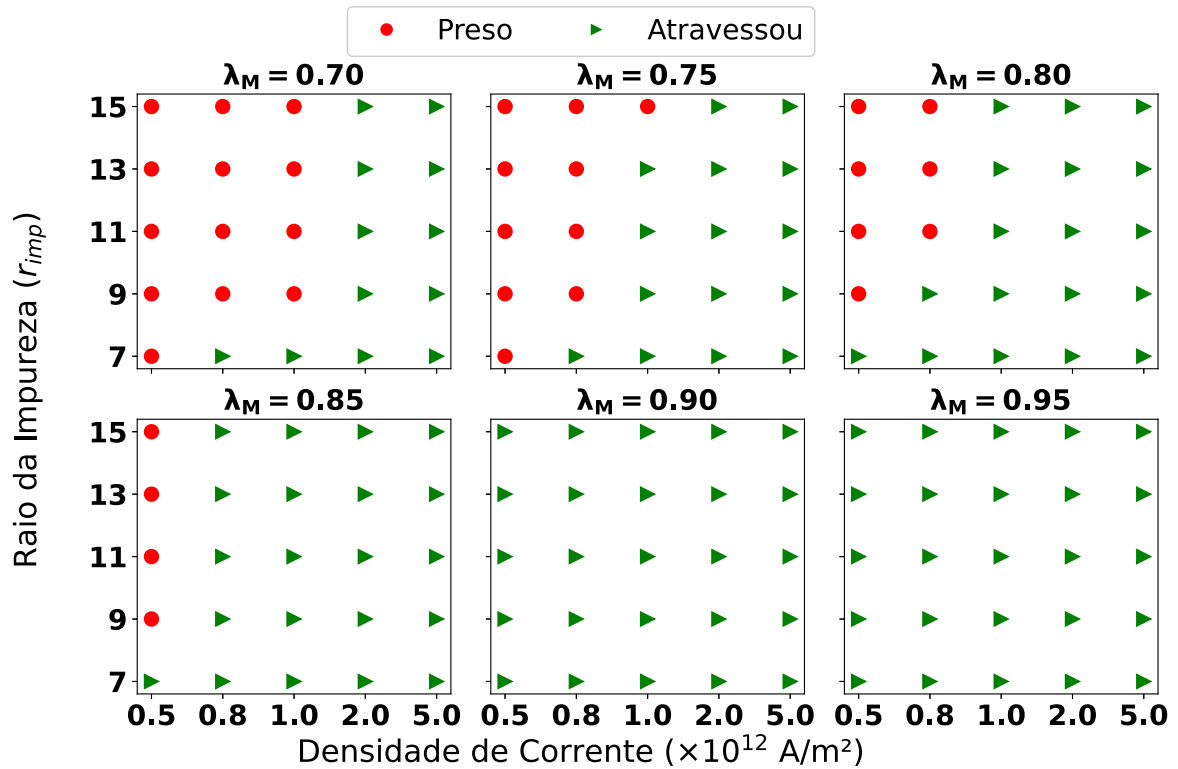
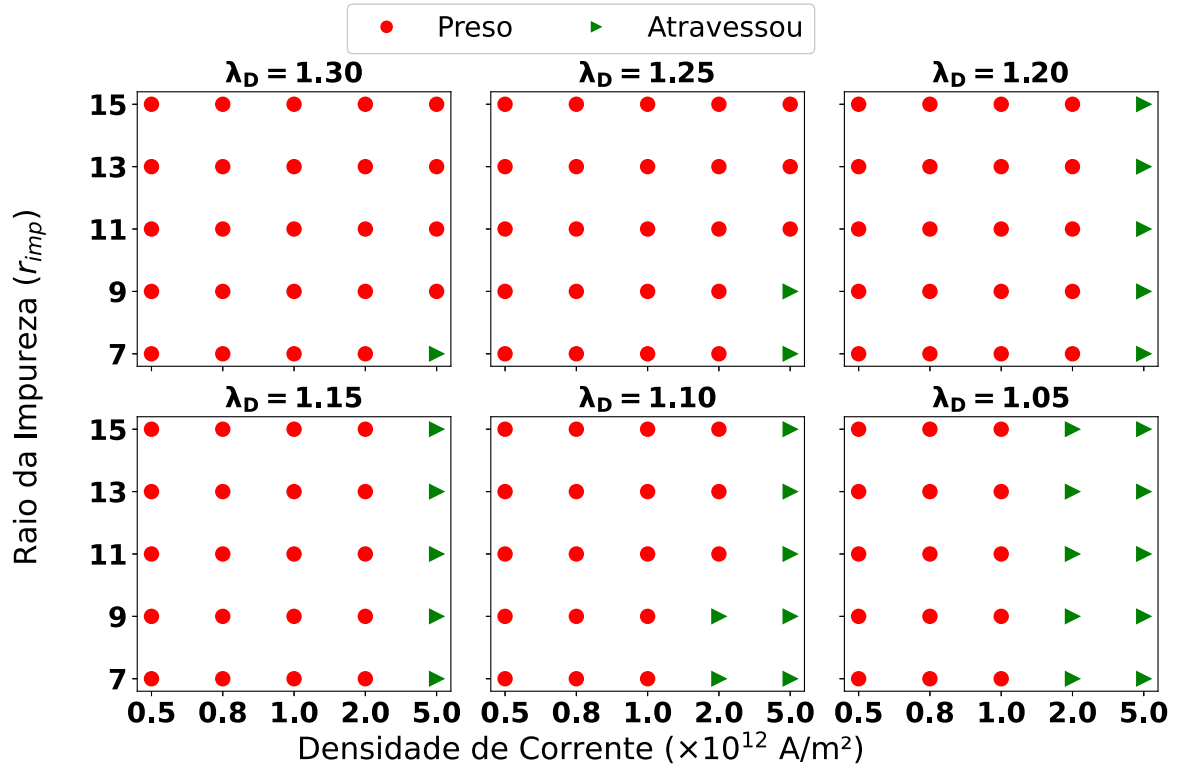


Figura 5.5 – Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde indica o cenário i e o círculo vermelho indica o cenário ii .

(a)



(b)

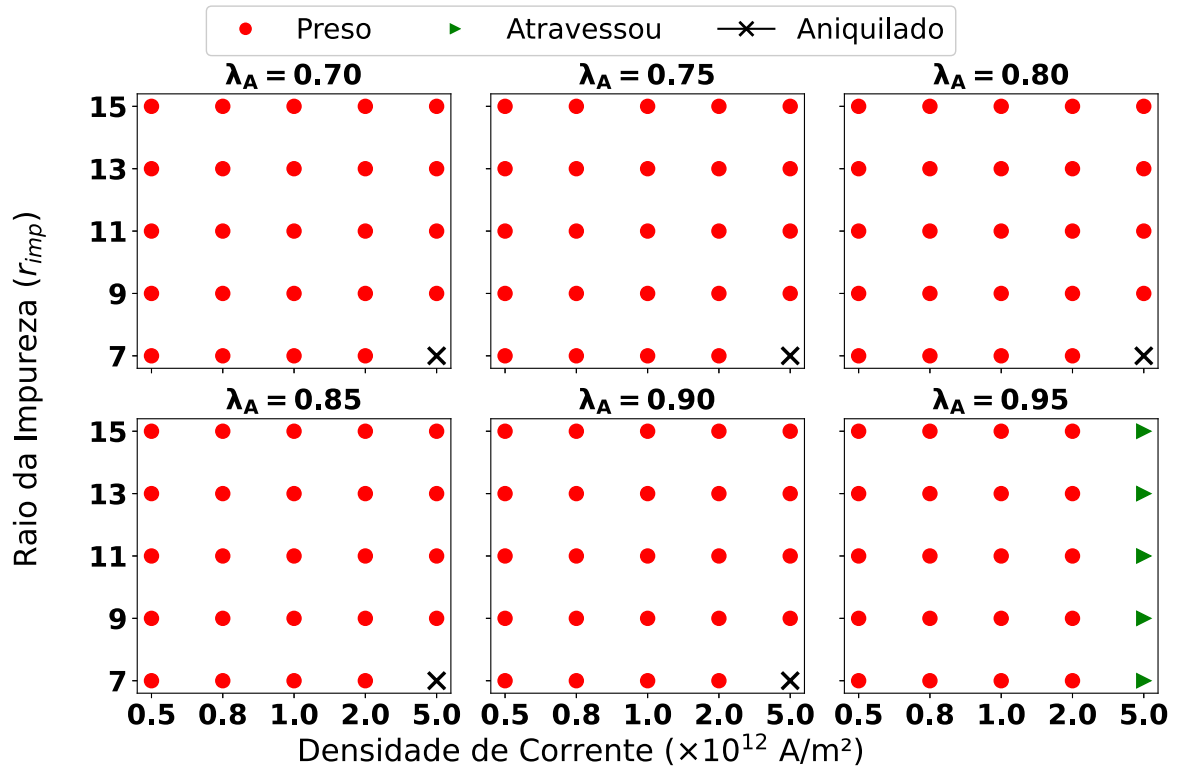


Figura 5.6 – Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_D e (b) λ_A . O triângulo verde representa o cenário *i*, o círculo vermelho representa o cenário *ii* e o símbolo *X* representa o cenário *iii*.

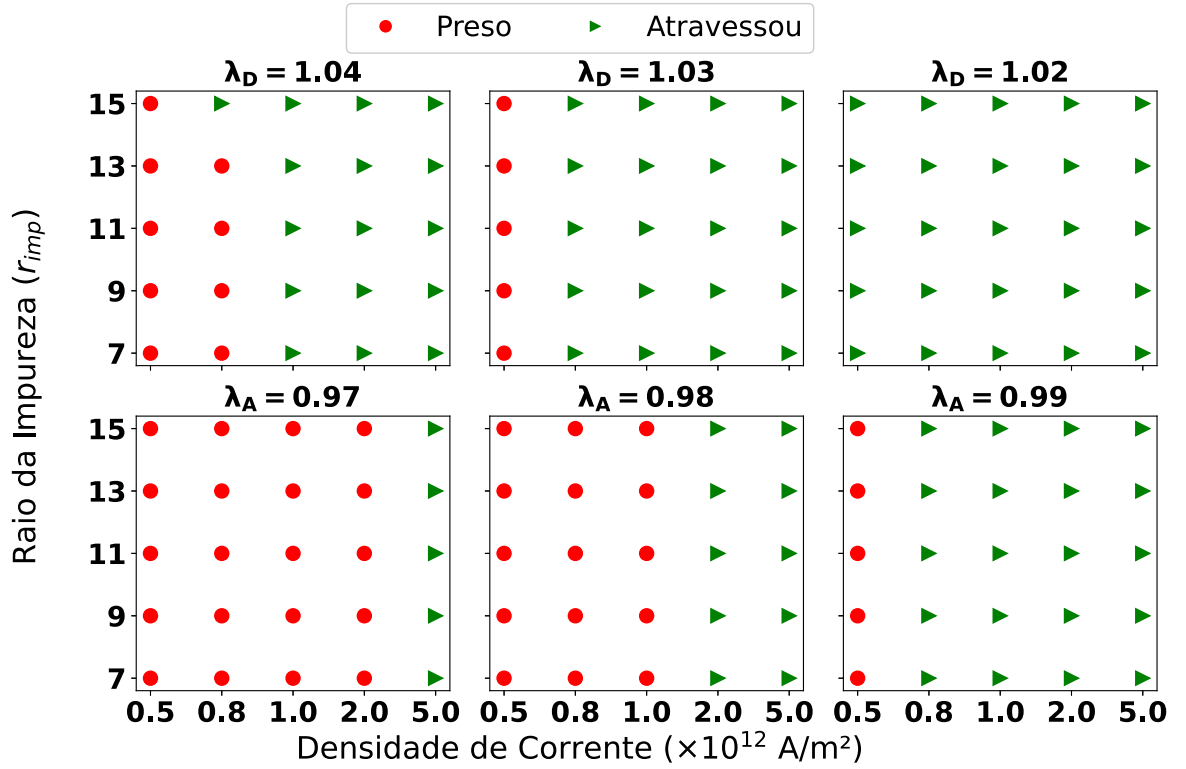


Figura 5.7 – Diagramas ilustrando os tipos de cenários que podem ocorrer em função tanto de r_{imp} quanto da densidade de corrente polarizada em spin, para diversos valores de λ_A e λ_D . O triângulo verde representa o cenário i e o círculo vermelho representa o cenário ii .

a ponto de inviabilizar a remoção do skyrmion por densidades de corrente convencionais. Observa-se que somente para $\lambda_A \geq 0.98$ é possível utilizar uma corrente inferior a $j_e = 5 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ para que o skyrmion atravessasse a impureza. Além disso, para $\lambda_D \leq 1.04$, observa-se um aumento dos casos do cenário i , indicando que a interação se enfraquece progressivamente, impedindo a fixação do skyrmion com as correntes utilizadas neste estudo. Em síntese, o diagrama evidencia que a manipulação do skyrmion é extremamente sensível a variações mínimas nos parâmetros do material. Pequenas alterações em λ_A e λ_D alteram decisivamente a interação skyrmion-impureza, impactando diretamente a eficácia da corrente aplicada para a remoção ou fixação do skyrmion.

5.2.2 Cenários para interação repulsiva

Nesta parte do trabalho, realizamos simulações buscando compreender a natureza da interação entre o skyrmion e impurezas repulsivas. Seguindo a mesma metodologia empregada na subseção anterior, adotamos variações sistemáticas nos parâmetros micro-magnéticos: λ_K , λ_A e λ_M foram considerados no intervalo de 1,0 a 1,30, com incrementos de 0,05, enquanto λ_D foi tomado em valores variando de 0,70 até 1,0, também em passos de 0,05.

Além dos três cenários já abordados (travessia, aprisionamento e aniquilação),

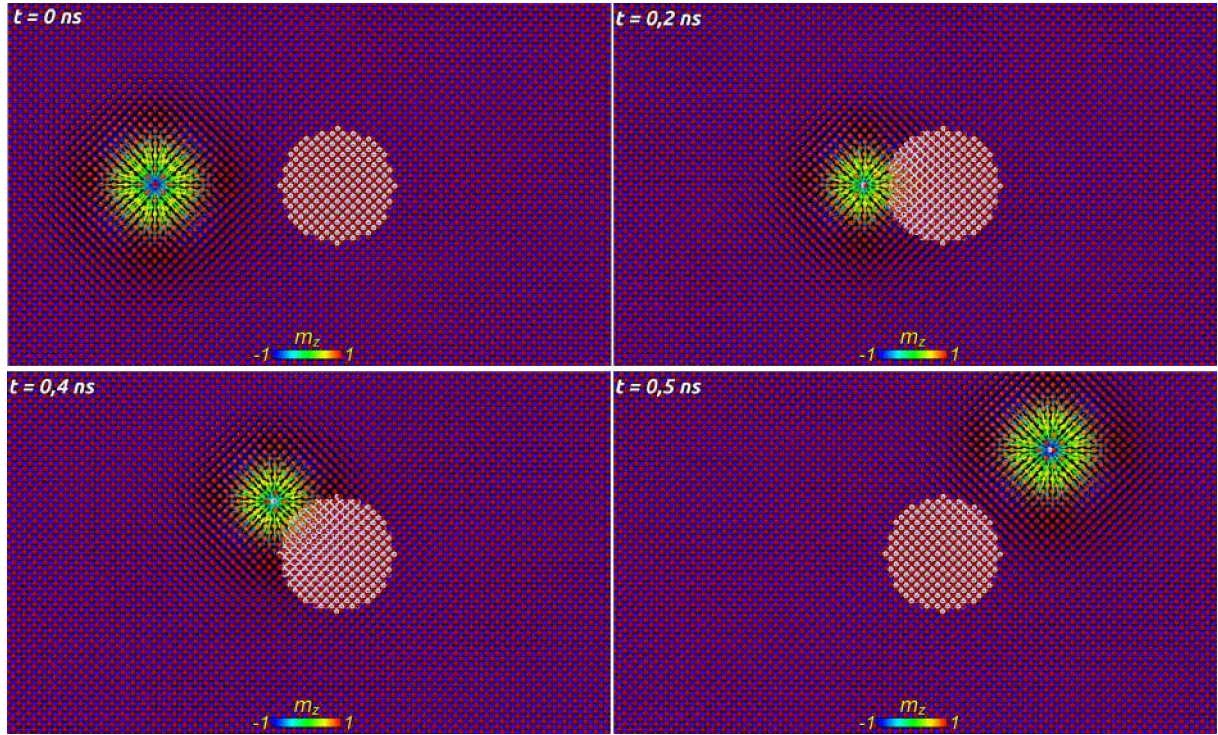


Figura 5.8 – Sequência ilustrativa do cenário *iv*. O skyrmion tem sua trajetória desviada pela impureza, devido à força de repulsão.

introduziremos um quarto cenário: o skyrmion é repelido pela impureza (cenário *iv*). Este comportamento ocorre para valores de λ_K , λ_A e $\lambda_M > 1.0$, tal como para $\lambda_D < 1.0$, onde as modificações desses parâmetros induzem uma região repulsiva para o skyrmion. No contexto desta análise, classificamos como cenário *iv*, somente aqueles casos em que o skyrmion não consegue adentrar a região de impureza, sendo desviado lateralmente para cima ou para baixo (veja Figura 5.8). Desta forma, os resultados das simulações são apresentados nos diagramas das Figuras 5.9 e 5.10. O cenário *iv* é representado nos diagramas pelo losango laranja.

Podemos notar que, apesar de estarmos agora tratando de impurezas repulsivas, casos do cenário *i* continuam presentes. A corrente aplicada consegue fornecer energia suficiente para que o skyrmion atravesse a impureza, vencendo a barreira de potencial imposta por ela. Estes casos estão presentes, majoritariamente, nas impurezas associadas aos parâmetros λ_K e λ_M . O que já era esperado, dado que são as modificações que induzem as interações com menores intensidades.

Após a aplicação da corrente polarizada em spin, o skyrmion abandona sua posição inicial e se desloca em direção à impureza. À medida que se aproxima, sua velocidade é reduzida até atingir o repouso. Neste momento, o skyrmion estará submetido à ação do torque gerado pela corrente aplicada e de uma força oposta, advinda da interação com a impureza repulsiva. Como resultado dessa competição de forças, há uma compressão da estrutura do skyrmion — associada a uma diminuição efetiva de r_{imp} — que o conduz a dois desfechos possíveis: cenário *iii* ou cenário *iv*. Na maioria das simulações realizadas, o

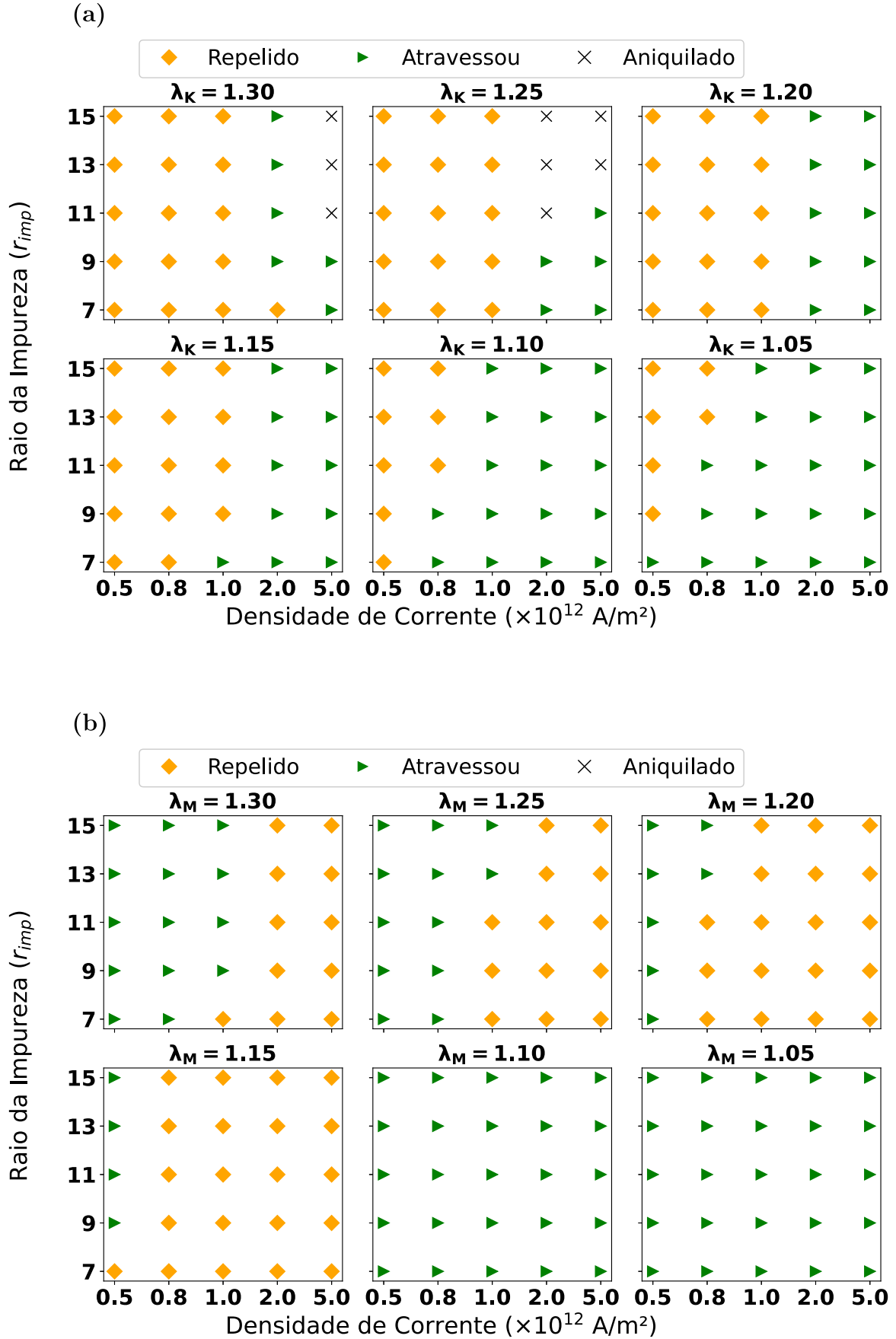


Figura 5.9 – Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde representa o cenário *i*, o símbolo X representa o cenário *iii* e o losango laranja representa o cenário *iv*.

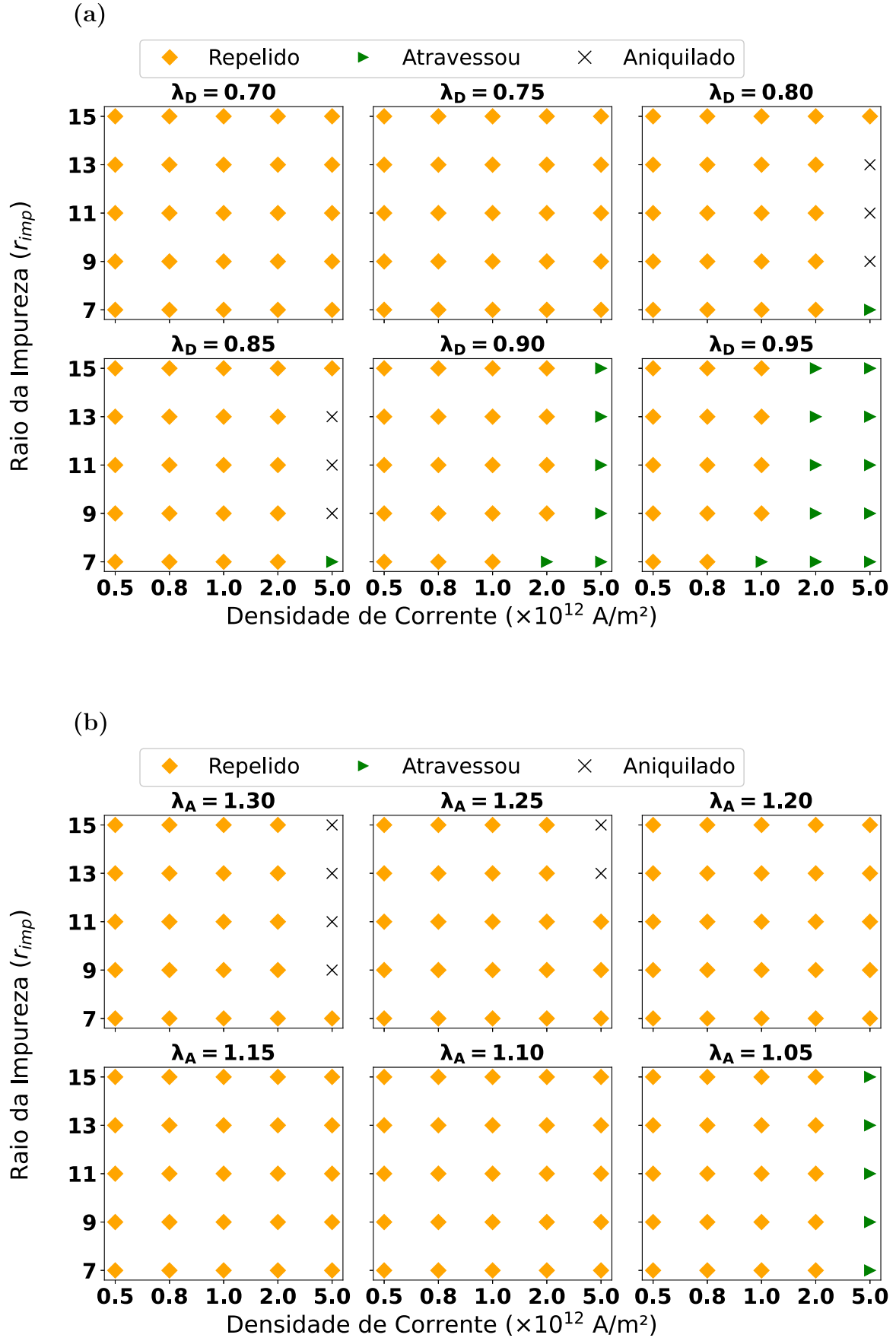


Figura 5.10 – Diagramas ilustrando os tipos de cenários da interação skyrmion-impureza em função de r_{imp} e da densidade de corrente polarizada em spin, para diferentes valores de (a) λ_K e (b) λ_M . O triângulo verde representa o cenário *i*, o símbolo X representa o cenário *iii* e o losango laranja representa o cenário *iv*.

cenário *iv* foi o mais frequente. Nesses casos, o skyrmion permanece sob a ação da corrente e da repulsão da impureza até que, por efeito de uma deformação assimétrica, a resultante das forças provoque seu desvio para cima ou para baixo. Porém, quando a densidade de corrente é elevada e a interação skyrmion-impureza é suficientemente forte, o skyrmion pode sofrer grandes deformações, reduzindo seu tamanho, o que pode culminar em sua aniquilação — como observado em alguns casos ilustrados nas Figuras 5.9.a e 5.10.

5.3 ENERGIA DE INTERAÇÃO SKYRMION-IMPUREZA

Utilizando a equação 5.1, foi possível calcular os perfis de energia da interação do skyrmion-impureza durante a dinâmica do skyrmion. A Figura 5.11 apresenta as curvas de energia de interação skyrmion-impureza para $\lambda_K = 0, 90$ e $r_{imp} = 11 \text{ nm}$, considerando as cinco densidades de corrente j_e utilizadas neste estudo. Os diferentes cenários de interação podem ser identificados diretamente a partir do formato dessas curvas. Nota-se que para $j_e \leq 1 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, o skyrmion fica retido na região de impureza, encerrando sua trajetória entre 8 e 12 nm no eixo x . Como a densidade de corrente é aplicada durante toda a simulação — exceto pelo tempo inicial de estabilização do skyrmion — essas variações da posição final podem ser atribuídas tanto ao tamanho da impureza quanto à intensidade da interação. Já para $j_e \geq 1 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, o skyrmion atravessa a impureza e continua seu percurso até o final da nanofita. Portanto, esses resultados revelam que, nos limites das densidades de corrente utilizadas neste trabalho, a profundidade do poço de potencial permanece invariável (veja Figura 5.11), indicando que a força entre o skyrmion e a impureza é independente da corrente aplicada.

A Figura 5.12 apresenta os perfis de energia de interação $U(x)$ obtidos para diferentes modificações nos parâmetros magnéticos: (a) λ_K com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$, (b) λ_M com $r_{imp} = 13 \text{ nm}$, (c) λ_D com $r_{imp} = 9 \text{ nm}$ e (d) λ_A com $r_{imp} = 7 \text{ nm}$. Todas as simulações foram realizadas com a mesma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$.

Observa-se que, ao entrar na região de impureza, o skyrmion deve ser submetido a uma força suficientemente forte — proveniente do torque induzido pela corrente aplicada — capaz de fazê-lo vencer a barreira de potencial induzida pela modificação de um parâmetro magnético. Uma vez no interior da impureza, o restante da nanofita agora age repulsivamente sobre ele. Desta forma, para cada configuração de impureza — isto é, para cada combinação entre o parâmetro magnético modificado e o raio da impureza — é possível identificar valores mínimos e máximos de energia de interação que indicam os cenários *i* e *ii*, conforme podemos observar na Figura 5.12.

A Figura 5.12.a evidencia uma separação bem definida entre os perfis de energia associados aos diferentes valores de λ_K . As curvas correspondentes aos casos do cenário *i* ($\lambda_K \geq 0, 80$) apresentam poços de potencial menos profundos do que os casos do cenário *ii*

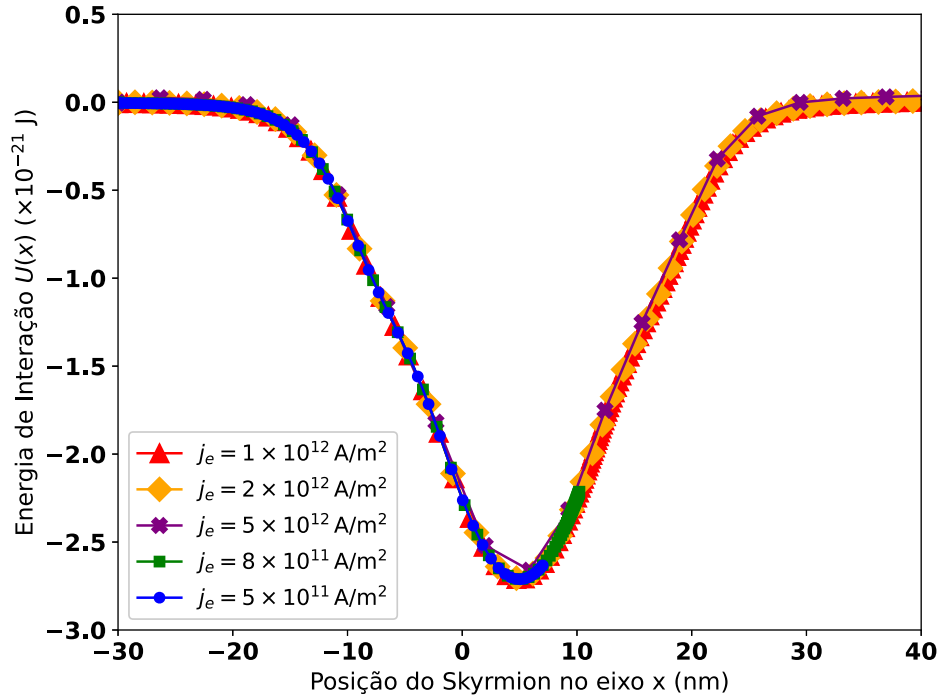


Figura 5.11 – Gráfico da Energia de interação skyrmion-impureza em função da posição do centro do skyrmion. O skyrmion é transportado por cinco diferentes densidades de corrente j_e em direção de uma impureza induzida pela modificação no parâmetro $\lambda_K = 0.90$ e com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$.

($\lambda_K \leq 0,75$). Essa diferença sugere a existência de um valor crítico de energia que separa, para cada tipo e tamanho de impureza, a ocorrência dos cenários *i* e *ii* em função da corrente aplicada.

A análise dos perfis de energia $U(x)$ realizada nesta subseção nos apresenta quantitativamente a influência da energia de interação em relação à dinâmica do skyrmion. No entanto, para melhor compreendermos os processos físicos que governam a dinâmica do skyrmion na presença de uma impureza magnética, é importante recorrer a uma descrição teórica complementar. Com os valores de $U(x)$, podemos determinar a força de interação skyrmion-impureza e compará-la com as previsões teóricas fornecidas pela equação de Thiele para AFM, validando os resultados até aqui obtidos.

5.4 ANÁLISE DA FORÇA DE INTERAÇÃO VIA EQUAÇÃO DE THIELE

A força entre o skyrmion e a impureza, derivada da energia de interação $U(x)$, será analisada e comparada com os resultados teóricos obtidos por meio da equação de Thiele para skyrmions AFM para demonstrar a validade do nosso modelo.

A partir da equação de Thiele para AFM na forma matricial (Equação 3.19), é possível obter, explicitamente, as equações correspondentes às componentes x e y . Assim,

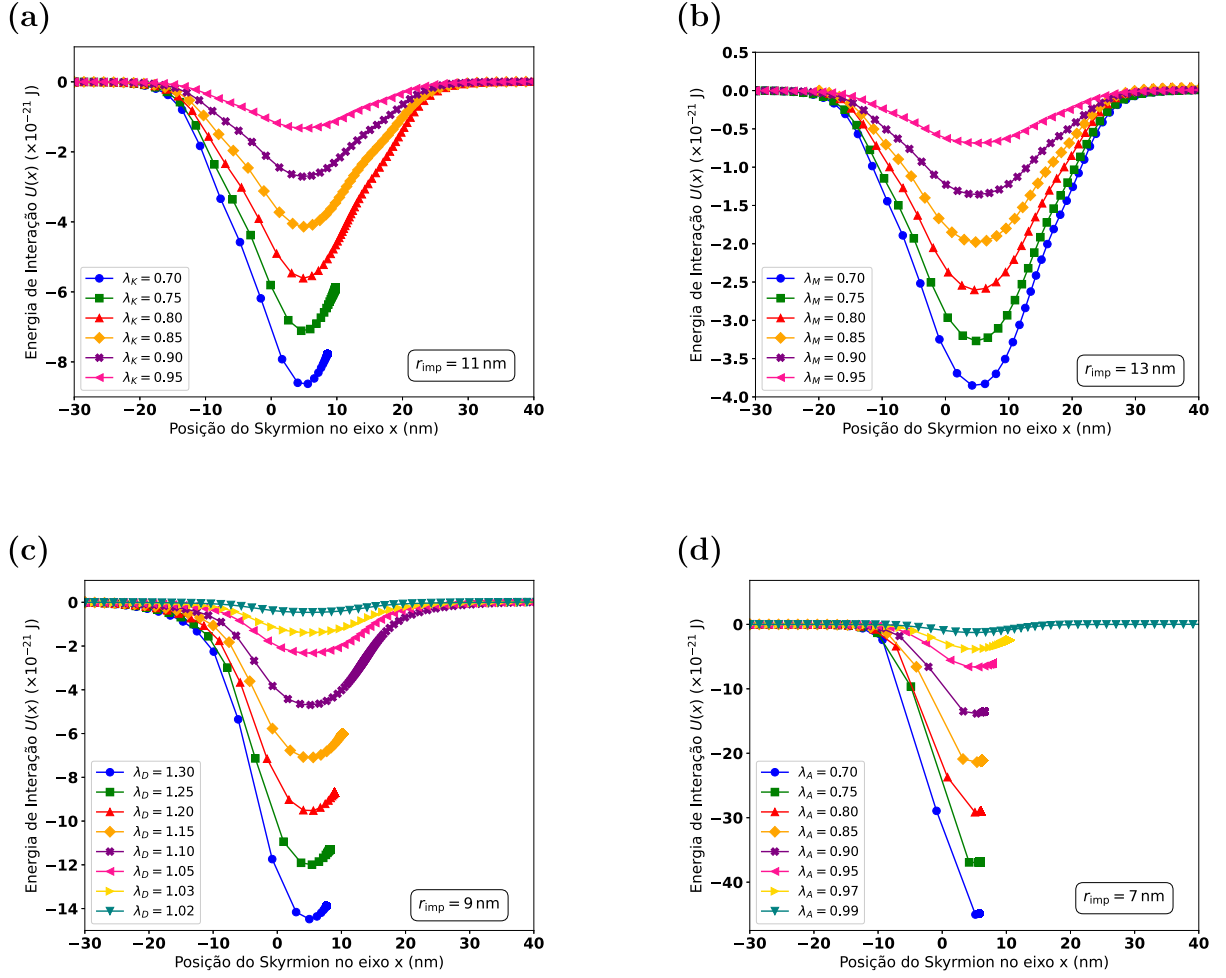


Figura 5.12 – Perfis de energia de interação $U(x)$ obtidos para diferentes modificações nos parâmetros magnéticos: (a) λ_K com $r_{imp} = 11$ nm, (b) λ_M com $r_{imp} = 13$ nm, (c) λ_D com $r_{imp} = 9$ nm e (d) λ_A com $r_{imp} = 7$ nm. Todas as simulações foram realizadas com densidade de corrente constante $j_e = 2 \times 10^{12}$ A/m².

temos:

$$D_{xx}(\beta u_x - \alpha v_x) - \frac{\gamma}{M_s a} F_x = 0 \quad (5.2)$$

$$D_{yy}(-\alpha v_x) - \frac{\gamma}{M_s a} F_y = 0. \quad (5.3)$$

Note que o vetor $\vec{u}$ possui somente componente na direção x ($\vec{u} = u\hat{x}$). Como temos duas equações independentes, podemos determinar diretamente as componentes da força de interação skyrmion-impureza $\vec{F}$:

$$F_x = -\frac{M_s a}{\gamma} D_{xx}(\beta u_x - \alpha v_x) \quad (5.4)$$

$$F_y = \frac{M_s a}{\gamma} D_{yy}(\alpha v_y) \quad (5.5)$$

Por outro lado, também podemos calcular o valor da força de interação pelo gradiente da energia U :

$$\vec{F}_{\text{int}} = -\nabla U(\vec{r}) = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}, \frac{\partial U}{\partial y}\right). \quad (5.6)$$

onde r é a distância entre o centro do skyrmion e o centro da impureza. Pela regra da cadeia, podemos escrever:

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{dU}{dr} \frac{\partial r}{\partial x}, \quad \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{dU}{dr} \frac{\partial r}{\partial y}. \quad (5.7)$$

Sabemos que $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, logo:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}, \quad (5.8)$$

e o gradiente da energia potencial pode ser escrito como:

$$\nabla U(\vec{r}) = \frac{dU}{dr} \left(\frac{x}{r} \hat{x} + \frac{y}{r} \hat{y} \right). \quad (5.9)$$

Desta forma, as componentes da força de interação serão dadas por:

$$\mathcal{F}_x = -\frac{dU}{dr} \frac{x}{r}, \quad (5.10)$$

$$\mathcal{F}_y = -\frac{dU}{dr} \frac{y}{r}. \quad (5.11)$$

Uma distinção importante deve ser feita entre os termos: utilizamos $\mathcal{F}_x$ e $\mathcal{F}_y$ para representar as componentes da força de interação obtidas pela derivada de $U(\vec{r})$, enquanto F_x e F_y denotam as componentes da força de interação obtidas pela equação de Thiele.

Com o objetivo de analisar quantitativamente os resultados obtidos nas simulações, desenvolvemos um código em linguagem *Fortran 90* com as seguintes funcionalidades:

1. calcular os valores de v_x e v_y por meio da derivada temporal da posição do skyrmion;
2. calcular os valores de D_{xx} e D_{yy} a partir da integral de área que define o tensor de dissipação (Equações 5.2 e 5.3);
3. calcular as componentes da força obtidas a partir da equação de Thiele (Equações 5.4 e 5.5);
4. calcular as componentes da força derivadas do gradiente da energia (Equações 5.10 e 5.11).

Os cálculos são realizados com base nos dados extraídos diretamente das simulações, e os resultados obtidos são apresentados a seguir. Vale ressaltar que a parte do código

destinada ao cálculo de D_{xx} e D_{yy} também foi utilizada em um estudo em colaboração, cujo desenvolvimento resultou no artigo "*The influence of curved surfaces on the propagation of skyrmions in a magnetic racetrack*"⁸⁰.

Como já discutido neste trabalho, o skyrmion AFM, ao ser movido por uma densidade de corrente, não apresenta deflexão em sua trajetória devido ao cancelamento da força de Magnus entre as sub-redes. Ao analisarmos a interação entre o skyrmion e uma impureza atrativa, podemos considerar que a força atrativa atua ao longo da linha que conecta o centro do skyrmion à impureza, de forma que $F_y = 0$. Portanto, o movimento do skyrmion é linear na direção x . A Figura 5.13 apresenta a componente x da força para dois casos: $\lambda_K = 0,80$ com $r_{imp} = 9 \text{ nm}$ e $\lambda_D = 1,05$ com $r_{imp} = 11 \text{ nm}$.

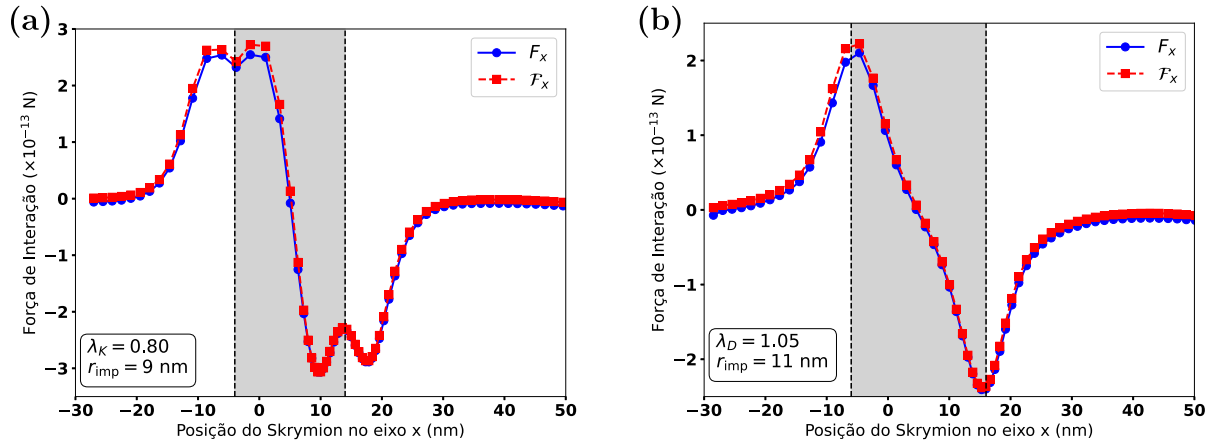


Figura 5.13 – Força F_x em função da posição do skyrmion ao longo do eixo x , considerando uma impureza do tipo (a) $\lambda_K = 0,80$ com raio $r_{imp} = 9 \text{ nm}$, e (b) $\lambda_D = 1,05$ com raio $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. A curva $\mathcal{F}_x$ representa dados obtidos por simulações numéricas, enquanto F_x corresponde à solução numérica derivada da equação de Thiele. A região cinza define os limites da impureza no eixo x .

A análise dos gráficos apresentados na Figura 5.13 corrobora as considerações feitas ao final da subseção anterior. Observa-se que a componente F_x é inicialmente positiva e cresce à medida que se aproxima dos limites da impureza (área sombreada). Ao adentrar essa região, F_x diminui gradativamente até se anular, quando o skyrmion atinge o centro da impureza. A partir desse ponto, uma força repulsiva surge e permanece até que o skyrmion a atravesse completamente, momento em que o movimento livre é retomado.

Os valores de D_{xx} e v_x correspondentes aos casos ilustrados na Figura 5.13, são apresentados na Figura 5.14. Conforme esperado, o valor de D_{xx} apresenta variações sutis quando o skyrmion atravessa a região da impureza. Como este parâmetro depende da distribuição espacial da magnetização, a interação com a impureza pode induzir deformações (distorção ou mudança de r_{imp}), alterando seu valor. Por outro lado, a velocidade é significativamente afetada pela presença da impureza: v_x aumenta conforme o skyrmion se aproxima da região — em razão da força atrativa —, mas diminui consideravelmente ao entrar na região interna da impureza.

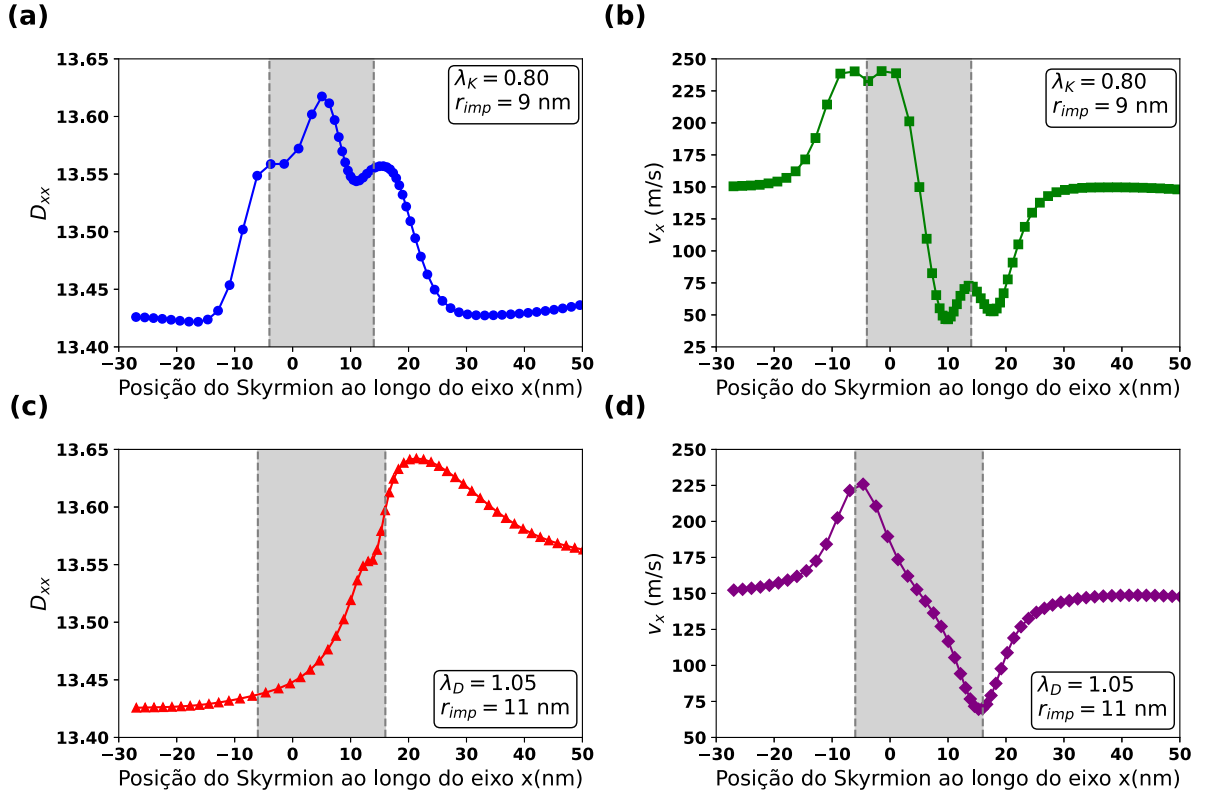


Figura 5.14 – (a) D_{xx} e (b) v_x em função da posição do skyrmion para uma impureza circular com $\lambda_K = 0,80$ e $r_{imp} = 9$ nm; (c) e (d) mostram as mesmas quantidades para $\lambda_D = 1,05$ e $r_{imp} = 11$ nm. A região cinza define os limites da impureza no eixo x .

Ainda no contexto das impurezas atrativas, a Figura 5.15 ilustra um caso característico do cenário *ii*, correspondente a $\lambda_D = 0.90$ e $r_{imp} = 11$ nm. O gráfico deixa evidente que a trajetória do skyrmion é interrompida no interior da impureza devido a uma força de interação com componente x negativa. O gráfico ilustra de forma clara um caso do cenário *ii*, em que a força atrativa não é superada pela corrente aplicada.

Após a análise das simulações envolvendo impurezas atrativas — onde a força de interação apresenta apenas componente longitudinal ($F_y = 0$) —, analisamos a força de interação com uma impureza de natureza repulsiva. Os gráficos da Figura 5.16 apresentam os perfis das componentes x e y da força de interação.

Inicialmente, o skyrmion se move em uma trajetória retilínea ao longo do eixo central vertical ($y = 0$), com $F_y = 0$ e $F_x < 0$. No entanto, a partir do momento em que o skyrmion é deslocado do eixo central vertical ($y \neq 0$), surge uma força transversal F_y desviando a trajetória do skyrmion, como ilustrado pela Figura 5.8.

O desvio lateral induzido por F_y reduz gradualmente a força repulsiva em x e, à medida que o skyrmion se afasta da região de influência da impureza, F_y decresce até se anular novamente, indicando o restabelecimento do movimento retilíneo.

A partir dos gráficos apresentados nesta subseção, observa-se que tanto os valores quanto o comportamento de $\mathcal{F}_x$ e $\mathcal{F}_y$ extraídos de nossas simulações reproduziram, de

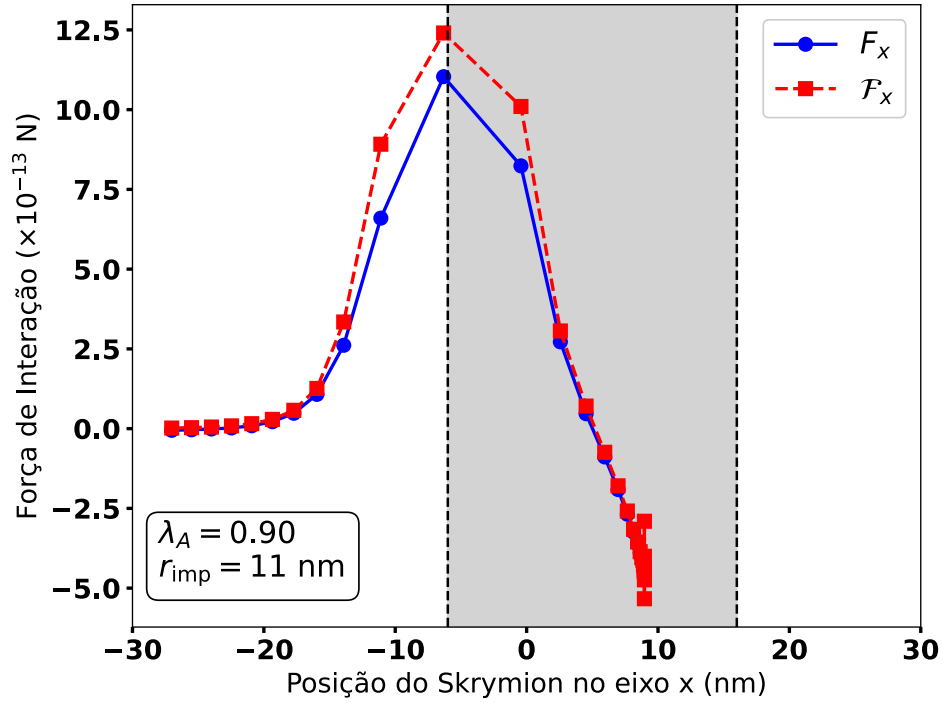


Figura 5.15 – Componente da força no eixo x para um caso do cenário *ii*: o skyrmion é aprisionado no interior da impureza para $\lambda_D = 0,90$ e $r_{imp} = 11$ nm. A trajetória é interrompida devido à força repulsiva predominante.

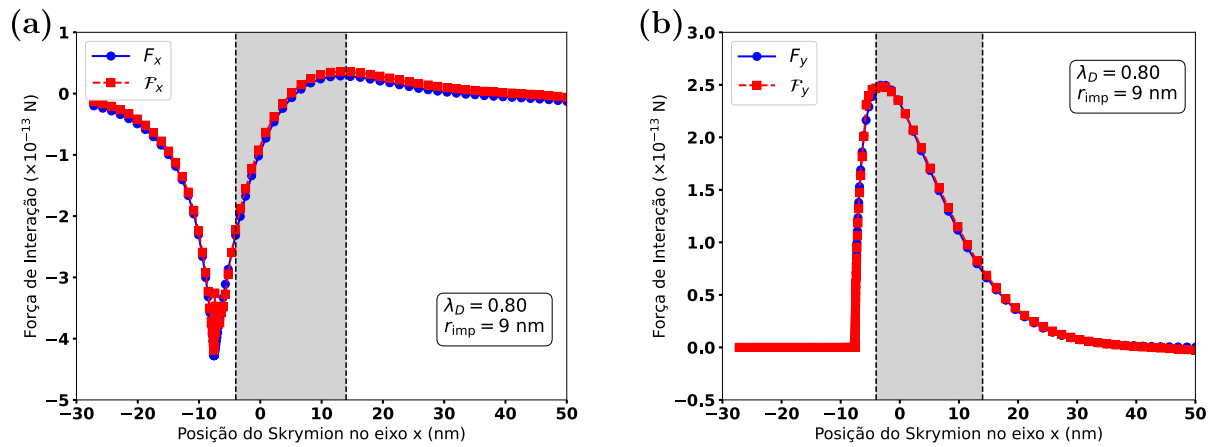


Figura 5.16 – Componentes a) x e b) y da força de interação entre o skyrmion e a impureza.

forma consistente, os resultados previstos pela equação de Thiele. A dinâmica obtida numericamente segue o mesmo padrão descrito analiticamente, reforçando a validade do modelo.

É importante destacar, contudo, que a equação de Thiele considera que as estruturas magnéticas estejam se movendo como uma partícula rígida. Desta forma, as pequenas diferenças encontradas entre os valores de $\mathcal{F}_x$ e F_x , e entre $\mathcal{F}_y$ e F_y podem ser justificadas pela alteração na dimensão do skyrmion devido à presença de uma impureza magnética localizada.

5.5 VARIAÇÃO DO RAIOS DO SKYRMION INDUZIDA POR IMPUREZAS MAGNÉTICAS

Para investigar a influência da presença de impurezas no tamanho do skyrmion, realizamos simulações em que o skyrmion e a impureza estão centralizados no centro da fita. Após um tempo suficiente para que o skyrmion atingisse sua configuração de equilíbrio, o raio do skyrmion r_{sk} foi medido. A Figura 5.17 apresenta a dependência de r_{sk} em relação ao tamanho da impureza, ao tipo de parâmetro magnético alterado e aos valores dos parâmetros λ_A , λ_K , λ_D e λ_M .

Os resultados indicam que o raio do skyrmion depende não apenas do parâmetro magnético alterado, mas também do tamanho da região modificada. Na Figura 5.17.(a), observa-se que para $r_{imp} = 7 \text{ nm}$, os valores de r_{sk} para $\lambda_K = 0,70$ quanto para $\lambda_K = 0,95$ são muito próximos. No entanto, com o aumento do raio da impureza, nota-se uma relação inversa entre r_{sk} e λ_K . O mesmo comportamento é observado para a modificação de λ_M , conforme ilustrado pela Figura 5.17.(b).

Por outro lado, o comportamento relacionado à λ_D , apresentado na Figura 5.17.(d), é inverso: r_{sk} aumenta com o crescimento de λ_D , o que já era esperado, dado que a IDM favorece a estabilização de skyrmions maiores.

A modificação de λ_A (Figura 5.17.(c)), apresenta um comportamento diferente⁹⁰. Para $r_{imp} = 7$ e 9 nm , o raio do skyrmion é menor para $\lambda_A = 0,70$, mas essa relação se inverte quando $r_{imp} \geq 11$. Esse comportamento pode ser interpretado sabendo que as interações baseadas na modificação do parâmetro A são as mais fortes, e sua modulação dentro de uma região circular introduz uma força repulsiva isotrópica. Quando o skyrmion está inteiramente dentro da região de impureza, todo o restante da nanofita age de forma repulsiva a ela, comprimindo-o. No entanto, com o aumento de r_{imp} , essa força se distribui espacialmente, tornando-se menos efetiva, o que permite a expansão do tamanho do skyrmion.

Esses resultados estão em consonância com estudos que analisam a influência de variações locais nos parâmetros magnéticos sobre a estrutura dos skyrmions. O

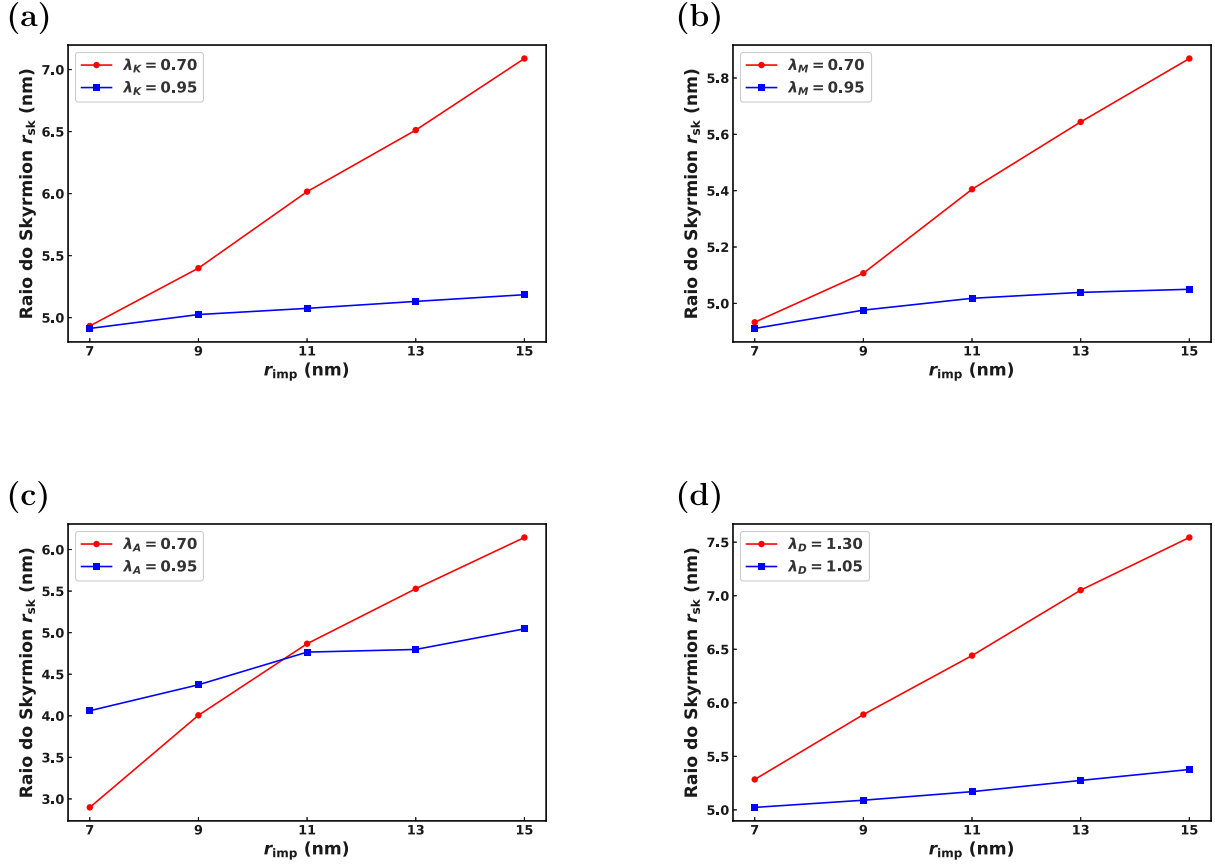


Figura 5.17 – Raio do skyrmion r_{sk} em função do raio da impureza r_{imp} , considerando diferentes modificações nos parâmetros de interação. Em cada painel, são apresentadas duas curvas correspondentes dois valores do parâmetro: (a) λ_K ; (b) λ_M ; (c) λ_A ; e (d) λ_D .

comportamento observado neste trabalho, em que r_{sk} aumenta em regiões com λ_D elevado e diminui com λ_K , λ_M ou λ_A maiores, está diretamente ligado ao comportamento do skyrmion que tende a minimizar sua energia em ambientes que favorecem sua expansão. Dessa forma, além de confirmar a relação entre os parâmetros locais e o tamanho do skyrmion, os resultados apresentados reforçam que o controle geométrico e magnético das regiões de impureza pode ser uma boa estratégia para a criação de dispositivos baseados em skyrmions AFMs.

5.6 MOVIMENTO ENTRE IMPUREZAS

Skyrmions magnéticos são fortes candidatos para aplicações em dispositivos de memória e lógica baseados em spintrônica. Uma das formas de explorar essas estruturas é por meio de sistemas binários que utilizam o controle posicional da quasipartícula. Para isso, pode-se criar armadilhas magnéticas em regiões específicas da nanofita. A presença ou ausência de um skyrmion nessas regiões pode determinar valores binários, por exemplo, 1 se o skyrmion estiver dentro da região de armadilha e 0 se estiver fora.

Para que o dispositivo funcione efetivamente, o skyrmion precisa ser extraído de uma impureza e transportado para outra. Isso exige que a densidade de corrente aplicada seja suficientemente forte para superar a barreira de potencial imposta pela armadilha e impulsionar o skyrmion em direção à outra região. Como pode ser visto nos diagramas das Figuras 5.5 e 5.6, uma densidade de corrente aplicada de $j_e = 5 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ pode ser utilizada para movimentar o skyrmion entre duas impurezas em quase todos os casos. No entanto, altas densidades de corrente podem gerar flutuações térmicas que podem causar a aniquilação espontânea dos skyrmions⁹¹. Portanto, vamos concentrar nossa análise em valores iguais ou inferiores a $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$. Com base nas informações apresentadas até aqui, nesta parte do trabalho apresentamos resultados que podem orientar a seleção de parâmetros para a construção de um dispositivo de memória magnética.

Considere, inicialmente, um skyrmion posicionado no centro de uma impureza, localizada em $x = -30 \text{ nm}$, que após a aplicação de uma corrente elétrica, desloca-se até atingir o centro da segunda impureza, localizada em $x = 30 \text{ nm}$ (veja Figura 5.18).

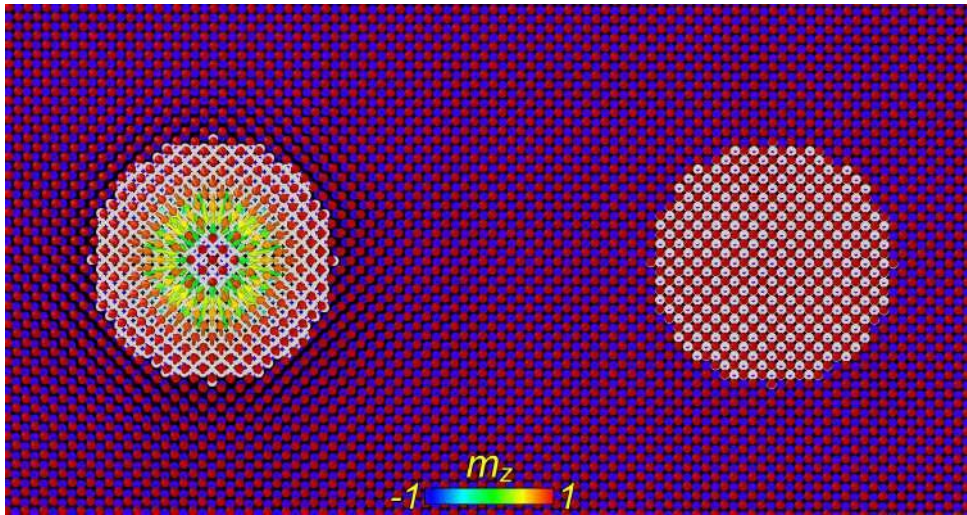


Figura 5.18 – Configuração inicial utilizada nas simulações: duas impurezas circulares separadas por 60 nm (centro a centro). O estado lógico de um bit (0 ou 1) é definido pela presença ou ausência do skyrmion em um desses sítios de impureza.

A Figura 5.19 ilustra alguns dos resultados obtidos por simulação, onde analisamos o tempo de percurso em função de r_{imp} . As simulações revelaram um tempo de deslocamento τ de aproximadamente $0,44 \text{ ns}$ para impurezas que exibem interação fraca com o skyrmion. Não houve variação significativa mesmo com o aumento de r_{imp} . Esse valor é ligeiramente superior ao tempo de deslocamento no caso sem impurezas, que é $\tau = (30 - (-30)) / u = 0,39 \text{ ns}$.

Para todos os valores de λ_M apresentados na Figura 5.19, a diferença em τ entre $r_{imp} = 7 \text{ nm}$ e $r_{imp} = 15 \text{ nm}$ é muito pequena, e não ultrapassa $0,01 \text{ ns}$. Por outro lado, impurezas com forte interação com skyrmion, como, por exemplo, $\lambda_K = 0,80$ apresentaram uma variação considerável em τ com o aumento de r_{imp} . Para $r_{imp} = 7 \text{ nm}$, obteve-se

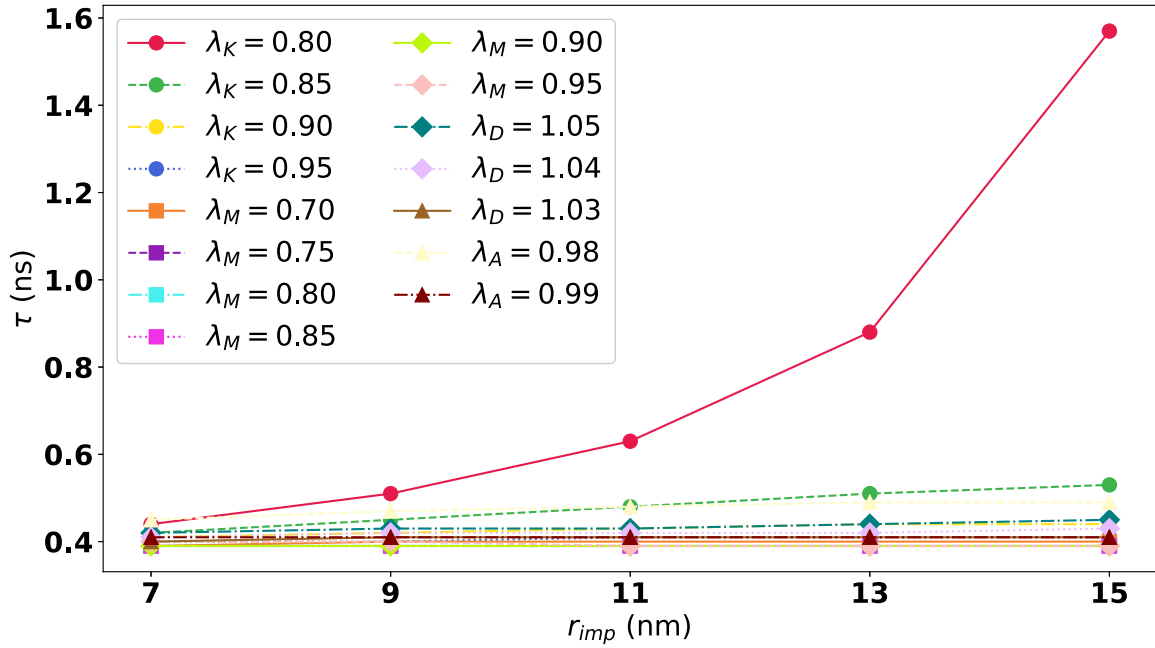


Figura 5.19 – Tempo de deslocamento de um skyrmion entre impurezas separadas por 60 nm (distância entre centros) em função do raio r_{imp} das impurezas, para diferentes valores de λ_K , λ_D , λ_A e λ_M . O skyrmion é impulsionado por uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12}$ A/m².

$\tau = 0,44$ ns, enquanto para $r_{imp} = 15$ nm, o tempo de deslocamento mais que triplicou, atingindo 1,57 ns.

Outra observação relevante é que, para esse grupo de impurezas, a maior parte do tempo de deslocamento do skyrmion corresponde à sua saída da região interna das armadilhas, devido à forte força repulsiva (veja Figura 5.20). Esse comportamento é claramente evidenciado no gráfico apresentado pela Figura 5.21, que mostra a posição do skyrmion em função do tempo para dois casos extremos analisados anteriormente (Figura 5.19): $\lambda_K = 0,80$ e $\lambda_M = 0,95$, ambos com $r_{imp} = 15$ nm. Nestas simulações, após o skyrmion permanecer em repouso por 0,2 ns, aplica-se um pulso de corrente de $j_e = 2 \times 10^{12}$ A/m², que o desloca até o centro da segunda impureza quando o pulso é desligado. Em seguida, após um novo intervalo de repouso de mesma duração, um segundo pulso de mesma magnitude, mas direção oposta, é aplicado, retornando o skyrmion à posição original. O tempo necessário para que o skyrmion escape da impureza é fortemente dependente do parâmetro modificado. Para $\lambda_K = 0,80$, o skyrmion leva cerca de 1,2 ns apenas para escapar da impureza devido à força repulsiva ao se encontrar em seu interior. Em contraste, para $\lambda_M = 0,95$, o tempo de escape é significativamente menor, cerca de 0,11 ns.

Embora interações fortes entre skyrmion e impureza permitam o controle posicional dos skyrmions, seu uso prático é limitado pelo aumento significativo no tempo de deslocamento — uma limitação crucial para dispositivos de memória de alta velocidade. Por outro

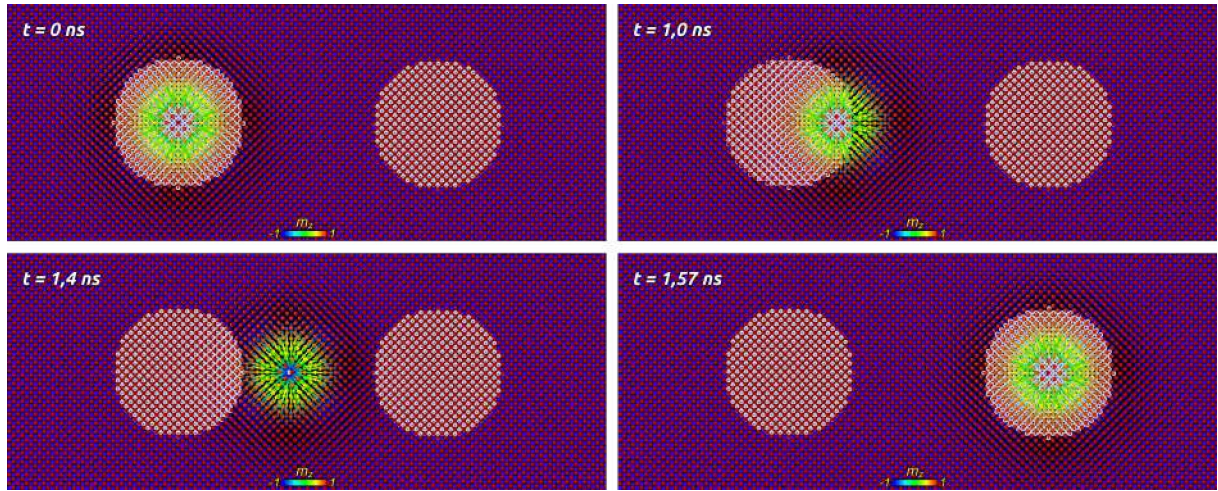


Figura 5.20 – Sequência ilustrativa da dinâmica do skyrmion em um dispositivo com duas impurezas com $\lambda_K=0,80$ e $r_{imp} = 15 \text{ nm}$. A maior parte do tempo de deslocamento é consumida na saída do skyrmion da região interna das armadilhas, devido à intensa força atrativa exercida pelas impurezas.

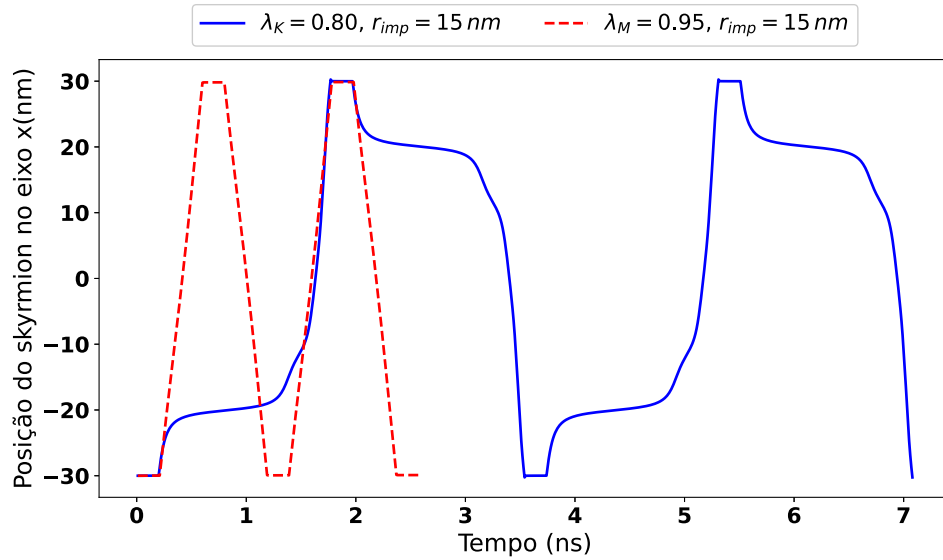


Figura 5.21 – Posição do skyrmion em função do tempo para dois casos: $\lambda_K = 0,80$ e $\lambda_M = 0,95$, ambos com $r_{imp} = 15 \text{ nm}$. O skyrmion inicia em repouso na posição $x = -30 \text{ nm}$, dentro de uma impureza, e após $0,2 \text{ ns}$ recebe um pulso de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, que o leva até a impureza localizada em $x = 30 \text{ nm}$. O pulso é então desligado, e o skyrmion permanece em repouso por mais $0,2 \text{ ns}$, até que um novo pulso, de mesma magnitude e direção oposta, o retorna à posição inicial.

lado, interações fracas possibilitam posicionamento preciso, mas exigem a interrupção exata da densidade de corrente assim que o skyrmion atinge o centro da impureza, a fim de evitar ultrapassagens.

5.7 COMBINAÇÃO

Todas as informações apresentadas até aqui destacam a importância da escolha adequada dos parâmetros λ_K , λ_M , λ_D e λ_A . A partir dos diagramas das Figuras 5.5, 5.6 e 5.7, vimos que, para determinado grupo de resultados, é necessário utilizar altas densidades de corrente para se obter casos do cenário *i*. Já na última seção, verificamos que impurezas que exibem forte interação skyrmion-impureza aumentam o tempo de deslocamento entre armadilhas. Porém, quando se trata do desenvolvimento de novos dispositivos, há uma necessidade de encontrar soluções que demandem baixo consumo de energia e que sejam cada vez mais rápidas. Portanto, nesta parte do trabalho, buscamos encontrar maneiras de contornar esses problemas.

Inicialmente, verificamos que a energia de interação $U(x)$ pode ser alterada quando realizamos diferentes modificações nos parâmetros magnéticos simultaneamente. Os gráficos da Figura 5.22, apresentam três diferentes situações onde modificamos dois parâmetros magnéticos ao mesmo tempo.

A Figura 5.22.a ilustra o que denominamos de uma modificação do tipo atrativo-atrativo, isto é, uma modificação simultânea de dois parâmetros que induzem interações atrativas quando modificados isoladamente — são os casos $\lambda_K, \lambda_M, \lambda_A < 1, 0$ e $\lambda_D > 1, 0$. Neste caso específico, podemos observar as curvas de energia $U(x)$ para $\lambda_K = 0.80$, $\lambda_M = 0.85$ e λ_{KM} representando a modificação combinada desses parâmetros. Verifica-se um aumento significativo entre as intensidades de interação λ_{KM} em comparação com as modificações isoladas de λ_K e λ_M . Já na Figura 5.22.b, podemos analisar o perfil das curvas de energia $U(x)$ para $\lambda_K = 1.05$, $\lambda_M = 1.10$ e λ_{KM} também como a combinação destas duas modificações. Essa modificação do tipo repulsivo-repulsivo, de forma análoga ao que vimos anteriormente, também nos mostra um aumento na intensidade da interação entre o skyrmion e a impureza, de forma que λ_{KM} , apresenta uma energia de interação repulsiva maior do que as modificações isoladas de λ_K e λ_M .

Verifica-se então que há uma possibilidade de ajustar a intensidade da interação $U(x)$ modificando dois parâmetros de forma simultânea, e isso pode ser utilizado para contornar fatores que podem ser desfavoráveis para aplicações práticas. Diante disso, na Figura 5.22.c podemos analisar as curvas de energia para uma modificação do tipo atrativo-repulsivo. A modificação do parâmetro $\lambda_D = 1, 10$, como pode ser observado, representa uma interação skyrmion-impureza de natureza repulsiva. Por outro lado, $\lambda_D = 1.10$ exibe um comportamento atrativo. Quando utilizamos λ_{KD} , podemos verificar graficamente que

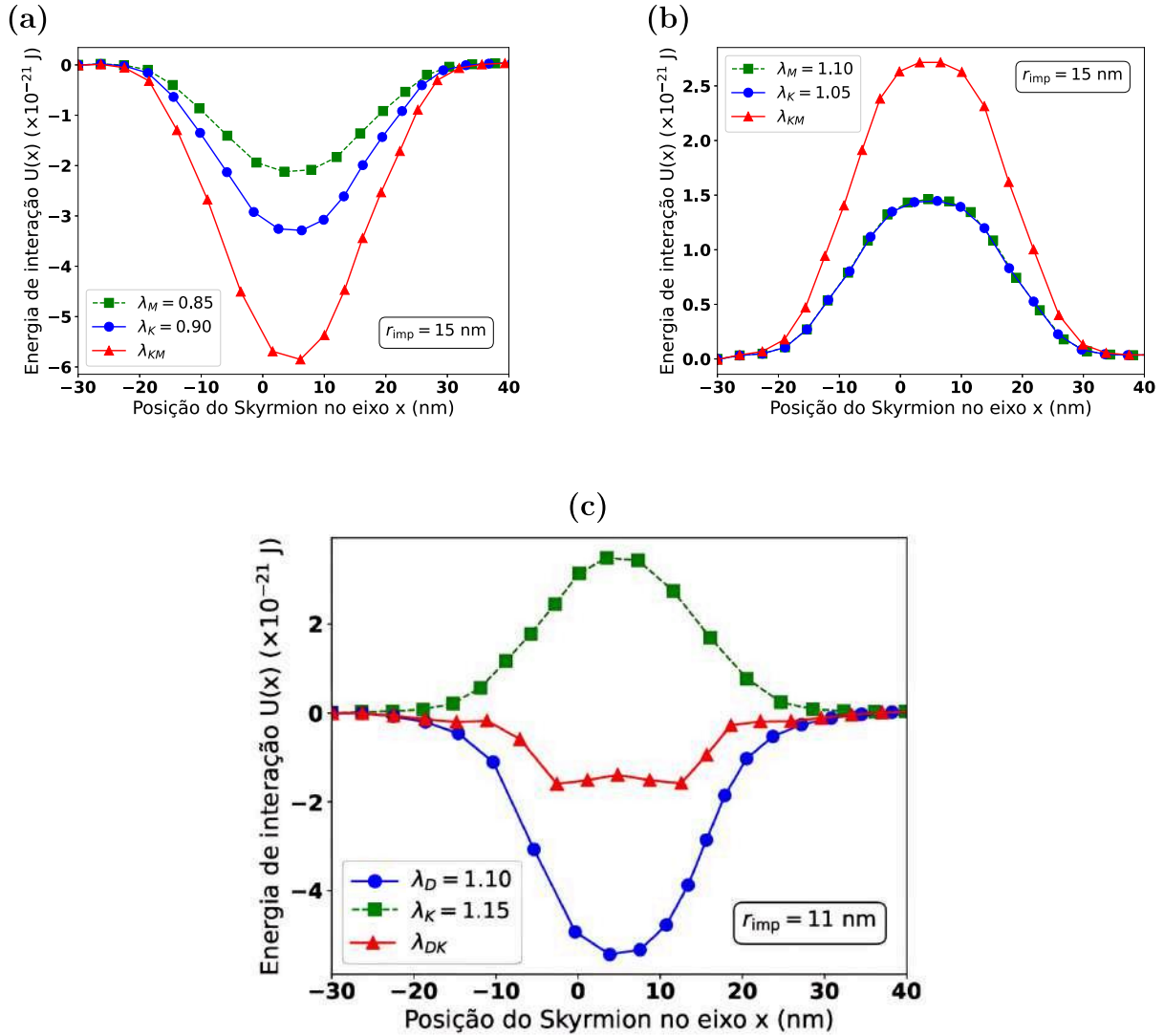


Figura 5.22 – Perfis de energia de interação $U(x)$ para diferentes combinações de parâmetros magnéticos modificados simultaneamente. (a) Modificação do tipo atrativo-a atrativo: combinação dos parâmetros $\lambda_K = 0,80$ e $\lambda_M = 0,85$, resultando em uma interação mais intensa no caso combinado λ_{KM} . (b) Modificação do tipo repulsivo-repulsivo: combinação de $\lambda_K = 1,05$ e $\lambda_M = 1,10$, cuja soma de efeitos também intensifica a repulsão em λ_{KM} . (c) Modificação do tipo atrativo-repulsivo: combinação de $\lambda_K = 1,15$ (atrativo) e $\lambda_D = 1,10$ (repulsivo), representada por λ_{DK} , a qual resulta em uma energia de interação global reduzida.

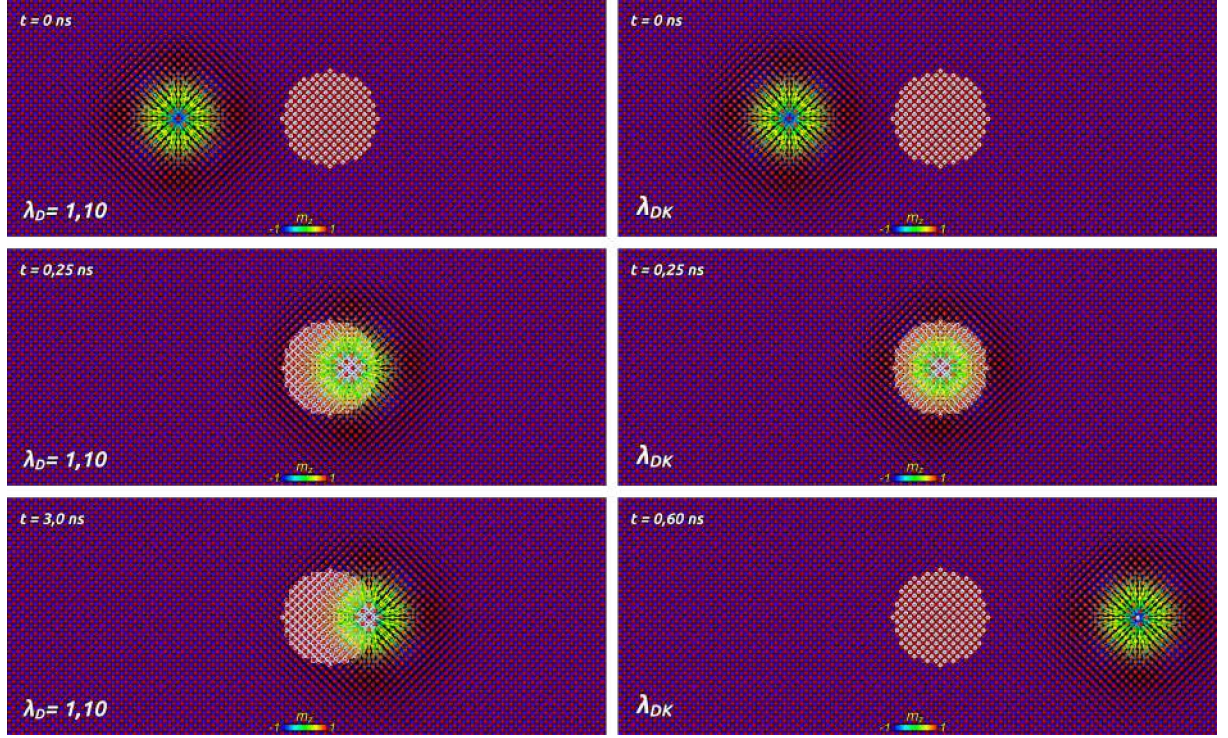


Figura 5.23 – Sequência ilustrativa da dinâmica do skyrmion para dois casos distintos: À esquerda, observa-se um exemplo do cenário *ii*, correspondente a uma impureza puramente atrativa com $\lambda_D = 1,10$ e raio $r_{imp} = 11 \text{ nm}$. À direita, um caso do cenário *i* para uma impureza com modificação do tipo atrativo-repulsivo, representada por λ_{DK} , resultante da modificação combinada dos parâmetros $\lambda_D = 1,10$ e $\lambda_K = 1,15$ mantendo-se o mesmo valor de r_{imp} . Em ambas as simulações, foi aplicado uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$.

a energia de interação $U(x)$ diminui.

Uma maneira de visualizar os efeitos práticos da modificação dos parâmetros da interação é por meio dos diagramas apresentados na Figura 5.6. Para $\lambda_D = 1,10$ e $r_{imp} = 11 \text{ nm}$, observa-se um caso correspondente ao cenário *ii* quando aplicada uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$. Contudo, ao realizar a modificação combinada representada por λ_{KD} , conforme discutido no parágrafo anterior, o cenário da interação é alterado. Nessa nova configuração, o skyrmion é capaz de atravessar a impureza sob a mesma densidade de corrente j_e , o que anteriormente não era possível. Essa mudança de cenário é ilustrada na Figura 5.23.

É importante destacar que certas combinações do tipo atrativo-repulsivo podem induzir à aniquilação do skyrmion, principalmente aquelas em que as intensidades de interação são elevadas — como nos casos de $\lambda_A = 0,70$ (fortemente atrativo) e $\lambda_D = 0,70$ (fortemente repulsivo). Nesse contexto, modificações mais sutis, como as que apresentaremos, mostram-se mais eficazes por manterem a estabilidade da estrutura magnética e ainda possibilitarem o controle sobre sua dinâmica.

Neste parte do trabalho, trataremos apenas dos casos onde buscamos a diminuição da energia de interação, isto é, a modificação simultânea do tipo atrativo-repulsivo voltado

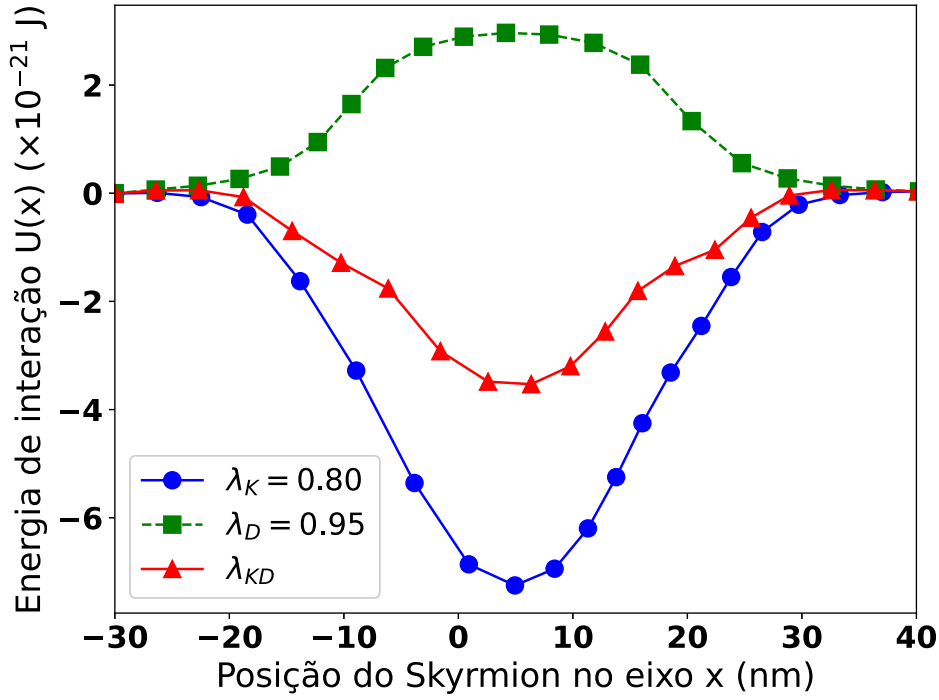


Figura 5.24 – Energia de interação entre o skyrmion e a impureza em função de x . Neste caso, escolhemos $r_{imp} = 15 \text{ nm}$ e a posição inicial em $x = 5 \text{ nm}$. A curva com marcadores circulares corresponde a $\lambda_K = 0,80$ (impureza atrativa), a curva com marcadores quadrados corresponde a $\lambda_D = 0,95$ (impureza repulsiva), e a curva com marcadores triangulares foi obtida por meio da modificação simultânea de ambos os parâmetros, resultando em uma impureza atrativa.

para aplicações práticas em armadilhas de skyrmions. Os demais casos, apesar de não serem tratados a fundo nesta seção, podem ser utilizados, por exemplo, quando há a necessidade de dispersão ou aniquilação de skyrmions.

Buscamos fazer modificações simultâneas do tipo atrativo-repulsivo que possam melhorar o desempenho de dispositivos baseados em armadilhas de skyrmions. Na Figura 5.24, apresentamos três curvas de energia de interação skyrmion-impureza: uma correspondente à variação de $\lambda_K = 0,80$, outra para $\lambda_D = 0,95$, e uma terceira, rotulada como λ_{KD} , representando a modificação combinada desses parâmetros.

Como mostrado na Figura 5.18, impurezas com $\lambda_K = 0,80$ apresentaram o maior tempo de deslocamento τ , indicando uma interação atrativa intensa. Por outro lado, impurezas com $\lambda_D = 0,95$ exibiram comportamento repulsivo. Ao ajustar simultaneamente esses dois parâmetros, obtemos uma nova impureza atrativa cuja energia de interação é significativamente menor do que no caso isolado com λ_K (ver Figura 5.24).

A Figura 5.25 mostra o tempo de deslocamento entre impurezas com parâmetros modificados em função do raio da impureza. Observa-se uma redução significativa no tempo de deslocamento em comparação com o caso de $\lambda_K = 0,80$, especialmente para raios maiores de impureza (ver Figura 5.19). Por exemplo, para $r_{imp} = 15 \text{ nm}$, o tempo de deslocamento diminui de $\tau = 1,57 \text{ ns}$ para $\tau = 0,49 \text{ ns}$ quando se utiliza a combinação

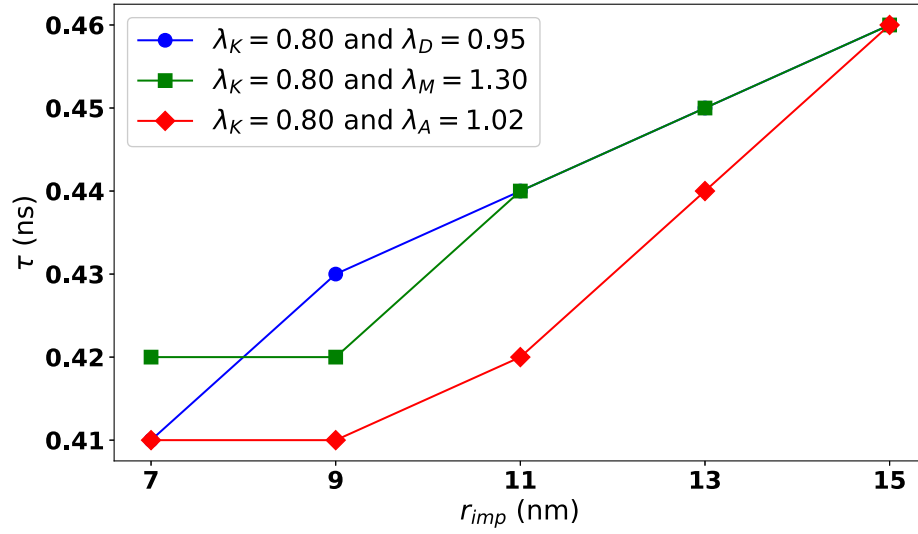


Figura 5.25 – Tempo de deslocamento de um skyrmion entre duas impurezas separadas por 60 nm (distância de centro a centro) em função de r_{imp} . Foi aplicada uma densidade de corrente $j_e = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ para mover o skyrmion. As curvas correspondem a diferentes combinações de parâmetros: $\lambda_K = 0,80 + \lambda_D = 0,95$, $\lambda_K = 0,80 + \lambda_M = 1,30$, e $\lambda_K = 0,80 + \lambda_A = 1,02$.

com $\lambda_D = 0,95$.

Esses resultados demonstram a possibilidade de controlar eficientemente a interação skyrmion-impureza por meio de combinações estratégicas dos parâmetros λ_K , λ_M , λ_D e λ_A , superando, assim, as limitações impostas por impurezas com forte interação. Consequentemente, essa abordagem permite um controle significativo sobre o tempo de deslocamento entre armadilhas, um parâmetro-chave para aplicações em dispositivos de gravação magnética.

Capítulo 6

CONCLUSÃO

Neste trabalho, investigamos a interação de skyrmions antiferromagnéticos com impurezas magnéticas modeladas por meio da modificação local dos parâmetros K , M , D e A . Considerando a implementação desses sistemas em dispositivos spintrônicos, torna-se essencial garantir o aprisionamento controlado dos skyrmions em posições predeterminadas, garantindo operações de leitura confiáveis.

Este estudo demonstra que é possível obter controle posicional de skyrmions em uma nanofita por meio do ajuste do raio da impureza e dos parâmetros magnéticos λ_K , λ_M , λ_D e λ_A , ou ainda pela combinação desses parâmetros. É importante mencionar que a metodologia utilizada é aplicável a qualquer material antiferromagnético, uma vez que as interações magnéticas que governam a atração e repulsão são inteiramente determinadas pelas razões expressas na equação 4.28 — o que pode ser verificado no Apêndice C.

Nossas análises permitiram identificar, por meio das razões entre os parâmetros magnéticos locais e os do material anfitrião, as condições em que as modificações introduzidas geram impurezas atrativas ou repulsivas sobre os skyrmions. Além disso, a análise dos resultados possibilitou quantificar a intensidade relativa da interação skyrmion-impureza associada a cada parâmetro magnético. Verificamos que, em ordem crescente, as razões seguem a hierarquia: $\lambda_M < \lambda_K < \lambda_D < \lambda_A$, indicando que as variações no parâmetro A produzem os efeitos mais intensos sobre a dinâmica dos skyrmions.

Os diagramas de fase revelam uma gama de configurações otimizadas que asseguram o posicionamento estável dos skyrmions. Através deles, verificamos que as interações do tipo λ_A e λ_D , necessitam de correntes mais altas para conseguirem retirar o skyrmion de dentro da impureza. Também verificamos que as modificações em λ_M podem ser facilmente retiradas do interior da armadilha. Todas as informações obtidas nos diagramas auxiliam na escolha de parâmetros para aplicações reais.

Por meio dos gráficos da energia de interação, foi demonstrado que a interação entre skyrmions AFM e impurezas magnéticas pode ser compreendida quantitativamente por meio de $U(x)$ e da força associada, a qual foi comparada com a previsão analítica da equação de Thiele para sistemas antiferromagnéticos. Os resultados obtidos revelam uma concordância entre as abordagens numérica e teórica, validando o modelo proposto, inclusive em cenários onde ocorrem deformações na textura magnética. Também foi observado que o raio do skyrmion sofre variações em função do tipo de impureza, do parâmetro magnético modificado e do tamanho da impureza.

Verificamos que interações skyrmion-impureza excessivamente intensas podem

comprometer o desempenho do dispositivo, aumentando significativamente o tempo de deslocamento devido aos efeitos repulsivos durante a liberação do skyrmion das armadilhas. Para isso, propomos uma solução baseada em uma combinação ajustada de parâmetros de impureza atrativos e repulsivos, que se mostrou particularmente eficaz para superar essa limitação, reduzindo consideravelmente o tempo de deslocamento.

Os resultados apresentados fornecem diretrizes para o desenvolvimento de dispositivos de gravação magnética, possibilitando não somente maior precisão no controle posicional dos skyrmions, mas também a otimização dos tempos de transição entre sítios de armazenamento — fator crítico para aplicações práticas. Parte desses resultados foi publicada no trabalho intitulado "*Magnetic impurity engineering for positional control of antiferromagnetic skyrmions in logic devices applications*" (DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0283786>).

Como perspectivas futuras, o próximo passo é investigar a influência das excitações térmicas na interação skyrmion-impureza, uma vez que a presença de flutuações na temperatura pode modificar significativamente tanto a estabilidade quanto a mobilidade dos skyrmions, impactando diretamente o aprisionamento controlado e o tempo de deslocamento entre impurezas. Além disso, outra etapa da pesquisa é a simulação de mecanismos de leitura em dispositivos baseados em skyrmions antiferromagnéticos, em especial por meio de junções túnel magnéticas (MTJ), visando avaliar o tempo de detecção dessas quasipartículas em condições reais de operação. Tais investigações complementarão os resultados apresentados neste trabalho, fornecendo informações importantes para o avanço rumo à implementação prática de dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions AFM.

REFERÊNCIAS

- ¹ BAILEY, M. J.; DUONG, J. T.; HELMS, B. A. Research spotlight: Delivery of custom-purposed colloidal nanocrystals to cancer cells. *Therapeutic delivery*, Future Science, v. 3, n. 9, p. 1041–1045, 2012.
- ² GUIMARÃES, A. P. *Principles of nanomagnetism*. [S.l.]: Springer, 2009. v. 7.
- ³ BAIBICH, M. N. et al. Giant magnetoresistance of (001) fe/(001) cr magnetic superlattices. *Physical review letters*, APS, v. 61, n. 21, p. 2472, 1988.
- ⁴ ZHANG, B. *Physical fundamentals of nanomaterials*. [S.l.]: William Andrew, 2018.
- ⁵ YANG, S.; ZHANG, J. Current progress of magnetoresistance sensors. *Chemosensors*, v. 9, n. 8, 2021. ISSN 2227-9040. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2227-9040/9/8/211>>.
- ⁶ KUMAR, D. et al. Domain wall memory: Physics, materials, and devices. *Physics Reports*, Elsevier, v. 958, p. 1–35, 2022.
- ⁷ PARKIN, S. S.; HAYASHI, M.; THOMAS, L. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 320, n. 5873, p. 190–194, 2008.
- ⁸ BOGDANOV, A. N.; YABLONSKII, D. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. the mixed state of magnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 95, n. 1, p. 178, 1989.
- ⁹ STEFANOVICH, V. et al. Two-dimensional small-radius solitons in magnets. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 64, n. 2, p. 376, 1986.
- ¹⁰ IVANOV, B.; STEPHANOVICH, V.; ZHMUDSKII, A. Magnetic vortices: The microscopic analogs of magnetic bubbles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 88, n. 1-2, p. 116–120, 1990.
- ¹¹ MUHLBAUER, S. et al. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 323, n. 5916, p. 915–919, 2009.
- ¹² ROMMING, N. et al. Writing and deleting single magnetic skyrmions. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 341, n. 6146, p. 636–639, 2013.
- ¹³ MISHRA, K. K. et al. Magnetic skyrmion: from fundamental physics to pioneering applications. *Applied Physics Reviews*, AIP Publishing, v. 12, n. 1, 2025.
- ¹⁴ BRATAAS, A.; KENT, A. D.; OHNO, H. Current-induced torques in magnetic materials. *Nature materials*, Nature Publishing Group UK London, v. 11, n. 5, p. 372–381, 2012.

- ¹⁵ BERGER, L. Prediction of a domain-drag effect in uniaxial, non-compensated, ferromagnetic metals. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Elsevier, v. 35, n. 8, p. 947–956, 1974.
- ¹⁶ FREITAS, P.; BERGER, L. Observation of s-d exchange force between domain walls and electric current in very thin permalloy films. *Journal of Applied Physics*, American Institute of Physics, v. 57, n. 4, p. 1266–1269, 1985.
- ¹⁷ CHERNYSHOV, A. et al. Evidence for reversible control of magnetization in a ferromagnetic material by means of spin-orbit magnetic field. *Nature Physics*, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 9, p. 656–659, 2009.
- ¹⁸ YANG, S. et al. Fundamentals and applications of the skyrmion hall effect. *Applied Physics Reviews*, AIP Publishing, v. 11, n. 4, 2024.
- ¹⁹ NAGAOSA, N.; TOKURA, Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 12, p. 899, 2013.
- ²⁰ JIANG, W. et al. Direct observation of the skyrmion Hall effect. *Nature Physics*, v. 13, n. 2, p. 162–169, 2017. ISSN 17452481.
- ²¹ CHEN, G. Skyrmion hall effect. *Nature Physics*, Nature Publishing Group UK London, v. 13, n. 2, p. 112–113, 2017.
- ²² BARKER, J.; TRETIKOV, O. A. Static and dynamical properties of antiferromagnetic skyrmions in the presence of applied current and temperature. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 116, p. 147203, Apr 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.147203>>.
- ²³ GÖBEL, B. et al. Antiferromagnetic skyrmion crystals: Generation, topological hall, and topological spin hall effect. *Physical Review B*, APS, v. 96, n. 6, p. 060406, 2017.
- ²⁴ JIN, C. et al. Dynamics of antiferromagnetic skyrmion driven by the spin hall effect. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing LLC, v. 109, n. 18, p. 182404, 2016.
- ²⁵ VELKOV, H. et al. Phenomenology of current-induced skyrmion motion in antiferromagnets. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 18, n. 7, p. 075016, 2016.
- ²⁶ DJAVID, N.; LAKE, R. K. Electron transport through antiferromagnetic spin textures and skyrmions in a magnetic tunnel junction. *Physical Review B*, APS, v. 102, n. 2, p. 024419, 2020.
- ²⁷ BINDAL, N. et al. Antiferromagnetic skyrmion-based energy-efficient leaky integrate and fire neuron device. *Nanotechnology*, IOP Publishing, v. 36, n. 16, p. 165201, mar 2025. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-6528/adb8c1>>.
- ²⁸ GUAN, S. et al. Unidirectional localization and track-selection of antiferromagnetic skyrmions through tuning magnetocrystalline anisotropy barriers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 546, p. 168852, 2022.
- ²⁹ LIANG, X. et al. Dynamics of an antiferromagnetic skyrmion in a racetrack with a defect. *Physical Review B*, APS, v. 100, n. 14, p. 144439, 2019.

- ³⁰ SILVA, R. et al. Antiferromagnetic skyrmions overcoming obstacles in a racetrack. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 31, n. 22, p. 225802, 2019.
- ³¹ ZHANG, X. et al. Skyrmion-electronics: writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 32, n. 14, p. 143001, 2020.
- ³² RESNICK, R.; EISBERG, R. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. *Editora Campus*, 1979.
- ³³ GRIFFITHS, D. J. *Eletrodinâmica*. [S.l.]: Pearson/Addison-Wesley, 2011.
- ³⁴ COEY, J. M. *Magnetism and magnetic materials*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- ³⁵ GUIMARÃES, A. P.; OLIVEIRA, I. Magnetismo e ressonância magnética em sólidos. *São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo*, p. 22, 2009.
- ³⁶ KITTEL, C. et al. *Introduction to solid state physics*. [S.l.]: Wiley New York, 1976. v. 8.
- ³⁷ SPALDIN, N. A. *Magnetic materials: fundamentals and applications*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- ³⁸ HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Phys*, v. 49, p. 619, 1928.
- ³⁹ TOSCANO, D. *Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2015.
- ⁴⁰ JUNIOR, M. G. M. *Métodos em GPU para explorar a estabilidade topológica de nanomagnetos*. Tese (Tese (Doutorado)) — Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), Juiz de Fora, MG, Brasil, 2020.
- ⁴¹ DZIALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Elsevier, v. 4, n. 4, p. 241–255, 1958.
- ⁴² MORIYA, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review*, APS, v. 120, n. 1, p. 91, 1960.
- ⁴³ PEREZ, N. et al. Chiral magnetization textures stabilized by the dzyaloshinskii-moriya interaction during spin-orbit torque switching. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 104, n. 9, p. 092403, 2014.
- ⁴⁴ CAMLEY, R. E.; LIVESEY, K. L. Consequences of the dzyaloshinskii-moriya interaction. *Surface Science Reports*, Elsevier, v. 78, n. 3, p. 100605, 2023.
- ⁴⁵ FERT, A. et al. From early theories of dzyaloshinskii–moriya interactions in metallic systems to today’s novel roads. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 92, n. 8, p. 081001, 2023.
- ⁴⁶ YU, X. et al. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 465, n. 7300, p. 901–904, 2010.

- ⁴⁷ CREGG, P.; MURPHY, K.; MARDINOGLU, A. Inclusion of interactions in mathematical modelling of implant assisted magnetic drug targeting. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 1–34, 2012.
- ⁴⁸ NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum theory of magnetism*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.
- ⁴⁹ LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. et al. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z. Sowjetunion*, v. 8, n. 153, p. 101–114, 1935.
- ⁵⁰ GILBERT, T. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetism*, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.
- ⁵¹ MEHROTRA, S. On the implementation of a primal-dual interior point method. *SIAM Journal on optimization*, SIAM, v. 2, n. 4, p. 575–601, 1992.
- ⁵² BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; MEADE, D. B. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 9. ed. [S.l.]: Wiley New York, 1992.
- ⁵³ BERGER, L. Exchange interaction between ferromagnetic domain wall and electric current in very thin metallic films. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 55, n. 6, p. 1954–1956, 1984.
- ⁵⁴ SLONCZEWSKI, J. C. Current-driven excitation of magnetic multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 159, n. 1-2, p. L1–L7, 1996.
- ⁵⁵ ZHANG, S.; LI, Z. Roles of nonequilibrium conduction electrons on the magnetization dynamics of ferromagnets. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 12, p. 127204, 2004.
- ⁵⁶ BAZALIY, Y. B.; JONES, B.; ZHANG, S.-C. Modification of the landau-lifshitz equation in the presence of a spin-polarized current in colossal-and giant-magnetoresistive materials. *Physical Review B*, APS, v. 57, n. 6, p. R3213, 1998.
- ⁵⁷ TATARA, G.; KOHNO, H. Theory of current-driven domain wall motion: Spin transfer versus momentum transfer. *Physical review letters*, APS, v. 92, n. 8, p. 086601, 2004.
- ⁵⁸ SKYRME, T. H. R. A non-linear field theory. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 260, n. 1300, p. 127–138, 1961.
- ⁵⁹ SKYRME, T. H. R. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, Elsevier, v. 31, p. 556–569, 1962.
- ⁶⁰ FERT, A.; CROS, V.; SAMPAIO, J. Skyrmions on the track. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 3, p. 152, 2013.
- ⁶¹ WRIGHT, D. C.; MERMIN, N. D. Crystalline liquids: the blue phases. *Reviews of Modern physics*, APS, v. 61, n. 2, p. 385, 1989.

- ⁶² HO, T.-L. Spinor bose condensates in optical traps. *Physical review letters*, APS, v. 81, n. 4, p. 742, 1998.
- ⁶³ CHOI, J.-y. et al. Corrigendum: Imprinting skyrmion spin textures in spinor bose–einstein condensates (2012 new j. phys. 14 053013). *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 17, n. 6, p. 069501, 2015.
- ⁶⁴ MORICE, C. et al. Pseudo-spin skyrmions in the phase diagram of cuprate superconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 30, n. 29, p. 295601, 2018.
- ⁶⁵ BELAVIN, A.; POLYAKOV, A. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. *JETP lett*, v. 22, n. 10, p. 245–248, 1975.
- ⁶⁶ WIESENDANGER, R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics. *Nature Reviews Materials*, Nature Publishing Group, v. 1, n. 7, p. 1–11, 2016.
- ⁶⁷ FERT, A.; REYREN, N.; CROS, V. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. *Nature Reviews Materials*, Nature Publishing Group, v. 2, n. 7, p. 1–15, 2017.
- ⁶⁸ ZANG, J.; CROS, V.; HOFFMANN, A. *Topology in Magnetism*. [S.l.]: Springer, 2018. v. 192.
- ⁶⁹ BRAUN, H.-B. Topological effects in nanomagnetism: from superparamagnetism to chiral quantum solitons. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 61, n. 1, p. 1–116, 2012.
- ⁷⁰ ANDRIKOPOULOS, D.; SORÉE, B.; BOECK, J. D. Skyrmion-induced bound states on the surface of three-dimensional topological insulators. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 119, n. 19, p. 193903, 2016.
- ⁷¹ THIELE, A. Steady-state motion of magnetic domains. *Physical Review Letters*, APS, v. 30, n. 6, p. 230, 1973.
- ⁷² THIELE, A. Applications of the gyrocoupling vector and dissipation dyadic in the dynamics of magnetic domains. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 45, n. 1, p. 377–393, 1974.
- ⁷³ ZHANG, X. et al. Magnetic skyrmion transport in a nanotrack with spatially varying damping and non-adiabatic torque. *IEEE Transactions on Magnetics*, IEEE, v. 53, n. 3, p. 1–6, 2016.
- ⁷⁴ TOMASELLO, R. et al. A strategy for the design of skyrmion racetrack memories. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 4, n. 1, p. 1–7, 2014.
- ⁷⁵ LEIVISKÄ, M. et al. Antiferromagnetic skyrmions in spintronics. Working paper or preprint. 2024. Disponível em: <<https://hal.science/hal-04390931>>.
- ⁷⁶ FIDLER, J. et al. Micromagnetics: Basic principles. In: BUSCHOW, K. J. et al. (Ed.). *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. Oxford: Elsevier, 2001. p. 5642–5650. ISBN 978-0-08-043152-9. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B0080431526009840>>.

- ⁷⁷ MONTEIRO, M. G. J. *Simulação da Dinâmica Do Micromagnetismo de Vórtices Implementados em Plataformas de Programação em Paralelo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2016.
- ⁷⁸ BAZEIA, D.; DORIA, M. M.; RODRIGUES, E. I. B. Topological Excitations in Magnetic Materials. *Phys. Lett. A*, v. 380, p. 1947–1952, 2016.
- ⁷⁹ MOUTAFIS, C.; KOMINEAS, S.; BLAND, J. Dynamics and switching processes for magnetic bubbles in nanoelements. *Physical Review B*, APS, v. 79, n. 22, p. 224429, 2009.
- ⁸⁰ FARIAS, W.; SANTECE, I.; COURA, P. The influence of curved surfaces on the propagation of skyrmions in a magnetic racetrack. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 568, p. 170386, 2023.
- ⁸¹ BECKMAN, O.; KNOX, K. Magnetic properties of k₁mn₂f₃. i. crystallographic studies. *Physical Review*, APS, v. 121, n. 2, p. 376, 1961.
- ⁸² LIANG, X. et al. Dynamics of an antiferromagnetic skyrmion in a racetrack with a defect. *Physical Review B*, APS, v. 100, n. 14, p. 144439, 2019.
- ⁸³ JIN, C. et al. Dynamics of antiferromagnetic skyrmion driven by the spin hall effect. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 109, n. 18, 2016.
- ⁸⁴ CHAPPERT, C. et al. Planar patterned magnetic media obtained by ion irradiation. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 280, n. 5371, p. 1919–1922, 1998.
- ⁸⁵ FASSBENDER, J.; MCCORD, J. Magnetic patterning by means of ion irradiation and implantation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 320, n. 3-4, p. 579–596, 2008.
- ⁸⁶ SÁNCHEZ-BARRIGA, J. et al. Interplay between the magnetic anisotropy contributions of cobalt nanowires. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 80, n. 18, p. 184424, 2009.
- ⁸⁷ FERT, A.; PIRAUX, L. Magnetic nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 200, n. 1-3, p. 338–358, 1999.
- ⁸⁸ TOSCANO, D. et al. Traps for pinning and scattering of antiferromagnetic skyrmions via magnetic properties engineering. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 127, n. 19, 2020.
- ⁸⁹ TOSCANO, D. et al. Building traps for skyrmions by the incorporation of magnetic defects into nanomagnets: Pinning and scattering traps by magnetic properties engineering. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier B.V., v. 480, n. January, p. 171–185, 2019. ISSN 03048853. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.02.075>>.
- ⁹⁰ ROHART, S.; THIAVILLE, A. Skyrmion confinement in ultrathin film nanostructures in the presence of dzyaloshinskii-moriya interaction. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 88, n. 18, p. 184422, 2013.

-
- ⁹¹ WANG, J. et al. Spontaneous creation and annihilation dynamics of magnetic skyrmions at elevated temperature. *Physical Review B*, APS, v. 104, n. 5, p. 054420, 2021.
- ⁹² PAIXÃO, E. L. M. d. *Estudo da parede de domínio transversal na presença de impurezas magnéticas sob efeito de corrente elétrica polarizada em spin via simulação micromagnética*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2018.

APÊNDICE A - A Equação Explícita de Landau-Lifshitz-Gilbert

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), que descreve a dinâmica de precessão e relaxação do momento magnético sob a ação de um campo efetivo, é expressa na forma implícita por:

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

onde $\vec{\mu}$ é o momento magnético, γ é a razão giromagnética, α é o coeficiente de amortecimento de Gilbert e $\vec{B}^{ef}$ é o campo efetivo. Essa expressão é conhecida como a forma implícita, pois a derivada temporal $d\vec{\mu}/dt$ aparece em ambos os lados da equação. Podemos obter a forma explícita da equação LLG tomando o produto vetorial de $\vec{\mu}$ com ambos os lados da equação (A.1):

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

Utilizando a seguinte identidade vetorial no segundo termo da equação:

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

podemos escrever

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

Verificamos, a partir da equação (2.50), que o termo escalar $\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}$ é nulo, uma vez que o módulo do vetor $\vec{\mu}$ é constante ao longo do tempo. Logo, a equação A.2 pode ser simplificada:

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \frac{\alpha}{\mu} (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (\text{A.5})$$

Como $\vec{\mu} \cdot \vec{\mu} = \mu^2$, a equação A.5 pode ser reescrita como:

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) = -\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha\mu \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (\text{A.6})$$

Substituindo a equação acima na equação implícita de LLG (equação 2.45), obtemos:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu\gamma} \left[-\gamma\vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha\mu \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right], \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} - \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (\text{A.8})$$

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

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} - \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}). \quad (\text{A.9})$$

Chegando, finalmente, na forma explícita da equação LLG.

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{\mu} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) \right]. \quad (\text{A.10})$$

APÊNDICE B - O Termo de Corrente da Equação LLG

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) descreve a dinâmica da magnetização sob a ação do campo efetivo $\vec{B}^{ef}$ e do termo de amortecimento dissipativo. Porém, a aplicação de uma corrente de spin polarizada induz torques adicionais sobre a magnetização^{53,54}, os quais não estão contemplados na formulação original da equação. Nesse contexto, um novo termo foi proposto por S. Zhang e Z. Li a partir da separação dos elétrons em dois grupos: os elétrons de condução, que possuem energia suficiente para se mover livremente no material, e os elétrons localizados, que não participam do transporte de corrente, porém contribuem para a magnetização⁵⁵. A partir de uma hamiltoniana do tipo $s - d$, foi proposto um torque de spin, conhecido como torque de transferência de spin, cuja formulação apresentaremos a seguir.

Considerando a dinâmica do elétron de condução separadamente da magnetização local, $\vec{s}$ será considerado um operador quântico cuja equação de movimento é governada por uma equação de transporte e $\vec{S}$ será aproximado como um vetor de magnetização clássico¹, isto é⁵⁵:

$$\vec{S} = -\frac{S}{M_s} \vec{M}. \quad (\text{B.1})$$

Podemos escrever a hamiltoniana s-d na forma:

$$H_{sd} = J_{ex} \vec{s} \cdot \vec{S} = \frac{J_{ex} S}{M_s} \vec{s} \cdot \vec{M}. \quad (\text{B.2})$$

O operador $\vec{s}$, que representa o spin dos elétrons de condução, satisfaz a equação generalizada da continuidade de spin⁵⁵:

$$\frac{\partial \vec{s}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \hat{J} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{S}, H_{sd}] - \Gamma_{re}(\vec{S}), \quad (\text{B.3})$$

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.

Ao tomar a média estatística dos termos da equação acima, obtemos:

$$\left\langle \frac{\partial \vec{s}}{\partial t} \right\rangle + \langle \vec{\nabla} \cdot \hat{J} \rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\vec{S}, H_{sd}] \right\rangle - \langle \Gamma_{re}(\vec{S}) \rangle, \quad (\text{B.4})$$

teremos,

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = \left\langle \frac{d\vec{s}}{dt} \right\rangle - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (\text{B.5})$$

onde foram definidas $\langle \vec{s} \rangle = \vec{\mu}(\vec{r}, t)$ a densidade de spin do elétron e $\langle \hat{J} \rangle = \vec{J}(\vec{r}, t)$.

¹ Dado que a dinâmica dos spins localizados é expressivamente mais lenta que a dos spins de condução.

A derivada $\frac{d\vec{s}}{dt}$, conforme as equações 2.39 e 2.40, representa um torque adimensional e pode ser representada na forma:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{s} \times \frac{\partial H_{sd}}{\partial \vec{s}} = \frac{1}{\hbar} \vec{s} \times \frac{SJ_{ex}}{M_s} \vec{M} = \frac{SJ_{ex}}{\hbar M_s} \langle \vec{s} \times \vec{M} \rangle. \quad (\text{B.6})$$

Substituindo a equação B.6 na equação B.5, temos

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \langle \vec{s} \times \vec{M} \rangle - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (\text{B.7})$$

logo,

$$\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{\mu} \times \vec{M} - \langle \Gamma(\vec{S}) \rangle, \quad (\text{B.8})$$

onde $\tau_{ex} = \frac{\hbar}{SJ_{ex}}$. A densidade de spin induzido $\vec{\mu}$ pode ser representada pela soma de dois termos⁵⁵:

$$\vec{\mu}(\vec{r}, t) = \vec{\mu}_0(\vec{r}, t) + \delta\vec{\mu}(\vec{r}, t) = \eta_0 \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta\vec{\mu}(\vec{r}, t), \quad (\text{B.9})$$

onde η_0 é a densidade de spin de equilíbrio local paralela à magnetização. O termo $\vec{\mu}_0(\vec{r}, t)$ corresponde à densidade de spin adiabático, no instante t em que o spin do elétron de condução obtém seu valor de equilíbrio. Já o segundo termo, $\delta\vec{\mu}(\vec{r}, t)$, é o desvio a partir deste processo adiabático.

De forma análoga à equação B.9, a densidade de corrente de spin $\vec{J}(\vec{r}, t)$ pode ser decomposta em duas contribuições:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_0(\vec{r}, t) + \delta\vec{J}(\vec{r}, t) = -\left(\frac{\mu_B P}{e}\right) \vec{j}_e \otimes \frac{\vec{M}_0(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta\vec{J}(\vec{r}, t), \quad (\text{B.10})$$

onde $\vec{j}_e$ é a densidade de corrente elétrica, e é a carga do elétron, μ_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 estabelecido as expressões para a densidade de spin $\vec{\mu}(\vec{r}, t)$ e para a densidade de corrente de spin $\vec{J}(\vec{r}, t)$, podemos substituí-las na equação B.8 a fim de obter uma equação efetiva para o acoplamento entre a magnetização e os portadores de spin fora do equilíbrio:

$$D_o \nabla^2 \delta\vec{\mu} - \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta\vec{\mu} \times \vec{M} - \frac{\delta\vec{\mu}}{\tau_{sf}} = \frac{\eta_0}{M_s} \cdot \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{e M_s} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M}. \quad (\text{B.11})$$

Os detalhes dos cálculos podem ser encontrados no Apêndice C da Ref.⁹². Nesta aproximação considera-se que $\langle \Gamma(\vec{S}) \rangle = \frac{\delta\vec{\mu}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}}$ onde τ_{sf} é o tempo de relaxação “*spin flip*”. Além disso, assume-se que a densidade de corrente de spin não adiabática está relacionada ao gradiente da densidade de spin fora do equilíbrio por $\delta\vec{J} = D_0 \nabla \delta\vec{\mu}$, com D_0 sendo o coeficiente de difusão de spin. O lado direito da igualdade da equação B.11 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 lentamente⁵⁵, podemos descartar o termo $D_o \nabla^2 \delta \vec{\mu}$ da equação. Considerando $\beta = \frac{\tau_{ex}}{\tau_{sf}}$, reescrevemos a equação B.11 na forma:

$$\delta \vec{\mu} = \frac{\tau_{ex}}{1 + \beta} \left[-\frac{\beta \eta_0}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\eta_0}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\beta \mu_B P}{e M_s} (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} + \frac{\mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} \right]. \quad (\text{B.12})$$

A densidade de spin fora do equilíbrio, $\delta \vec{\mu}$, atua sobre os momentos magnéticos localizados exercendo um torque de spin⁵⁵, cuja forma geral, obtida a partir da Hamiltoniana do tipo s - d (Eq. (B.2)), é dada por:

$$\vec{T} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \delta \vec{\mu}. \quad (\text{B.13})$$

Substituindo a equação B.12 na equação acima, obtemos explicitamente a forma do torque de spin efetivo sobre a magnetização, causada pela densidade de spin induzida $\delta \vec{\mu}$:

$$\vec{T} = \frac{1}{1 + \beta^2} \left[-\frac{\beta \eta_0}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\eta_0}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{e M_s^3} \vec{M} \times [\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M}] - \frac{\beta \mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} \right]. \quad (\text{B.14})$$

A análise da equação B.14 revela que o torque $\vec{T}$ possui duas origens distintas. Os dois primeiros termos estão associados à variação da magnetização no tempo, de forma independente da corrente elétrica. Já os últimos dois termos, dependem da densidade de corrente induzida $\vec{j}_e$ e estão relacionados às variações espaciais de $\vec{M}$ ao longo da direção da corrente.

Diante do exposto, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (Eq. (2.45)) deve ser modificada para incluir o torque resultante da interação entre a magnetização e a corrente de spin polarizada. A equação estendida assume então a forma:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma \vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_s} \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) + \vec{T}. \quad (\text{B.15})$$

Os termos, comentados acima, relacionados à variação temporal da magnetização podem ser incorporados na redefinição da razão γ e da constante de amortecimento α ²⁵⁵. Por consequência, podemos reescrever a equação B.15, na forma

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

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} = & -\gamma \vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_S} \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) - \frac{1}{(1+\beta^2)} \frac{\mu_B P}{eM_s^3} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times \left(\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{M} \right] \\ & - \frac{1}{(1+\beta^2)} \frac{\beta \mu_B P}{eM_s^2} \vec{M} \times \left(\vec{j}_e \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{M}. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Considerando que a corrente é aplicada apenas na direção x , e reescrevendo a equação em função dos termos v_j adiabático^{56,57} e c_j não adiabáticos⁵⁵, temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} = & -\gamma \vec{M} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{M_S} \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right) - \frac{v_j}{M_s^2} \vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dx} \right) \\ & - \frac{c_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dx}, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

onde,

$$v_j = \frac{P j_e \mu_B}{e M_s (1 + \beta^2)}, \quad (\text{B.18})$$

$$c_j = \beta v_j. \quad (\text{B.19})$$

possuem unidades de velocidade.

APÊNDICE C - Potencial de aplicação da metodologia a múltiplos sistemas materiais

Neste trabalho, focamos na obtenção do controle posicional de skyrmions anti-ferromagnéticos (AFM) no sistema $KMnF_3/Pt$ por meio da engenharia de impurezas magnéticas, obtida pela alteração estratégica dos parâmetros do Hamiltoniano micro-magnético. Embora não tenhamos feito comparações diretas com outros materiais AFM, investigamos sistematicamente razões adimensionais:

- λ_A (troca);
- λ_K (anisotropia);
- λ_D (interação de Dzyaloshinskii-Moriya);
- λ_M (magnetização de saturação);

para elucidar como variações isoladas ou combinadas desses parâmetros alteram a interação entre o skyrmion e a impureza. Essa metodologia oferece uma estrutura versátil para simular materiais reais e hipotéticos, possibilitando uma análise controlada do acoplamento entre skyrmions e defeitos magnéticos.

Como exemplo, selecionamos um conjunto de parâmetros para estabilizar um skyrmion AFM hipotético (distinto do sistema $KMnF_3/Pt$) na nanofita:

- Constante de troca: $A = -1,8 \times 10^{-11} \text{ J/m}$
- Magnetização: $M = 6,5 \times 10^{-5} \text{ A/m}$
- Anisotropia uniaxial: $K = 1,45 \times 10^5 \text{ J/m}^3$
- IDM: $D = 1,6 \times 10^{-3} \text{ J/m}^2$
- Amortecimento: $\alpha = 0,1$
- Tamanho da célula: $a = 1 \text{ nm}$

Essa seleção garante a estabilidade do skyrmion, ao mesmo tempo em que permite uma exploração para além das limitações do material que utilizamos como referência.

A partir da análise do perfil de energia de interação, observamos o mesmo comportamento descrito no trabalho:

$$\lambda_A = \frac{A_G}{A}, \quad \lambda_M = \frac{M_G}{M}, \quad \lambda_K = \frac{K_G}{K} \begin{cases} \text{atrativa se} & < 1,0 \\ \text{repulsiva se} & > 1,0 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

$$\lambda_D = \frac{D_G}{D} \begin{cases} \text{repulsiva se } > 1,0 \\ \text{atrativa se } < 1,0 \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

como podemos observar nos perfis de energia apresentados na Figura C.1.

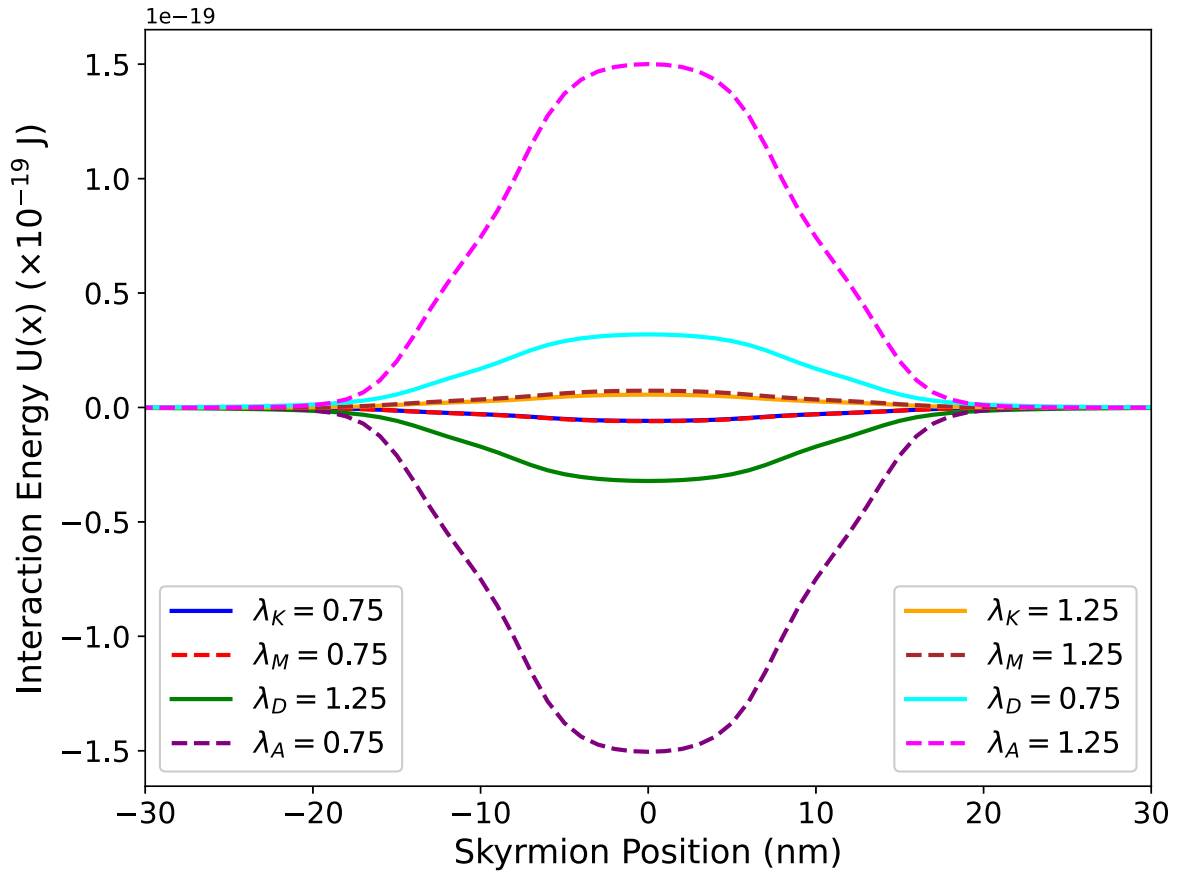


Figura C.1 – Perfis de energia de interação entre um skyrmion e uma impureza para diferentes razões de λ_A , λ_K , λ_M e λ_D de uma material hipotético. Foram observados perfis tanto atrativos quanto repulsivos, consistentes com os resultados apresentados neste trabalho. Todas as simulações foram realizadas com $r_{\text{imp}} = 11$ nm.

Como pudemos observar, a metodologia proposta em nosso trabalho oferece uma estrutura flexível e generalizável, capaz de ser aplicada a qualquer material antiferromagnético, desde que os parâmetros locais e do meio anfitrião sejam expressos por meio das razões λ_A , λ_K , λ_D e λ_M . Essa abordagem permite não apenas a reprodução de sistemas reais, mas também a simulação de cenários hipotéticos de forma controlada, o que pode favorecer investigações futuras em uma ampla variedade de materiais e contextos físicos.